

LA TEMPERATURA VIBRACIONAL DEL N_2 EN LA REGION E DE LA IONOSFERA

I. TEORIA.

A. de la Torre y S. Duhau*

Departamento de Física, Facultad de Ciencias Exactas y Naturales

Universidad de Buenos Aires

RESUMEN

La temperatura vibracional del gas de N_2 predicha de los modelos teóricos en la región E no es compatible con las mediciones de la misma ni con su valor inferido de la teoría de formación de la ionósfera. Se revisan, por lo tanto, las hipótesis y los parámetros utilizados en dichos modelos.

Se evalúan los distintos mecanismos factibles de producir y absorber cuantos de energía vibracional del N_2 , suponiendo la existencia de equilibrio fotoquímico, y la importancia en la creación de energía vibracional de los procesos de colisión de las moléculas de N_2 con los átomos de O^1D provenientes de la fotodisociación del O_2 , considerando la eficiencia de producción de estos últimos en el continuo de Schumann-Runge y longitudes de onda menores (hasta 1160Å).

Se halla que los mecanismos de transferencia de cuantos con los gases de CO_2 y O son los principales desactivadores del N_2 vibracionalmente excitado en esa región.

ABSTRACT

The N_2 vibrational temperature predicted by the theoretical models at E-region heights is not consistent either with its experimental value, or with the one inferred from the theory of ionosphere formation. Therefore, the hypothesis and parameters used in these models are revised.

Assuming the existence of photochemical equilibrium, the different mechanisms that produce and absorb N_2 vibrational energy quanta are studied, and the importance in the production of vibrational energy of the collision between N_2 molecules and O^1D atoms originated in the photodissociation of the O_2 molecules is evaluated, considering the efficiency of this process in the Schumann-Runge continuum and shorter wave lengths (until 1160Å).

It is found that the main sinks of the N_2 vibrational energy are the CO_2 and O gases in this region.

* Miembro del CONICET.

1. INTRODUCCION

A pesar del gran número de reacciones químicas que tienen lugar en la atmósfera, está bien establecido cuales son las que tienen real significación en la determinación de los valores de ciertos parámetros. En particular, uno de los procesos relevantes en la formación de iones de O^+ es la reacción de esta especie con el gas de N_2 , dando lugar a la producción de iones de NO^+ , los cuales a su vez se recombinan disociativamente capturando electrones libres. La velocidad a la cual se produce la combinación entre N_2 y O^+ es una función fuertemente dependiente de la temperatura traslacional de ambos gases y del grado de excitación vibracional del N_2 (O'Malley, 1970; Van Zandt y O'Malley, 1973). Imponiendo una distribución de equilibrio termodinámico para esta energía vibracional, la misma se halla cuantificada por la correspondiente temperatura vibracional, T_v , y conociendo este parámetro se puede evaluar el proceso antes mencionado. Correlacionando densidades medidas de O^+ y O entre 100 y 130 km, Duhau y Azpiázu (1983) mostraron que T_v podría estar por encima de $1000^\circ K$ en estas altitudes.

La transferencia de esta energía de vibración entre las moléculas de N_2 y el gas de electrones térmicos (Walker, 1968; Walker y otros, 1969) podría entonces explicar la temperatura elevada de estos últimos, la cual se ha mostrado está de 2 a 5 veces por encima de la temperatura neutra, dependiendo de la actividad solar en días geomagnéticamente quietos y latitudes medias (Duhau y Azpiázu, 1981)

No obstante la importancia que adquiere la determinación de T_v , solo existen mediciones in situ para condiciones aurales (O'Neil y otros, 1974). Varios autores han evaluado teóricamente perfiles de esta temperatura tomando como límite inferior la base de la capa E, para distintas condiciones atmosféricas y actividades solares (ver por ejemplo Walker, 1968; Walker y otros, 1969; Varnum, 1972; Jamshidi y otros, 1973; Kummeler y Bortner, 1973; Kumer y James, 1974; Newton y otros, 1974) obteniendo valores de T_v en la región E por debajo de los $900^\circ K$.

En los últimos años, se han realizado progresos en la determinación de ciertos parámetros y coeficientes de reacción intervinientes en las teorías utilizadas por los autores antes mencionados; por ello es que en el presente trabajo se realizará una revisión de sus conclusiones y resultados, incluyendo la evaluación de nuevos mecanismos propuestos hasta la actualidad y además una estimación de la importancia relativa de los procesos que intervienen en el cálculo de T_v .

