

ХАРАКТЕРИСТИКИ ФОТОДИССОЦИОННЫХ РЕАКЦИЙ В E- И D-СЛОЯХ ИОНОСФЕРЫ ЗЕМЛИ

Ю.А. Корсунская, А.С. Стрелков

В работе рассматриваются фотодиссоционные процессы, входящие в системы уравнений химической кинетики заряженных и нейтральных компонент на высотах E и D-слоев ионосферы. В комплекс фотодиссоционных процессов включены реакции диссоциации молекул кислородной, водородной, азотной и углеродной групп с использованием уточненных значений сечений диссоциации и абсорбции, а также интервалов длин волн определения этих реакций. Разработан комплекс подпрограмм расчета скоростей ионообразования и коэффициентов скоростей реакций фотодиссоциации, предназначенный для использования в программах решения систем уравнений химической кинетики.

Введение

Фотодиссоционные процессы, протекающие в атмосфере Земли, запускают сложную последовательность аэрономических реакций, определяющих концентрации малых нейтральных компонент атмосферы, которые в свою очередь задают динамику изменения заряженных компонент ионосферы.

Число фотодиссоциаций (ФД), протекающих в единице объема за единицу времени (*Rate*), определяется интегральным выражением:

$$Rate(h, \chi) = Part(h) \cdot DisInt(h, \chi),$$

$$DisInt(h, \chi) = \int_{\lambda_{min}}^{\lambda_{max}} Flux(\lambda) \cdot \sigma_{Part}^{Dis}(\lambda) \cdot \exp(-\tau(\lambda, h, \chi)) d\lambda, \quad (1)$$

где $Part(h)$ – концентрация диссоциирующих частиц, $Flux(\lambda)$ – плотность потока квантов с длиной волны λ , $\sigma_{Part}^{Dis}(\lambda)$ – сечение диссоциации, $\tau(\lambda, h, \chi)$ – оптическая толщина поглощения излучения с длиной волны λ для высоты h и зенитного угла Солнца χ . Диссоциативный интеграл (1) имеет размерность c^{-1} и представляет собой коэффициент реакции.

В системах кинетических уравнений нейтральных и заряженных компонент ионосферы $DisInt(h, \chi)$ часто задается в виде экспоненциальной аппроксимации

$$DisInt(h, \chi) = A(h) \cdot \exp(-B(h)/\cos \chi). \quad (2)$$

Такое приближение использовано в модели D-слоя ионосферы, описанной в [Журавлева, Кудрявцев, 1994; Кудрявцев, Романюха, 1995]. Сами значения коэффициентов A и B определены на основе диссоционных сечений, взятых в основном из работ 1980 годов, таких как [Baulch et al., 1980; Петропавловских и др., 1983]. Анализ этих работ показывает, что для ряда реакций использованы сечения, осредненные по большим интервалам длин волн. В других случаях интервал задания сечений не перекрывает всего энергетического интервала, на котором протекает ре-

акция. Вместе с тем, с 1980-х годов опубликовано много работ, посвященных измерениям сечений отдельных фотореакций, а также работ обзорного характера. На основе этого материала был выполнен анализ имеющихся в настоящее время данных о сечениях, проведен их отбор и компиляция из ряда публикаций, что позволило получить значения фотодиссоционных сечений $\sigma_{Part}^{Dis}(\lambda)$ для большинства реакций во всем интервале длин волн λ , на котором они определены. Были также уточнены сечения абсорбции молекулярного кислорода O_2 , который является основным агентом, поглощающим солнечную энергию в интересующем диапазоне λ .

Реакции фотодиссоциации на высотах E и D-слоев ионосферы

На высотах E и D-слоев ионосферы $h \sim 30 \div 150$ км оптическое и ультрафиолетовое излучение Солнца вызывает фотодиссоциацию как основных, так и малых составляющих атмосферы, участвующих во многих реакциях. При построении физико-математической модели химической кинетики нейтральных и заряженных компонент ионосферной плазмы учитывается только часть этих процессов, связанная с фотодиссоциацией молекул кислородной, азотной, водородной и углеродной групп. Список рассмотренных фотореакций приведен в таблице 1. В ней указаны: диссоциирующая молекула, продукты реакции и диапазон λ ее протекания. Если для молекулы рассматривается несколько реакций, то в квадратных скобках указывается ее номер (меньшему номеру соответствует реакция, определенная в более жесткой части спектра).

