

## OBTENCION DE LA TEMPERATURA VIBRACIONAL DEL $N_2$ A PARTIR DE LA DENSIDAD DEL ION DE OXIGENO ATOMICO

S. Duhau\* y M.C. Azplazu

Departamento de Física, Facultad de Ciencias Exactas y Naturales

Universidad de Buenos Aires

### RESUMEN

La densidad del  $O^+$  depende fuertemente de la densidad del  $O$  y de la temperatura vibracional del  $N_2$ ,  $T_v$ ; si esta última fuera suficientemente alta, la transferencia de energía vibracional del  $N_2$  a los electrones térmicos explicaría la alta temperatura de los mismos en la región E de la ionósfera. Por lo tanto, de la densidad de  $O^+$  medida se obtiene un perfil de  $T_v$  entre los 100 y los 130 km de altura, mediante éste, y en condiciones equivalentes de actividad solar y magnética, se calcula la transferencia de energía entre el  $N_2$  y los electrones térmicos, encontrándose una  $T_v$  muy superior a la necesaria para que sea este el mecanismo primario que explique la elevada temperatura a la que los electrones se encuentran.

Para éste cálculo se seleccionó cuidadosamente la densidad del  $O$ , la cual está, de acuerdo a recientes mediciones, muy por debajo de la prescrita por los modelos usuales.

### ABSTRACT

The density of the  $O^+$  depends strongly on the  $O$  density and on the  $N_2$  vibrational temperature,  $T_v$ ; if the last were sufficiently high, the transfer of vibrational energy from  $N_2$  to the thermal electrons might explain the high electron temperatures measured in the E-region. Therefore, from the measured  $O^+$  concentration a  $T_v$  profile for the altitude interval between 100 and 130 km is obtained with which, for equivalent geomagnetic and solar conditions, the rate of change of energy between  $N_2$  and thermal electrons is calculated.  $T_v$  is found to be much higher than required for this to be primary mechanism to explain the high values of the observed electron temperature.

For this calculation the  $O$  density was carefully selected because, according to recent measurements, it is much lower than the density given by the usual models.

\* Miembro de la Carrera del Investigador del CONICET.

## 1. INTRODUCCION

En la región E el gas de electrones se encuentra a una temperatura superior a la del gas neutro (Duhau y Azplazu, 1981 a y b). Este calentamiento anómalo depende fuertemente de las actividades solar y geomagnética. Se han propuesto diversos mecanismos de calentamiento, (transferencia de energía de los fotoelectrones, calentamiento por efecto joule), pero ninguno de ellos explica la diferencia de temperatura observada así como tampoco el carácter global del fenómeno. Esta última característica indicaría que el mecanismo de calentamiento podría ser de origen físico-químico.

Walker (1968) propuso que el calentamiento electrónico se debía a la transferencia de energía del gas  $N_2$  vibracionalmente excitado,  $N_2^*$ , a los electrones por medio de una reacción de "extinción". La temperatura que así alcanza el gas de electrones,  $T_e$ , será función de la temperatura vibracional del  $N_2$ ,  $T_v$ , que debe ser bastante mayor que la del gas neutro,  $T_n$ , para que  $T_e/T_n$  sea mayor que la unidad. Por lo tanto para verificar si el mecanismo propuesto por Walker (1968) es el que provee la energía para calentar al gas de electrones es necesario conocer  $T_v$ .

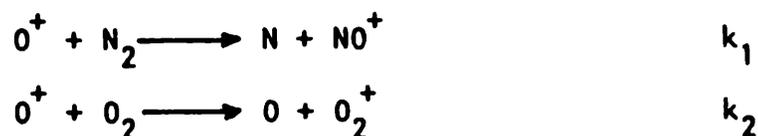
Hasta el presente no se han realizado mediciones de  $T_v$  en condiciones geomagnéticamente quietas y los cálculos teóricos (De la Torre y Duhau a y b, 1983) dan como resultado una temperatura vibracional apenas superior a la del gas neutro.

En este trabajo se propone un método indirecto de medición de  $T_v$ , a partir de las mediciones de concentración de  $O^+$ .