2. LA ECUACION DE CONTINUIDAD PARA LOS CUANTOS DE VIBRACION DEL N_2

En la región E ionosférica, la abundancia de colisiones entre moléculas de N_2 en distintos estados de excitación vibracional garantiza una distribución de

Boltzmann para dicha energía de vibración, frente a posibles apartamientos de una distribución de equilibrio termodinámico ocasionados por mecanismos de transferencia de energía, reacciones de carácter fotoquímico y transporte de cuantos vibracionales (ver por ejemplo Walker, 1968; 1973).

Se puede suponer que entre 90 y 125 km el intercambio de cuantos con otras altitudes por difusión es un mecanismo comparativamente despreciable, por lo que en dicha región rige además equilibrio fotoquímico para las moléculas de N_2 vibracionalmente excitadas (Walker y otros, 1969). Esto se puede expresar como:

$$\sum_{i=1}^n q_i(z) = \sum_{j=1}^m l_j(z) \quad (1)$$

con z entre 90 y 125 km; los términos $q_i(z)$ y $l_j(z)$ representan, respectivamente, a las velocidades de producción y de pérdida por unidad de volumen de cuantos de vibración debidos a mecanismos de origen químico y fotoquímico.

2.1. Procesos de intercambio de cuantos vibracionales

Los procesos que se han considerado hasta el presente aptos para producir un intercambio de energía apreciable con los estados vibracionales del N_2 en la baja termosfera son:

i) La desactivación de los átomos de O en el estado 1D por colisiones con moléculas de N_2 , excitándose estas últimas vibracionalmente de acuerdo con la reacción:



ii) La reacción química (Dalgarno, 1963)



iii) Las colisiones entre electrones en equilibrio térmico a una cierta temperatura T_e y el gas de N_2 . Este mecanismo podría consistir en una fuente de cuantos de vibración para el N_2 siempre que T_e sea mayor que T_v . En caso contrario ($T_v > T_e$) significaría una pérdida de energía de vibración (Stubbe y Varnum, 1972).

iv) La conversión de energía cinética de los fotoelectrones y electrones no termalizados en energía de excitación de los niveles vibracionales del N_2 , lo que puede expresarse como (ver por ejemplo Timothy y otros, 1972)



v) La desexcitación del gas de N_2^* a través de tres mecanismos (ver por ejemplo Taylor y Bitterman, 1969; Mc Neal y otros, 1972; O'Malley, 1970):



donde se puede destacar la fuerte dependencia del coeficiente de la última reacción con la temperatura vibracional del N₂.

En la tabla I se distinguen los procesos considerados por distintos autores para el cálculo de T_v en la baja termosfera.

TABLA I

	P R O C E S O						
	i	ii	iii	iv	v	vi	vii
Walker (1968)	*	*	*				*
Walker y otros (1969)	*	*		*	*		
Varnum (1972)	*	*	*	*	*		
Kumler y Bortner (1973)	*	*	*		*	*	
Jemshidi y otros (1973)	*	*	*		*	*	
Kumer y James (1974)	*	*		*	*	*	

Procesos de producción y pérdida de cuantos de vibración considerados por distintos autores en el cálculo de T_v. Los mecanismos i, v y vi resultaron, en el presente trabajo, los más significativos a las altitudes consideradas.

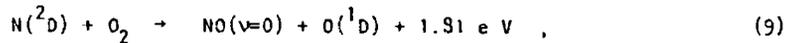
2.1.1. Velocidades de producción por unidad de volumen de cuantos de vibración

Las expresiones correspondientes a la creación de energía vibracional en los procesos mencionados son:

proceso i)

$$q_1(z) = \eta_1 k_1 \{0^1D\}(z) \{N_2\}(z) \quad (8)$$

donde η_1 es la eficiencia de producción de cuantos por reacción e igual a 2.2 cuantos/reacción (Slanger y Black, 1974), k_1 es la constante de reacción, y $\{0^1D\}$ y $\{N_2\}$ son las concentraciones respectivas. Los átomos de 0¹D son provistos en la región E fundamentalmente por procesos de fotodisociación de las moléculas de O₂ debidos a la acción de la radiación solar incidente. El rango de longitudes de onda donde es energeticamente posible la producción de esta especie electrónica es el continuo de Schumann-Runge (aproximadamente entre 1750 y 1350 Å) y por debajo hasta 1160 Å. Existen además otros procesos de producción de 0¹D, como por ejemplo la reacción (Black, 1969):



que no obstante no son competitivos con la fotodisociación a las altitudes aquí consideradas y a latitudes medias (Hays y otros, 1978; Torr y otros, 1980). El proceso dado por la ecuación (9) resulta significativo sólo en zonas aurorales donde alcanza a ser el mecanismo más importante en la producción de $O(^1D)$ (Waite y otros, 1979).