Таблица 1

Список реакций фотодиссоциации

Кислородная группа			Углеродная группа		
$O_2[1]$	$\rightarrow O(^3P) + O(^1D)$	104.0÷175.0 нм	CO_2	$\rightarrow CO + O(^3P)$	102÷201.6 нм
$O_2[2]$	$\rightarrow O(^3P) + O(^3P)$	175.0÷242.2 нм	Азотная группа		
$O_3[1]$	$\rightarrow O_2(^1\Delta_g) + O(^1D)$	103.8÷315 нм	N_2	$\rightarrow N(^2D) + N(^4S)$	52÷127 нм
$O_3[2]$	$\rightarrow O_2(^1\Delta_g) + O(^3P)$	304÷403 нм	$NO_2[1]$	$\rightarrow NO + O(^1D)$	80÷244 нм
$O_3[3]$	$\rightarrow O_2 + O(^3P)$	404÷788 нм	$NO_2[2]$	$\rightarrow NO + O(^3P)$	244÷423 нм
Водородная группа			$N_2O[1]$	$\rightarrow NO + N(^4S)$	108.2÷130 нм
H_2O	$\rightarrow H + OH$	104÷194 нм	$N_2O[2]$	$\rightarrow N_2 + O(^1D)$	131.6÷316.5 нм
HO_2	$\rightarrow OH + O(^3P)$	190÷260 нм	$NO[1]$	$\rightarrow N(^4S) + O(^1D)$	106÷132.5 нм
H_2O_2	$\rightarrow OH + OH$	200÷350 нм	$NO[2]$	$\rightarrow N(^4S) + O(^3P)$	175÷201 нм

Для расчетов скоростей реакций была создана программа, позволяющая производить расчеты на заданной высоте над любой географической точкой с учетом сезонных изменений параметров атмосферы и солнечной активности. Значения $\tau(\lambda, h, \chi)$ находятся с учетом направления на Солнце и распределения O_2 , полученного по модели MSIS-90. Значения коэффициентов A и B , приведенные в настоящей статье, получены при $\chi = 0$, для точки 50° СШ, $0,0^\circ$ ВД, 196 дня года, UT 12:00 при низкой солнечной активности ($F_{10.7} = 110$, $A_p = 4$). Спектральные потоки солнечного излучения взяты согласно рекомендациям LASP для спокойного Солнца, с сайта [LASP]. Результаты для всех групп реакций сведены в таблицы 2–6.

Константы *A* и *B* экспоненциальной аппроксимации *DisInt* реакций молекул кислородной группы

h_ν КМ	Молекулярный кислород						Озон					
	$O_2 + hv \rightarrow O(^1P) + O(^1D)$			$O_2 + hv \rightarrow O(^3P) + O(^3P)$			$O_3 + hv \rightarrow O_2(^1\Delta_g) + O(^1D)$			$O_3 + hv \rightarrow O_2(^1\Delta_g) + O(^3P)$		
	<i>B</i>	<i>A</i>	<i>B</i>	<i>A</i>	<i>B</i>	<i>A</i>	<i>B</i>	<i>A</i>	<i>B</i>	<i>A</i>	<i>B</i>	<i>A</i>
120	2.462E-1	2.535E-6	3.507E-3	1.210E-7	3.559E-5	7.634E-3	0.000E+0	1.017E-4	0.000E+0	1.017E-4	0.000E+0	3.550E-4
115	4.157E-1	2.445E-6	6.623E-3	1.210E-7	4.745E-5	7.634E-3	0.000E+0	1.017E-4	0.000E+0	1.017E-4	0.000E+0	3.550E-4
110	6.704E-1	2.113E-6	1.377E-2	1.210E-7	5.536E-5	7.634E-3	0.000E+0	1.017E-4	0.000E+0	1.017E-4	0.000E+0	3.550E-4
105	8.442E-1	1.354E-6	3.020E-2	1.210E-7	5.932E-5	7.634E-3	0.000E+0	1.017E-4	0.000E+0	1.017E-4	0.000E+0	3.550E-4
100	9.249E-1	7.007E-7	6.839E-2	1.208E-7	6.723E-5	7.633E-3	0.000E+0	1.017E-4	0.000E+0	1.017E-4	0.000E+0	3.550E-4
95	1.211E+0	3.449E-7	1.665E-1	1.201E-7	9.097E-5	7.633E-3	0.000E+0	1.017E-4	0.000E+0	1.017E-4	0.000E+0	3.550E-4
90	1.604E+0	1.075E-7	4.112E-1	1.140E-7	1.622E-4	7.632E-3	0.000E+0	1.017E-4	0.000E+0	1.017E-4	0.000E+0	3.550E-4
85	6.721E-1	1.042E-8	7.547E-1	8.262E-8	2.967E-4	7.631E-3	1.392E-5	1.017E-4	1.392E-5	1.017E-4	0.000E+0	3.550E-4
80	7.739E-1	5.975E-9	8.774E-1	3.814E-8	4.987E-4	7.630E-3	1.856E-5	1.017E-4	1.856E-5	1.017E-4	0.000E+0	3.550E-4
75	1.670E+0	4.885E-9	7.536E-1	1.518E-8	5.505E-4	7.626E-3	3.711E-5	1.017E-4	3.711E-5	1.017E-4	1.063E-5	3.550E-4
70	3.446E+0	3.497E-9	6.357E-1	7.446E-9	5.626E-4	7.623E-3	1.021E-4	1.017E-4	1.021E-4	1.017E-4	1.594E-5	3.550E-4
65	6.443E+0	1.613E-9	5.484E-1	4.262E-9	1.015E-3	7.622E-3	2.134E-4	1.017E-4	2.134E-4	1.017E-4	2.657E-5	3.550E-4
60	1.232E+1	8.841E-10	4.621E-1	2.705E-9	1.976E-3	7.621E-3	4.502E-4	1.017E-4	4.502E-4	1.017E-4	7.441E-5	3.550E-4
55	2.313E+1	4.777E-10	3.554E-1	1.845E-9	3.729E-3	7.621E-3	9.658E-4	1.017E-4	9.658E-4	1.017E-4	9.567E-5	3.550E-4
50	3.646E+1	2.650E-12	2.388E-1	1.361E-9	6.909E-3	7.620E-3	1.761E-3	1.017E-4	1.761E-3	1.017E-4	2.658E-4	3.550E-4
45	6.636E+1	1.206E-12	1.746E-1	1.126E-9	1.277E-2	7.620E-3	3.440E-3	1.017E-4	3.440E-3	1.017E-4	4.998E-4	3.550E-4
40			1.758E-1	1.012E-9	2.376E-2	7.619E-3	6.176E-3	1.017E-4	6.176E-3	1.017E-4	8.298E-4	3.550E-4
35			2.369E-1	9.427E-10	4.497E-2	7.615E-3	1.201E-2	1.017E-4	1.201E-2	1.017E-4	1.698E-3	3.550E-4
30			3.950E-1	8.926E-10	8.785E-2	7.602E-3	2.403E-2	1.017E-4	2.403E-2	1.017E-4	3.343E-3	3.550E-4