2. OBTENCION DE  $T_v$ 

## 2.1. Ecuaciones

La radiación solar en el rango UV lejano, ioniza el O atmosférico dando lugar al ión positivo  $O^+$ . Este ion se recombina con el  $N_2$  y  $O_2$  de acuerdo con:



siendo  $k_1$  y  $k_2$  los coeficientes de las reacciones, coeficientes que pueden depender de las temperaturas de los reactivos como se verá más adelante. Por consiguiente en condiciones estacionarias (horas diurnas de días geomagnéticamente quietos) la concentración de  $O^+$  estará dada por (Azplazu y Duhau, 1982a y b):

$$n(O^+) = \frac{q(O^+)}{k_1 n(N_2) + k_2 n(O_2)} \quad (1)$$

donde  $q$  es la velocidad de fotoionización que se calcula para cada altura  $h_0$ :

$$q(O^+) = n(O) \int_0^\infty I_\infty(\lambda) \eta_0(\lambda) \sigma_0(\lambda) \exp\left\{-\sum_j \sigma_j(\lambda) \int_{h_0}^\infty n_j \sec\chi dh\right\} d\lambda$$

si se denota con  $\sigma_j$  a la sección eficaz de absorción de la especie  $j$ ,  $\eta$  la eficiencia de ionización,  $I_\infty$  el flujo solar exósferico, y  $\chi$  es el ángulo cenital solar.

Los coeficientes de recombinación se han medido y mientras  $k_2$  depende exclusivamente de la temperatura del gas neutro ( $T_n$ ) como  $10^{-9} T_n^{-0,7}$ ;  $k_1$  es función también de la temperatura vibracional del  $N_2$  ( $T_v$ ). Esta dependencia ha sido observada por Schmeltekopf y otros (1967) primero (ver fig. 1) para  $T_v \approx 300^\circ K$  y luego extendida para otras temperaturas iónicas por O'Malley (1970) (ver Tabla 1). Obsérvese que el coeficiente  $k_1$  es aproximadamente constante con  $T_v$  para valores de ésta inferiores a  $\approx 1000^\circ K$ .

De la ec. (1) se puede obtener  $k_1$  como:

$$k_1(T_v) = \left[ \frac{q(O^+)}{n(O^+)} - k_2 n(O_2) \right] [n(N_2)]^{-1} \quad (2)$$

Por lo tanto, conociendo las concentraciones de las 3 especies atmosféricas mayoritarias ( $N_2$ ,  $O_2$  y  $O$ ), el flujo solar incidente en el tope de la atmósfera, la temperatura del gas neutro y la concentración de  $O^+$  queda determinada, utilizando la TABLA 1,  $T_v$ .

## 2.2. Parámetros

Se ha utilizado el perfil de  $n(O^+)$  medido por Zbinden y otros (1975) que corresponde a un día geomagnéticamente quieto ( $K_p \leq 1^+$  durante todo el día) de actividad solar media ( $F_{10.7} = 122$ ) (ver fig. 2).

Para calcular  $q(O^+)$  se ha subdividido el intervalo de integración igual que en un trabajo anterior (Azpiazu y Duhau, 1982) de acuerdo con Richmond (1972), de donde se han obtenido también las secciones eficaces de absorción y las eficiencias de ionización. El flujo solar  $I_\infty$  corresponde a la misma actividad solar de las mediciones de  $[O^+]$  ( $F_{10.7} \approx 120$ ) y fue medido por Heroux y otros (1974).