La energía electrónica de los átomos de $O(^1D)$ es también removida por el gas de O_2 , y considerando que en la región E los primeros se hallan en equilibrio fotoquímico, en principio debería expresarse a la densidad de $O(^1D)$ como

$$\{O(^1D)\}(z) = \frac{\text{velocidad de producción por fotodis. / unid. de vol.}}{k_1 \{N_2\}(z) + k_1^i \{O_2\}(z)} \quad (10)$$

Sin embargo, aunque k_1 es del mismo orden que k_1^i , es más importante la desactivación debida al N_2 por la concentración relativa de esta especie respecto al O_2 (Hays y otros, 1979). Por lo tanto se puede considerar que toda la energía disponible en el gas de $O(^1D)$ se convierte en cuantos vibracionales de N_2 .

Reemplazando (8) en (10) se obtiene:

$$\frac{q_1(z)}{\eta_1} = \{O_2\}(z) \int_{1160}^{1750} \sigma_{O_2}(\lambda) \mu(\lambda) \left\{ \Phi_{\infty}(\lambda) \cdot \exp(-\sigma_{O_2}(\lambda) \int_z^{\infty} \{O_2\}(z') \sec \chi(z') dz') \right\} d\lambda \quad (11)$$

donde $\sigma_{O_2}(\lambda)$ son las secciones eficaces de absorción del O_2 , $\mu(\lambda)$ es el rendimiento cuántico de fotodisociación, $\Phi_{\infty}(\lambda)$ es el flujo solar incidente en la exósfera y χ es el ángulo cenital solar.

proceso ii)

$$q_2(z) = \eta_2 k_2 \{N\}(z) \{NO\}(z) \quad (12)$$

donde $\eta_2 = 2.7$ cuantos/reacción y $k_2 = 7 \cdot 10^{-11} \text{ cm}^3 \text{ seg}^{-1}$ (Lin y Kaufman, 1971).

proceso iii)

$$q_3(z) = \frac{\{e^-\}(z) \{N_2\}(z)}{\Delta E} 2.99 \cdot 10^{-12} \exp\left(f \frac{T_e - 2000}{T_e} \right) \exp$$

$$\left(-g \frac{T_e - T_v}{T_e} - 1\right) \text{ cm}^{-3} \text{ seg}^{-1} \quad (13)$$

donde:

$\Delta E = 0.293$ e V es el intervalo de energía entre dos niveles vibracionales adyacentes, y

$$f = 1.06 \cdot 10^4 + 7.51 \cdot 10^3 \tanh \{1.10 \cdot 10^{-3} (T_e - 1800)\}$$

$$g = 3300 + 1.233(T_e - 1000) - 2.056 \cdot 10^{-4} (T_e - 1000)(T_e - 4000)$$

(Stubbe y Varnum, 1972).

proceso iv)

$$q_4(z) = \frac{1}{\Delta E} \int_{E_{e1}}^{E_{e2}} v f(E_e/z) \{N_2\}(z) L(E_e/N_2) dE_e \quad (14)$$

donde E_{e1} y E_{e2} son las energías cinéticas límites de los fotoelectrones, dentro de las cuales estas pueden excitar vibracionalmente las moléculas de N₂; $v f(E_e/z)$ es el flujo de fotoelectrones por unidad de energía a una altura z y $L(E_e/N_2)$ es la sección eficaz de frenado de los mismos (ver por ejemplo Schunk y Walker, 1973).

2.1.2 Velocidad de pérdida por unidad de volumen de cuantos de vibración

Las expresiones relativas a la desactivación de moléculas de N₂ en el μ -ésimo estado vibracional por colisiones con moléculas de CO₂ y O son:

$$I_1^\mu(z) = \{N_{2\mu}\}(z) \left[(k_3 \{CO_2\}(z) + k_4 \{O\}(z)) \right] \quad (15)$$

donde el subíndice μ expresa la concentración de N₂ en dicho nivel solamente.