Таблица 3

Константы *A* и *B*
экспоненциальной аппроксимации *Dis/Int*
реакций водородной группы

<i>h</i> км	$H_2O + hv \rightarrow H + OH$		$HO_2 + hv \rightarrow OH + O(^3P)$		$H_2O_2 + hv \rightarrow OH + OH$	
	<i>B</i>	<i>A</i>	<i>B</i>	<i>A</i>	<i>B</i>	<i>A</i>
120	2.029E-2	1.042E-5	0.000E+0	5.144E-4	0.000E+0	9.467E-5
115	3.404E-2	1.038E-5	0.000E+0	5.144E-4	0.000E+0	9.467E-5
110	5.713E-2	1.028E-5	0.000E+0	5.144E-4	0.000E+0	9.467E-5
105	8.797E-2	1.001E-5	7.336E-6	5.144E-4	0.000E+0	9.467E-5
100	1.238E-1	9.493E-6	1.467E-5	5.144E-4	4.982E-6	9.467E-5
95	1.611E-1	8.605E-6	2.934E-5	5.144E-4	1.495E-5	9.467E-5
90	2.059E-1	7.389E-6	1.027E-4	5.144E-4	1.495E-5	9.467E-5
85	3.276E-1	6.252E-6	2.862E-4	5.144E-4	3.986E-5	9.466E-5
80	6.819E-1	5.387E-6	8.076E-4	5.144E-4	1.495E-4	9.467E-5
75	1.539E+0	4.679E-6	2.088E-3	5.143E-4	4.087E-4	9.467E-5
70	3.072E+0	3.159E-6	4.563E-3	5.142E-4	8.827E-4	9.466E-5
65	3.105E+0	2.001E-7	8.632E-3	5.137E-4	1.987E-3	9.467E-5
60	1.443E+0	9.459E-9	1.424E-2	5.124E-4	4.022E-3	9.466E-5
55	2.077E+0	5.703E-9	2.178E-2	5.102E-4	7.874E-3	9.467E-5
50	3.237E+0	3.536E-9	3.385E-2	5.077E-4	1.458E-2	9.466E-5
45	5.208E+0	1.955E-9	5.604E-2	5.051E-4	2.658E-2	9.463E-5
40	8.624E+0	8.529E-10	9.740E-2	5.023E-4	4.869E-2	9.454E-5
35	1.536E+1	3.630E-10	1.764E-1	4.984E-4	8.955E-2	9.426E-5
30	2.972E+1	1.797E-10	3.321E-1	4.909E-4	1.629E-1	9.312E-5