En la figura (3) se han graficado las concentraciones de las componentes moleculares según los modelos de atmósfera neutra de Jacchia (1977) (J77) y el MSIS (Hedin y otros, 1977). Nótese que ambas coinciden por encima de los 140

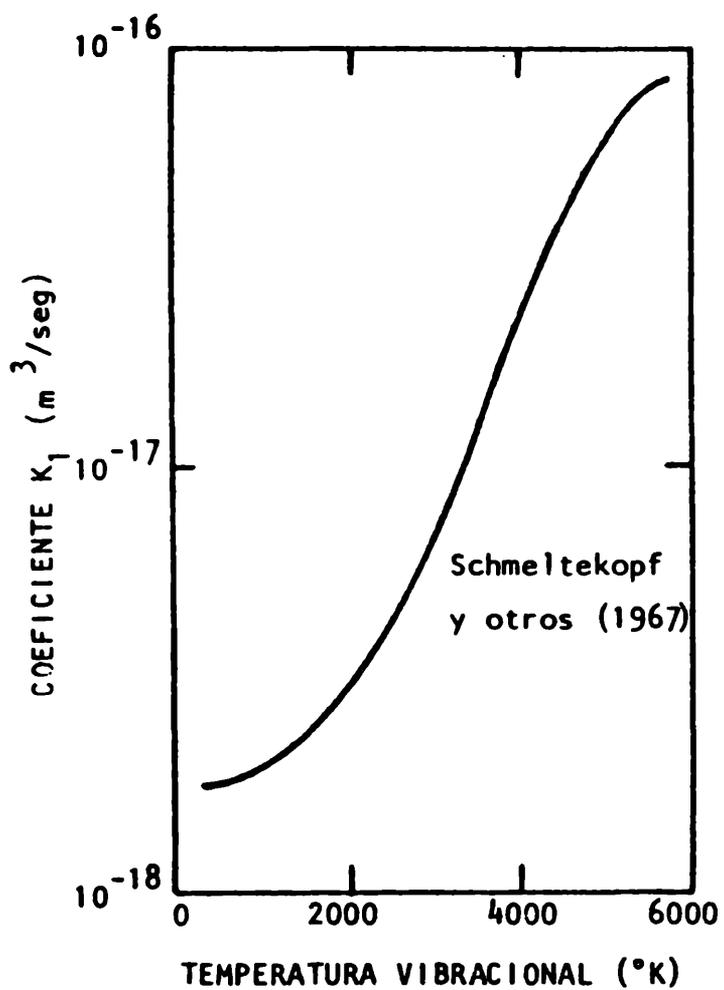


FIGURA 1

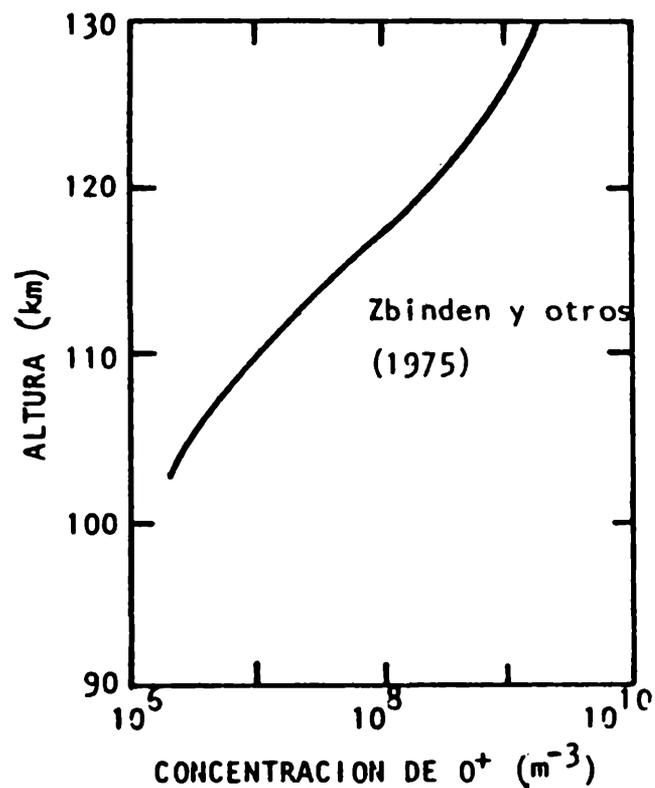


FIGURA 2

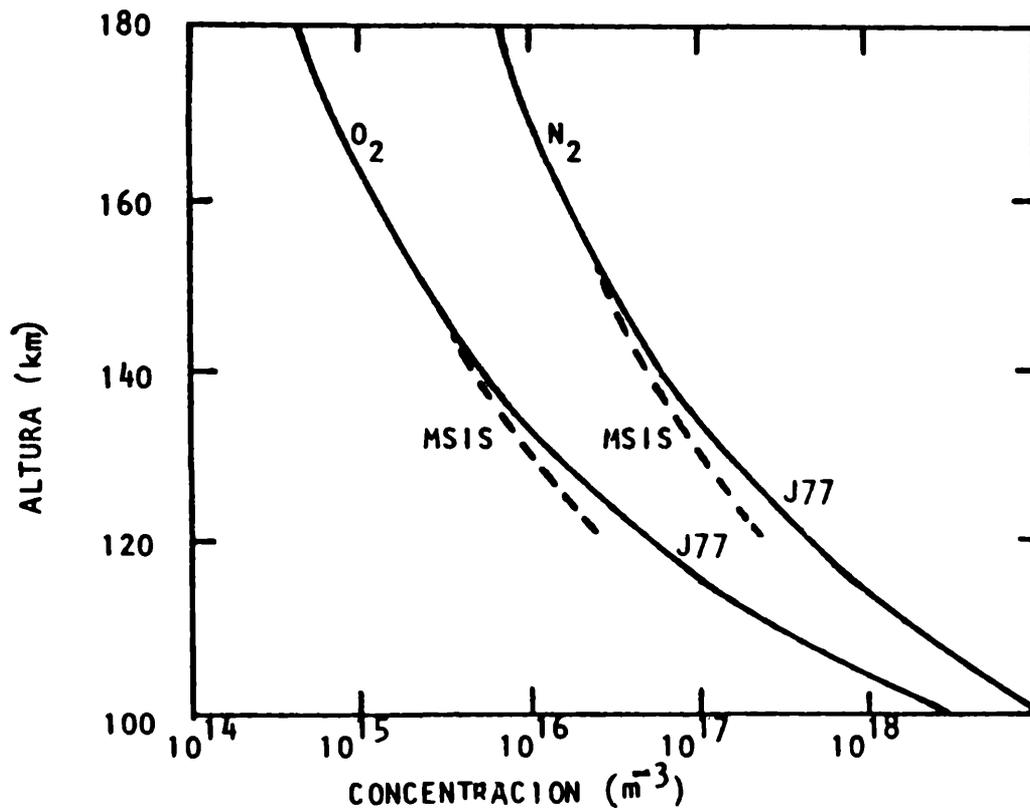


FIGURA 3

Concentración de  $N_2$  y  $O_2$  según los modelos MSIS (Hedin y otros, 1977) y Jacchia (1977)

COEFICIENTE DE REACCION  $K_1 (10^{-12} \text{ cm}^3/\text{seg})$  (O'Malley, 1970)

$T_n$ (°K)	$T_v$ (°K)										
	300	1000	1500	2000	2500	3000	3500	4000	5000	6000	7000