El coeficiente k_3 ha sido medido por Taylor y Bitterman (1969), y

$$k_4 = 1.2 \cdot 10^{-13} \exp(-23/T^{1/3}) \text{ (McNeal, 1972)}.$$

Multiplicando por μ y sumando sobre todos los niveles, la expresión anterior queda en función de la concentración de cuantos vibracionales $\rho(z)$:

$$I_1(z) = \rho(z) \left[(k_3 \{CO_2\}(z) + k_4 \{O\}(z)) \right] \quad (16)$$

Este último parámetro se puede obtener reemplazando directamente las expresiones (11) y (16) en (1), para luego despejar de esta última:

$$\rho(z) = \frac{q_1(z)}{k_3 \{CO_2\}(z) + k_4 \{O\}(z)} \quad (17)$$

3. OBTENCION DE T_v A PARTIR DE ρ

Por otra parte, y habiendo supuesto una distribución de Boltzmann para los cuantos de vibración, la densidad de cuantos se puede evaluar formalmente como:

$$\begin{aligned} \rho(z) &= \sum_{\mu=1}^{\infty} \mu \{N_2\mu\}(z) \\ &= \{N_2\}(z) \frac{\sum_{\mu} \mu \exp(-\mu\Delta E/kT_v)}{\sum_{\mu} \exp(-\mu\Delta E/kT_v)} \end{aligned} \quad (18)$$

donde k es la constante de Boltzmann. Invirtiendo esta última expresión,

$$T_v = \Delta E / \left\{ k \ln \left(1 + \frac{\{N_2\}(z)}{\rho(z)} \right) \right\} \quad (19)$$

Calculando ρ a partir de la ecuación (17) y reemplazando en (19) se puede obtener T_v .

4. RESULTADOS OBTENIDOS

A fin de realizar una evaluación de los procesos más significativos en la región E para el cálculo de T_v , se utilizaron los distintos parámetros y coeficientes mencionados en los apartados 2.1.1 y 2.1.2; para el flujo de energía solar incidente se utilizó el modelo de Torr y otros (1980) y se recurrió al modelo atmosférico de Jacchia (1977) para la obtención de concentraciones y temperaturas neutras, además del modelo de Duhau y Ázpiazu (1981) de perfiles de T_e . Si bien estos parámetros presentan una variabilidad no tenida en cuenta por otros modelos, no obstante se pueden utilizar para una primera estimación. El problema de la variabilidad de los parámetros será discutido en otro trabajo.

Como resultado de la estimación para baja y alta actividad solar de cada uno de los términos correspondientes a la producción y pérdida de energía vibracional del gas de N_2 dentro de la región E, se evaluó que los únicos mecanismos significativos son la excitación por colisiones con átomos de O^1D y la desactivación a través de los gases de O y CO_2 , independientemente de la actividad solar. El resto de los procesos (ver tabla 1) representa, en todos los casos, menos de un 5% de la producción y pérdida total de cuantos de vibración.

Como ejemplo de esta conclusión, se muestra en la tabla II el resultado para baja actividad solar ($T_{in} \approx 300^\circ K$) y a 100 km de altura.

TABLA II

P R O C E S O S D E				P R O C E S O S D E		
P R O D U C C I O N				P E R D I D A		
(cuantos)				(cuantos)		
cm ³ seg				cm ³ seg		
i)	ii)	iii)	iv)	v)	vi)	vii)
2.2(5)	6.2(3)	1.8(2)	3.3(3)	1.9(5)	3.4(4)	1.1(1)

Estimaciones de los procesos de producción y pérdida de cuantos vibracionales a 100 km de altura y baja actividad solar.