Таблица 4

Константы *A* и *B*
экспоненциальной аппроксимации *Dis/Int*
реакций углеродной группы

<i>h</i> км	$CO_2 + hv \rightarrow CO + O(^3P)$	
	<i>B</i>	<i>A</i>
120	7.951E-2	4.438E-7
115	1.320E-1	4.379E-7
110	2.159E-1	4.193E-7
105	3.230E-1	3.767E-7
100	4.158E-1	3.014E-7
95	4.092E-1	2.013E-7
90	4.007E-1	1.285E-7
85	5.551E-1	9.036E-8
80	1.024E+0	6.375E-8
75	1.726E+0	3.585E-8
70	2.908E+0	1.646E-8
65	1.836E+0	6.075E-10
60	7.683E-1	9.711E-11
55	7.964E-1	5.915E-11
50	7.678E-1	3.497E-11
45	7.902E-1	2.216E-11
40	9.613E-1	1.525E-11
35	1.298E+0	1.028E-11
30	1.939E+0	6.468E-12

Константы *A* и *B* экспоненциальной аппроксимации *DisInt*
реакций азотной группы

<i>h</i> км	$N_2 + hv \rightarrow N + N$		$NO_2 + hv \rightarrow NO + O(^1D)$		$NO_2 + hv \rightarrow NO + O(^3P)$		$N_2O + hv \rightarrow NO + N$		$N_2O + hv \rightarrow N_2 + O(^3P)$	
	<i>B</i>	<i>A</i>	<i>B</i>	<i>A</i>	<i>B</i>	<i>A</i>	<i>B</i>	<i>A</i>	<i>B</i>	<i>A</i>
120	4.352E-1	1.297E-7	1.124E-2	8.730E-5	0.000E+0	8.514E-3	1.523E-2	1.790E-6	1.584E-2	1.227E-6
115	7.684E-1	1.248E-7	1.662E-2	8.700E-5	0.000E+0	8.514E-3	2.527E-2	1.785E-6	2.135E-2	1.219E-6
110	1.438E+0	1.104E-7	2.223E-2	8.623E-5	0.000E+0	8.514E-3	4.485E-2	1.775E-6	2.200E-2	1.200E-6
105	2.522E+0	6.831E-8	2.577E-2	8.488E-5	0.000E+0	8.514E-3	8.305E-2	1.756E-6	1.639E-2	1.175E-6
100	3.349E+0	1.299E-8	2.968E-2	8.325E-5	0.000E+0	8.514E-3	1.498E-1	1.705E-6	1.823E-2	1.161E-6
95	7.309E+0	6.924E-9	3.493E-2	8.117E-5	0.000E+0	8.514E-3	2.310E-1	1.541E-6	2.660E-2	1.147E-6
90	2.145E+1	6.828E-9	4.290E-2	7.846E-5	0.000E+0	8.514E-3	2.597E-1	1.208E-6	4.443E-2	1.124E-6
85	6.609E+1	6.777E-9	5.584E-2	7.519E-5	7.091E-6	8.514E-3	3.407E-1	9.482E-7	7.020E-2	1.081E-6
80			6.454E-2	7.105E-5	7.091E-6	8.514E-3	6.978E-1	8.092E-7	8.908E-2	1.011E-6
75			5.765E-2	6.644E-5	4.964E-5	8.514E-3	1.584E+0	7.051E-7	1.013E-1	9.347E-7
70			3.985E-2	6.257E-5	4.964E-5	8.514E-3	3.315E+0	5.298E-7	1.188E-1	8.656E-7
65			3.388E-2	6.046E-5	1.206E-4	8.514E-3	6.343E+0	2.777E-7	1.388E-1	7.976E-7
60			3.609E-2	5.909E-5	3.334E-4	8.514E-3	1.199E+1	1.354E-7	1.566E-1	7.293E-7
55			4.092E-2	5.788E-5	6.244E-4	8.514E-3	2.077E+1	1.950E-8	1.662E-1	6.609E-7
50			5.141E-2	5.684E-5	1.143E-3	8.514E-3	3.583E+1	2.479E-9	1.763E-1	5.994E-7
45			7.406E-2	5.597E-5	2.089E-3	8.514E-3	6.635E+1	2.281E-9	2.070E-1	5.495E-7
40			1.181E-1	5.513E-5	3.973E-3	8.514E-3			2.724E-1	5.054E-7
35			2.033E-1	5.420E-5	7.667E-3	8.514E-3			3.946E-1	4.607E-7
30			3.732E-1	5.292E-5	1.522E-2	8.513E-3			6.316E-1	4.121E-7