300	1,3	1,4	2,1	4,2	7,8	12,6	18,2	24,0	35,7	46,2	55,1
1000	0,7	0,9	2,0	4,9	9,5	15,4	22,1	29,0	42,5	54,3	64,2
1500	0,6	0,9	2,3	5,5	10,6	16,9	24,0	31,2	45,0	57,0	67,0
2000	0,6	1,0	2,7	6,4	11,9	18,6	26,0	33,4	47,4	59,5	69,4
2500	0,8	1,3	3,4	7,6	13,6	20,7	28,3	36,0	50,2	62,3	72,1
3000	1,1	1,8	4,3	9,0	15,5	23,1	31,0	38,9	53,4	65,5	75,2
3500	1,6	2,5	5,4	10,7	17,7	25,7	34,0	42,1	56,7	68,9	78,5
4000	2,3	3,4	6,8	12,6	20,2	28,6	37,2	45,4	60,3	72,4	82,0
5000	4,4	6,0	10,4	17,3	25,8	35,0	44,0	52,6	67,7	79,7	89,1
6000	7,5	9,6	14,9	22,9	32,3	42,1	51,5	60,3	75,4	87,3	96,3
7000	11,7	14,2	20,5	29,5	39,6	49,8	59,5	68,3	83,3	94,8	103,5