BIBLIOGRAFIA

- Black C., 1969: Vacuum ultraviolet photolysis of N₂O, deactivation of N(²D); J. Chem. Phys., 51, 116.
- Dalgarno A., 1963: Vibrationally excited molecules in atmospheric reactions; Planet. Space Sci., 10, 19.
- Duhau S. y Azpiazu M.C., 1981a: Non thermal equilibrium between electrons and neutrals at ionospheric E-region heights; Geophys. Res. Lett., 8, 819.
- Duhau S. y Azpiazu M.C., 1981b: La temperatura electrónica en la region E de la ionósfera; Geoacta, 11, 165.
- Duhau S. y Azpiazu M.C., 1983: Obtención de la temperatura vibracional del N₂ a partir de la densidad del ion de oxígeno atómico; Geoacta, 12.
- Hays P.B., Rusch D.W., Roble R.G. y Walker J.C.G., 1978: The OI(6300 Å) airglow; Rev. Geophys. Space Phys., 16, 225.
- Jacchia L.G., 1977: Thermospheric temperature, density, and composition: new models; Smithson. Astrophys. Obs., 375.
- Jamshidi E., Fisher E.R. y Kummeler E.H., 1973: Vibrational temperature of N₂ in the E and F regions; J. Geophys. Res., 78, 6151.
- Kumer J.B. y James T.C., 1974: CO₂(001) and N₂ vibrational temperatures in the 50<z<130 km altitude range; J. Geophys. Res., 79, 638.
- Kummeler R.H. y Bortner M.H., 1972: Vibrational temperature in the E and F regions; Space Res., 12, 711.
- Lin C.L. y Kaufman F. 1971: Reactions of metastable nitrogen atoms; J. Chem. Phys., 55, 3760.
- Mc Neal R.J., Whitson M.E. y Cook G.R., 1972: Quenching of vibrationally excited N₂ by atomic oxygen; Chem. Phys. Lett., 16, 507.
- Mc Neal R.J., Whitson M.E. y Cook G.R., 1974: Temperature dependence of the quenching of vibrational excited nitrogen by atomic oxygen; J. Geophys. Res., 79, 1527.
- Newton G.P., Walker J.C.G. y Meijer P.H.E., 1974: Vibrationally excited nitrogen in stable auroral red arcs and its effect on ionospheric

- recombination; *J. Geophys. Res.*, 79, 3807.
- O'Malley T.F., 1970: Simple model for the high energy reaction of O^+ ions with N_2^+ ; *J. Chem. Phys.*, 52, 3269.
- O'Neil R.R., Pendleton W.R., Hart, A.M. y Stair A.T., 1974: Vibrational temperature and molecular density of thermospheric nitrogen measured by rocket-borne electron beam induced luminescence; *J. Geophys. Res.*, 79, 1942.
- Schunk R.W. y Walker J.C.G., 1973: The theory of charged particle temperatures in the upper atmosphere; *Progress in high temperature physics and chemistry*, 5, Pergamon Press.
- Slanger T.G. y Black S., 1974: Electronic to vibrational energy transfer efficiency in the $O(^1D)-N_2$ and $O(^1D)-CO$ systems; *J. Chem. Phys.*, 60, 468.
- Stubbe, P. y Varnum W.S., 1972: Electron energy transfer rates in the ionosphere; *Planet. Space Sci.*, 20, 1121.
- Taylor R.L. y Bitterman S., 1969: Survey of vibrational relaxation data for processes important in the CO_2-N_2 laser system; *Rev. Mod. Phys.*, 41, 26.
- Timothy A.F., Timothy J.G. y Willmore A.P., 1972: The ion chemistry and thermal balance of the E and lower F regions of the daytime ionosphere: and experimental study; *J. Atmos. Terr. Phys.*, 34, 969.
- Torr M.R., Torr D.G. y Hinteregger H.E., 1980: Solar flux variability in the Schumann-Runge continuum as a function of solar cycle 21; *J. Geophys. Res.*, 85, 6063.
- Van Zandt T.E. y O'Malley T.F., 1973: Rate coefficient for the reaction of O^+ with vibrationally excited N_2 ; *J. Geophys. Res.*, 78, 6818.
- Varnum W.S., 1972: Enhanced N_2 vibrational temperatures in the thermosphere; *Planet. Space Sci.*, 20, 1865.
- Waite J.H., Nagy A.F. y Torr D.G., 1979: N_2 vibrational distribution in aurorae; *Planet. Space Sci.*, 27, 901.
- Walker J.C.G., 1968: Electron and nitrogen vibrational temperature in the E region of the ionosphere; *Planet. Space Sci.*, 16, 321.
- Walker J.C.G., Stolarsky R.S. y Nagy A.F., 1969: The vibrational temperature of nuclear nitrogen in the thermosphere; *Ann. Geophys.* 25, 831.
- Walker J.C.G., 1973: Oxygen and nitrogen vibration in the thermosphere; *Physics and chemistry of upper atmospheres*, B.H. Mc Cormac, 203.