Константы A и B экспоненциальной аппроксимации DisInt
реакций молекул NO

h км	NO + hv → N + O(¹ D)						NO + hv → N + O(³ P)					
	Вариант 1		Вариант 2		Вариант 3		Вариант 1		Вариант 2		Вариант 3	
	B	A	B	A	B	A	B	A	B	A	B	A
120	7.750E-3	1.071E-6	7.427E-3	2.133E-7	2.445E-1	7.541E-7	6.812E-5	5.409E-7	1.044E-3	1.385E-6	5.633E-3	4.010E-6
115	1.142E-2	1.068E-6	1.195E-2	2.130E-7	3.546E-1	6.961E-7	1.158E-4	5.409E-7	1.957E-3	1.385E-6	8.481E-3	4.004E-6
110	1.610E-2	1.062E-6	1.941E-2	2.122E-7	4.191E-1	5.526E-7	2.657E-4	5.409E-7	4.099E-3	1.385E-6	1.141E-2	3.986E-6
105	2.339E-2	1.054E-6	3.287E-2	2.107E-7	3.137E-1	3.673E-7	5.453E-4	5.409E-7	8.948E-3	1.385E-6	1.321E-2	3.954E-6
100	3.888E-2	1.043E-6	5.757E-2	2.081E-7	2.127E-1	2.673E-7	1.255E-3	5.409E-7	1.999E-2	1.384E-6	1.717E-2	3.920E-6
95	6.509E-2	1.020E-6	9.445E-2	2.010E-7	1.250E-1	2.089E-7	3.281E-3	5.409E-7	4.670E-2	1.379E-6	2.518E-2	3.874E-6
90	1.167E-1	9.769E-7	1.398E-1	1.854E-7	1.399E-1	1.854E-7	9.547E-3	5.409E-7	1.053E-1	1.351E-6	3.846E-2	3.794E-6
85	2.663E-1	9.288E-7	2.640E-1	1.700E-7	2.640E-1	1.700E-7	8.620E-2	5.406E-7	1.871E-1	1.244E-6	5.593E-2	3.661E-6
80	6.686E-1	8.743E-7	6.616E-1	1.602E-7	6.616E-1	1.602E-7	7.770E-2	5.388E-7	2.624E-1	1.052E-6	6.575E-2	3.459E-6
75	1.575E+0	7.912E-7	1.567E+0	1.459E-7	1.567E+0	1.459E-7	1.729E-1	5.284E-7	2.837E-1	8.260E-7	5.839E-2	3.233E-6
70	3.339E+0	6.131E-7	3.330E+0	1.139E-7	3.330E+0	1.139E-7	3.018E-1	4.912E-7	3.740E-1	6.880E-7	6.251E-2	3.085E-6
65	6.464E+0	3.360E-7	6.462E+0	6.312E-8	6.462E+0	6.312E-8	4.318E-1	4.190E-7	5.396E-1	5.673E-7	6.833E-2	2.945E-6
60	1.234E+1	1.779E-7	1.235E+1	3.376E-8	1.235E+1	3.376E-8	5.803E-1	3.376E-7	7.076E-1	4.269E-7	6.447E-2	2.794E-6
55	2.275E+1	6.938E-8	2.288E+1	1.432E-8	2.288E+1	1.432E-8	6.722E-1	2.423E-7	7.542E-1	2.718E-7	5.394E-2	2.657E-6
50	3.633E+1	6.954E-10	3.638E+1	1.207E-10	3.638E+1	1.207E-10	7.460E-1	1.677E-7	7.611E-1	1.709E-7	5.502E-2	2.573E-6
45	6.643E+1	3.760E-10	6.643E+1	6.095E-11	6.643E+1	6.095E-11	1.000E+0	1.268E-7	1.000E+0	1.269E-7	7.648E-2	2.526E-6
40							1.265E+0	8.030E-8	1.263E+0	8.032E-8	1.197E-1	2.483E-6
35							1.504E+0	4.158E-8	1.502E+0	4.160E-8	2.114E-1	2.451E-6
30							2.450E+0	2.877E-8	2.444E+0	2.876E-8	4.070E-1	2.423E-6

Обсуждение полученных результатов

Ниже проводится сравнительный анализ результатов расчета диссоционных интегралов (коэффициентов диссоциации) $DisInt(h, \chi)$, полученных прямым интегрированием по уточненным данным, со значениями, которые были использованы ранее в работе [Журавлева, Кудрявцев, 1994]. Сравнение проводится при $\chi = 0^\circ$. Результаты расчетов приводятся в виде графиков. Новые зависимости показаны черными линиями, рядом с которыми помечено, какой молекуле или какой реакции они соответствуют. Старые данные показаны точками, соединенными серыми линиями. Эти данные приведены в указанной работе с шагом 10 км по высоте. Рядом с линиями написаны обозначения молекул или номера реакций согласно таблице 1. Для исключения разночтений на ряде графиков соответствия реакций и линий дополнительно показано стрелочками.