TABLA 1

km y por debajo de esa altura no discrepan en más de un 10%, lo mismo sucede cuando se comparan ambos modelos con mediciones individuales (ver p.e. Alcaydè y otros, 1978). Por el contrario, Sharp (1980) encontró para el oxígeno atómico una discrepancia notable con los modelos mencionados por debajo de los 130 km, que llega a ser de un orden de magnitud a los 100 km de altura (ver figura 4), la cual atribuyó a la existencia de un error en las mediciones hechas con espectrómetros de masas debido a que no se tuvo la precaución de ubicar el instrumento fuera de la onda de choque del cohete.

Por lo tanto, J77 se ha utilizado para determinar la densidad de  $N_2$  y del  $O_2$ , mientras que tanto este modelo como la medición individual de Sharp (1980) se han utilizado para determinar [ 0 ].

A fin de comparar los resultados es necesario conocer  $T_n$ . Se ha seleccionado para determinar este parámetro el modelo J77, puesto que utilizando mediciones recientes simultáneas in situ de la temperatura neutra y de la densidad del  $N_2$ , Kayser y otros (1979) mostraron que existe un excelente acuerdo entre la temperatura obtenida de la escala de altura de esta especie neutra y la medida.

### 3. RESULTADOS Y DISCUSION

En la figura (5) se han graficado los perfiles de  $T_v$  en región E para actividad solar media en condiciones geomagnéticamente quietas. La curva (a) representa los resultados obtenidos utilizando el modelo J77 y la (b) la que resulta de usar la medición de  $n(0)$  realizada por Sharp (1980).

En ambos casos se observa que  $T_v$  es bastante mayor que la del gas neutro (curva d) en toda la región E presentando un máximo aproximadamente a los 110 km de altura, aunque la calculada con la medición de Sharp es inferior a la que se obtiene utilizando J77.

Se ha calculado además, la temperatura vibracional compatible con las mediciones de  $T_e$  en condiciones equivalentes (Spencer y otros, 1962). Para ello se supone que la velocidad de pérdida de energía de los electrones es igual a su velocidad de absorción, esto es:

$$L_e = Q_e \quad (3)$$

En la región E los únicos mecanismos de pérdida de energía de los electrones a considerar son la excitación rotacional del  $N_2$  y del  $O_2$  y la excitación de la estructura fina del O (Duhau y Azpiazu, 1981b).