Кислородная группа. Основные изменения сечений для реакций фотодиссоциации O_2 сделаны как в части величин сечений, так и в расширении интервала длин волн их задания от 75 до 788 нм. Результаты расчетов приведены на рис. 1, откуда следует, что изменения $DisInt(h)$ реакции $O_2[2]$ невелики, за исключением высот менее 40 км. Скорости реакции $O_2[1]$ на высотах 60–80 км расходятся более чем на порядок. Высотные профили $DisInt(h)$ реакций O_3 практически совпали. Расхождение на высотах 45 км и ниже может быть связано с завышенной оценкой поглощения потока излучения.

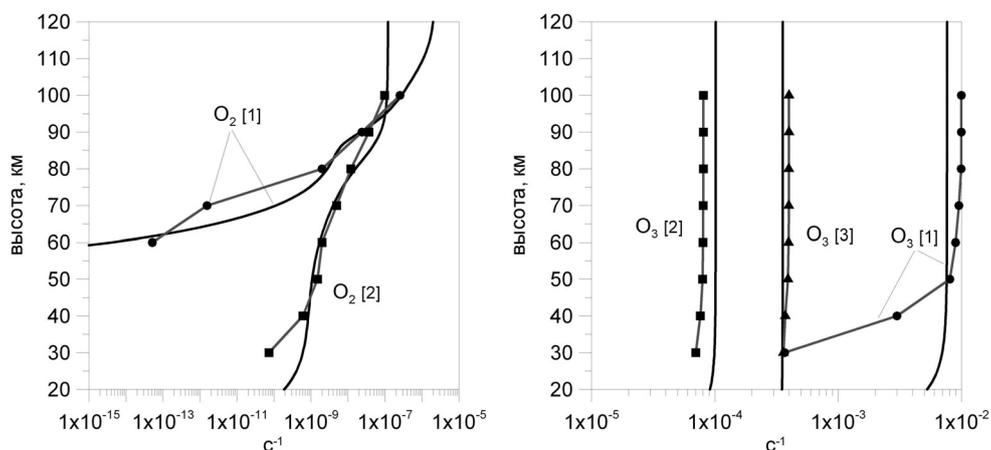


Рис. 1. Высотные распределения диссоционных интегралов кислородной группы

Водородная группа. Эту группу составляют реакции диссоциации H_2O , H_2O_2 и HO_2 . Соответствующие им графики представлены на рис. 2. Наибольшие различия, достигающие нескольких порядков, обнаруживаются для реакции распада H_2O в интервале высот ниже 80 км. Общий вид старых и новых зависимостей для реакций H_2O_2 и HO_2 совпадает. Однако для всех высот расхождение в численных значениях составляет 2–8 раз.

Углеродная группа. Старые сечения фотодиссоциации CO_2 не охватывали весь диапазон длин волн квантов, которые могут вызвать диссоциацию и составляют небольшую долю вновь используемых сечений при расчете диссоционных инте-

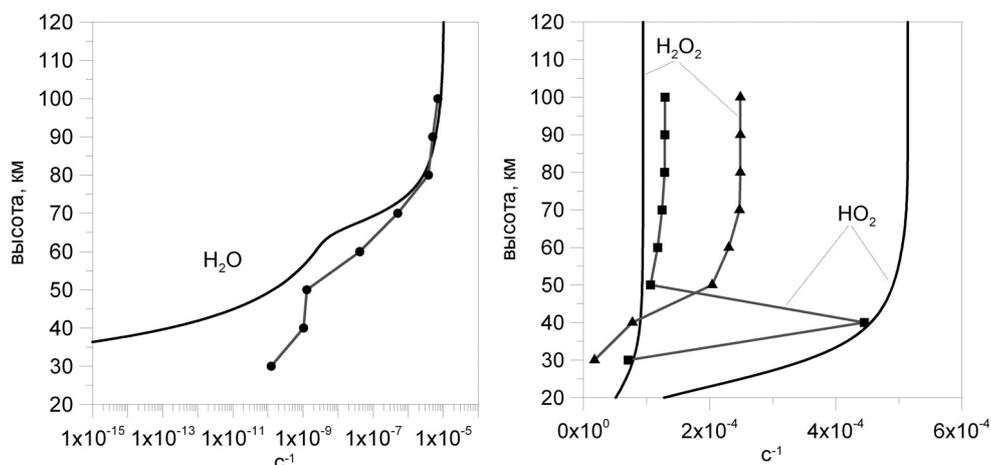


Рис. 2. Высотные распределения диссоционных интегралов водородной группы

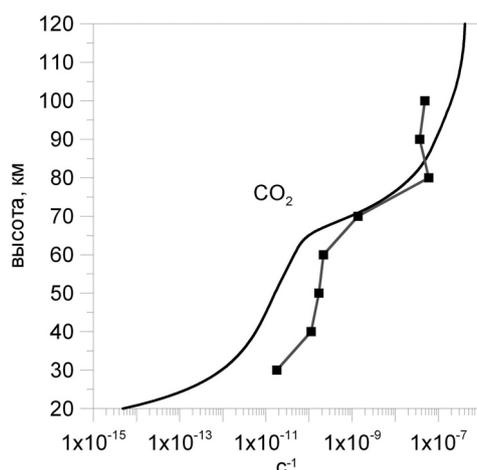


Рис. 3. Высотный ход коэффициента фотодиссоциации CO_2

гралов. Это приводит к тому, что их старые и новые значения, совпадая по характеру изменения, расходятся с высотой более чем на порядок величины, особенно на высотах менее 70 км, что видно на рис. 3.

Азотная группа. Сравнение высотных распределений диссоционных интегралов реакций молекул азотной группы представлено на рис. 4. Для реакций $\text{NO}_2[1]$ и $\text{NO}_2[2]$ совпадение старых и новых зависимостей $\text{DisInt}(h)$ достаточно хорошее и расхождение составляет приблизительно $10\div 20\%$ в значимом интервале высот $h > 30$ км. Для $\text{N}_2\text{O}[2]$ различие доходит почти до двух порядков, а для $\text{N}_2\text{O}[1]$ и вид $\text{DisInt}(h)$, и сами значения не совпадают, так что сделать числовую оценку расхождения невозможно.

Здесь следует особо остановиться на реакциях NO. Приведенные на рис. 4 графики соответствуют расчетам $\text{DisInt}(h)$ по одинаковым спектральным интервалам