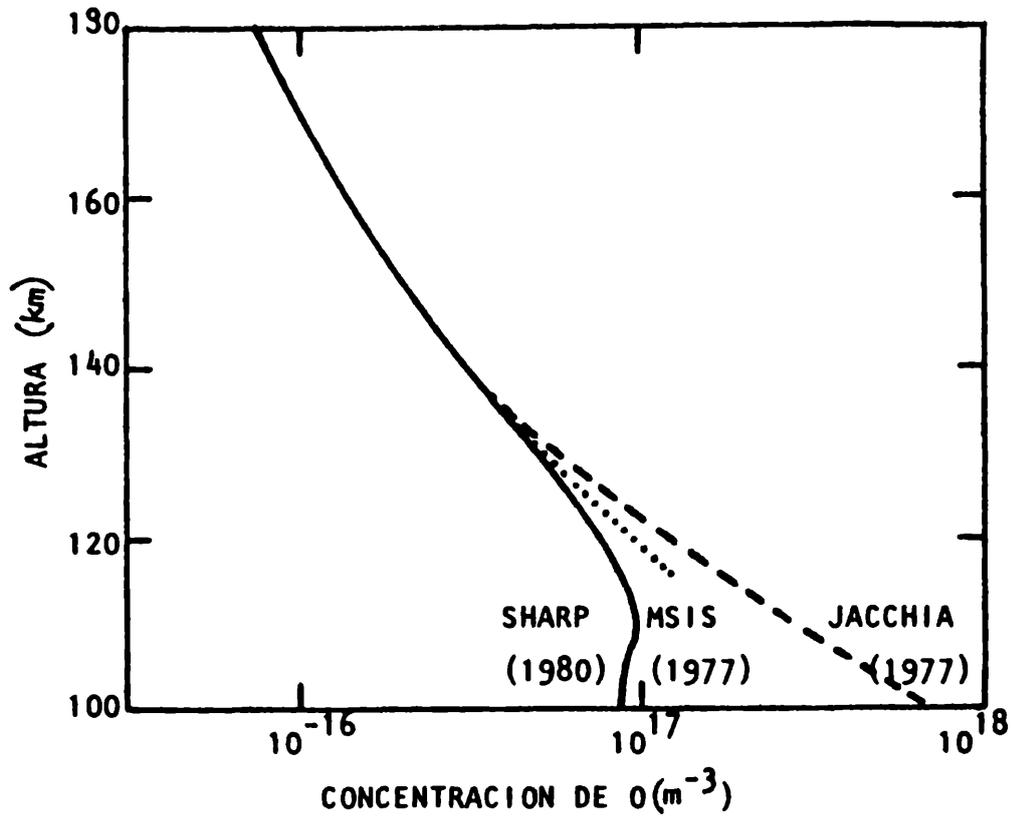


FIGURA 4

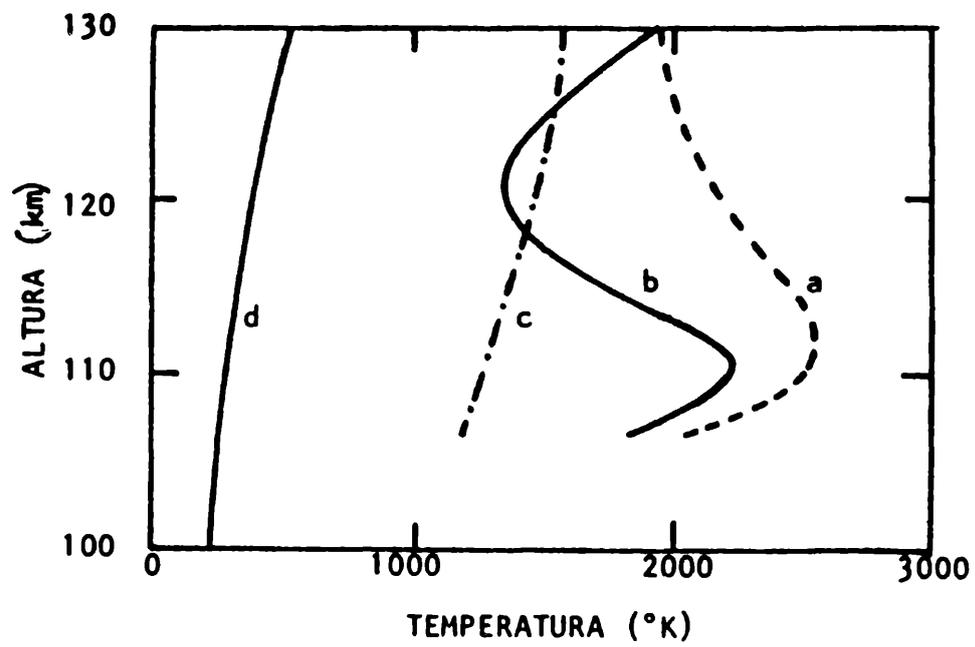


FIGURA 5

Temperatura vibracional calculada con el perfil de  $n(O)$ . (a) Sharp. (b) del modelo de Jacchia (1977) y (c) suponiendo  $Q_e = L_e$  (ver texto ecs. 3-5). (d) temperatura neutra según Jacchia (1977).

$$L_e = \left\{ (2 n(N_2) + 7 n(O_2)) 10^{-14} n_e \frac{T_e - T_n}{T_e^{1/2}} + \right. \\ \left. + 8,629 \times 10^{-6} n_e \frac{n(0)}{z} \sum_i \left[ A\Gamma(B) T_e^{B-1/2} \left[ e^{(D_x - E_x)} + \right. \right. \right. \\ \left. \left. \left. + 5,91 \times 10^{-9} (T_n - T_e) \left( (1+B)D_x + \left( \frac{E}{T_e} + 1+B \right) E_x \right) \right] \right] \right\} \frac{e V}{\text{cm}^3 \text{ s}} \quad (4)$$

Donde los dos primeros términos corresponden a la excitación rotacional del  $N_2$  y del  $O_2$  respectivamente y el último término a la excitación de la estructura fina del 0 (ver Apéndice).