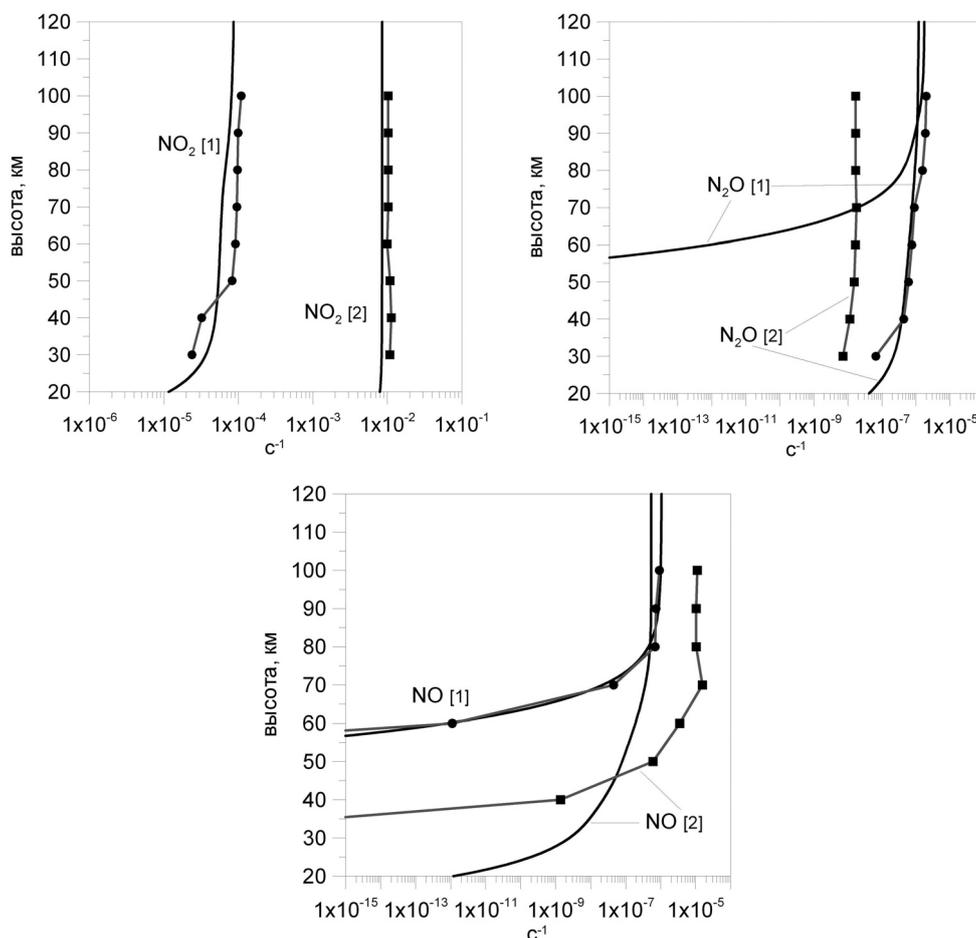


Рис. 4. Высотные распределения диссоционных интегралов азотной группы

с использованием старых и новых сечений. Видно, что для реакции $\text{NO}[1]$ различие доходит почти до порядка, а для реакции $\text{NO}[2]$ результаты различаются кардинально. Коэффициенты аппроксимации (2) для обоих вариантов сечений приведены в таб. 6 как варианты 1 и 2, соответственно.

В то же время, согласно имеющимся данным, порог реакции $\text{NO}[1]$ равен 146 нм, а в интервале до 106 нм есть еще две реакции с выходом $\text{N}(^2\text{D})$ вместо $\text{N}(^4\text{S})$. Кроме того, диссоциация протекает и в более жесткой части спектра. Однако квантовые выходы этих реакций пока найти не удалось. В табл. 6, как вариант 3, даны коэффициенты A и B , когда области протекания реакций были установлены $30.38 \div 146$ нм и $146 \div 227$ нм.

Замечания о возможности использования экспоненциальной аппроксимации

Аппроксимации вида (2) часто используют до $\chi \sim 70^\circ$, а иногда и больших, что объясняется возможностью применять аппроксимацию $\text{Sum}(\chi) = \text{Sum}(0)/\cos(\chi)$ при

определении поглощения излучения в атмосфере. Однако из-за нелинейности подинтегральной функции в (1), при увеличении χ ошибка аппроксимации (2) по отношению к точному решению растет быстрее, чем ошибка аппроксимации $\text{Sum}(\chi)$. Эта ошибка оказывается тем больше, чем больше $B(h)$.

В то же время, расчеты показали, что при $B(h) \ll 1$ и $B(h) \gg 1$ область применимости экспоненциальной аппроксимации велика. Это объясняется тем, что, в первом случае, поглощение солнечного потока малó, а, следовательно, ошибка становится заметной только при $\chi \rightarrow 90^\circ$, во втором – поглощение столь великó, что сам интеграл оказывается мал и большая относительная ошибка не может влиять на дальнейшие расчеты.

Между тем, при $B(h) \approx 1$ область применимости этого приближения значительно сужается и может снижаться до $\chi \sim 30^\circ$.

Это обстоятельство необходимо учитывать при рассмотрении условий, возникающих на терминаторах, а также в высоких широтах.

Заключение

Суммируя результаты сравнения характеристик фотодиссоционных реакций, можно ожидать, что использование при решении системы уравнений химической кинетики заряженных компонент, созданные программные блоки для расчета скоростей реакций с новыми данными по сечениям, привязкой к географической точке, сезону, местному времени и характеру солнечной активности уточнит значения электронных и ионных концентраций, получаемые при расчете кинетики ионизации в D и E-слоях ионосферы.

В заключении необходимо добавить, что приведенные значения коэффициентов экспоненциальной аппроксимации, полученные для 196 дня года, могут быть использованы и для других сезонов. Сравнение результатов расчетов аналогичных коэффициентов для 15, 80 и 263 дней года показало малые отличия.

Литература

Журавлева Л.А., Кудрявцев В.П. Нестационарная фотохимическая модель малых составляющих средней атмосферы // Сб. Динамические процессы в геосферах: геофизика сильных возмущений. М.: Наука, 1994. С. 191–204.

Кудрявцев В.П., Романюха Н.Ю. Моделирование ионизационно-рекомбинационных процессов в средней атмосфере // Математическое моделирование, 1995, т. 7, № 3, с. 3–18.

Петропавловских И.В., Репнев А.И., Филлюшкин В.В. Базовый вариант одномерной фотохимической модели атмосферы. Численное моделирование состава и динамики атмосферы // Материалы Всесоюзного совещания. М.: Наука 1983. С. 82–129.

Baulch D.L. et al. Evaluated Kinetic and Photochemical Data for Atmospheric Chemistry: Supplement 1 / J. Phys. Chem / Ref. Data. 1982. V. 11, N. 2, pp. 327–496.

DeMore W.B. et al. Chemical Kinetics and Photochemical Data for Using Stratospheric Modeling / Evaluation 12. NASA JPL Publication. 1997-4.

[LASP] http://lasp.colorado.edu/lisird/whi_ref_spectra/whi_ref_spectra.html