Por otra parte si se considera que el  $N_2^*$  cede toda su energía a los electrones queda (Walker, 1968):

$$Q_e = 1,5 \times \frac{10^{-10} n_e n(N_2)}{T_e^{1/2}} \left[ 1 + \frac{T_e}{2200} \right] \left[ \exp \left( -\frac{3400}{T_v} \right) - \exp \left( -\frac{3400}{T_e} \right) \right] \cdot \\ \left[ 1 + \exp \left( -\frac{3400}{T_v} \right) \right]^{-1} e V \text{ cm}^{-3} \text{ s}^{-1} \quad (5)$$

La  $T_v$  que resulta de igualar las ecuaciones (4) y (5) está graficada en la figura 5 (curva c). Se observa que ésta es inferior a las anteriormente calculadas en casi toda la región E, que a los 105 km se aproxima a la calculada con el modelo J77 y que a alturas superiores se aproxima a la calculada con la medición de Sharp (1980) de  $n(0)$ .

### Conclusiones

- Se ha obtenido la  $T_v$  a partir de la densidad de  $O^+$  medida "in situ" por Zbinden y otros, (1975), analizando su variabilidad con la densidad de 0.
- Esta metodología permite concluir que dentro del conocimiento actual de los parámetros utilizados,  $T_v$  se encuentra muy por encima de  $T_n$  en toda la región E.
- Se ha encontrado además que la temperatura vibracional necesaria para mantener  $T_e$  por encima de  $T_n$ , según lo indican mediciones "in situ" de  $T_e$ , está sin embargo casi siempre bien por debajo de la obtenida a partir de  $n(O^+)$ .
- Las conclusiones (b) y (c) muestran que el mecanismo de calentamiento primario no es el propuesto por Walker (1968) sino que existe algún otro mecanismo más intenso capaz de perturbar, incluso, la atmósfera neutra.

### APENDICE

Tranferencia de energía del gas de electrones al gas neutro

#### a) Excitación rotacional de $N_2$ y $O_2$

La velocidad de pérdida de energía de los electrones por excitación rotacional de una molécula diatómica es (ver p.e. Mentzoni y Row, 1963):

$$\frac{dU_e}{dt} = v \sum_j N_j \left[ \sigma_{j,j+2} (E_{j+2} - E_j) - \sigma_{j,j-2} (E_j - E_{j-2}) \right], \quad (A.1)$$

donde  $v$  es la velocidad del electrón,  $N_j$  es la densidad de población de moléculas en el estado rotacional  $J$ ,  $\sigma_{j,j+2}$  y  $\sigma_{j,j-2}$  son las secciones eficaces de colisión rotacional para colisiones de primero y de segundo tipo respectivamente (funciones del momento cuadrupolar, de la energía del electrón y de la constante rotacional) y  $E_j$  es la energía del estado rotacional  $J$ . Si se halla el valor medio de  $dU_e/dt$  utilizando una distribución Maxwelliana, y se lo grafica como función de  $T_e$  para distintos valores de densidades  $n_e$  y  $n_n$  se ha encontrado que una expresión del tipo:

$$\left\langle \frac{dU_e}{dt} \right\rangle \propto n_e n_n \frac{T_e - T_n}{T_e^{1/2}} \quad (A.2)$$

ajusta perfectamente las curvas obtenidas.

Este factor de proporcionalidad ha sido determinado tanto experimentalmente (ver p.e. Anderson y Golstein, 1955) como teóricamente utilizando la ec. (A1).

Para  $N_2$  (Mentzoni y Row, 1963)

$$\left\langle \frac{dU_e}{dt} \right\rangle \approx 2 \times 10^{-14} n_e n_{N_2} \frac{T_e - T_n}{T_e^{1/2}} ; \frac{e v}{\text{cm}^3 \text{ s}} \quad (A.3)$$

y para  $O_2$  (Dalgarno, 1969):

$$\left\langle \frac{dU_e}{dt} \right\rangle \approx 7 \times 10^{-14} n_e n_{O_2} \frac{T_e - T_n}{T_e^{1/2}} ; \frac{e v}{\text{cm}^3 \text{ s}} \quad (A.4)$$

#### b) Excitación de la estructura fina de 0

La velocidad de variación de energía de los electrones por excitación de la estructura fina del 0 se calcula integrando sobre todas las energías la sección eficaz de estructura fina y las funciones de distribución

de velocidad del oxígeno y de los electrones (Hoegy, 1976):

$$\frac{dU_e}{dt} = n_e n_o \frac{2}{\sqrt{\pi}} \frac{m_o}{m_e + m_o} \sqrt{\frac{2 k T_n}{m_o} + \frac{2 k T_e}{m_e}} \int_{0, U_m}^{\infty} dx e^{-x} \cdot \left\{ G_{I \rightarrow J} x \sigma_{I \rightarrow J}(xJ) + \frac{m_e}{m_e + m_o} 2 k (T_n - T_e) x^{3/2} \cdot \right. \\ \left. \cdot (\sqrt{x + E_{IJ} / k J} G_{I \rightarrow J}^M(xJ) + (\sqrt{x + E_{IJ} / k J} - \sqrt{x}) \sigma_{I \rightarrow J}(xJ)) \right\} \quad (A.5)$$

donde el límite inferior de integración es cero o el valor umbral según se trate de una desexcitación o una excitación respectivamente,  $\sigma$  es la sección eficaz inelástica total,  $G^M$  es la sección eficaz inelástica de transferencia de momento,

$$J = \frac{m_e T_n + m_o T_e}{m_e + m_o}$$

con  $m_e$  y  $m_o$  las masas del electrón y del oxígeno respectivamente y  $E_{IJ} = E_I - E_J$  es la diferencia de energía entre los niveles I y J.

Reemplazando en (A.5) los valores de las secciones eficaces,  $m_e$ ,  $m_o$  e integrando se obtiene

$$\frac{dU_e}{dt} = 8,629 \times 10^{-6} \frac{n_e n(o)}{z} \sum A \Gamma(B) T_e^{B-1/2} \cdot \left\{ \epsilon (D_x - E_x) + 5,91 \times 10^{-9} \cdot (T_n - T_e) ((1+B) D_x + (E/T_e + 1 + B) E_x) \right\}, \text{ e V cm}^{-3} \text{ s}^{-1} \quad (A.6)$$

La suma se realiza sobre las transiciones 12, 02 y 01 y los coeficientes adoptan respectivamente los siguientes valores:

$$\epsilon = 0,02; 0,028; 0,008$$

$$D_x = \exp(-228/T_1); \exp(-326/T_o); \exp(-326/T_o)$$

$$E_x = \exp(-228/T_e); \exp(-326/T_e); \exp(-(\frac{98}{T_e} + \frac{228}{T_1}))$$

$$E = 228; 326; 98$$

$$z = 5 + 3 \exp(-228/T_1) + \exp(-326/T_o),$$

con  $T_1 \approx T_o \approx T_n$ ,  $A = 7,983 \times 10^{-6}; 9,466 \times 10^{-6}; 1,037 \times 10^{-8}$  y  $B = 1,021; 0,8458; 1,633$ .

Sumando las ec. (A.3), (A.4) y (A.6) se obtiene la ecuación (4).

## BIBLIOGRAFIA

- Alcaydeé, D., P. Bauer, A. Hedin y J.E. Salah, 1978: Compatibility of seasonal variations in mid-latitude thermospheric models at solar maximum and low geomagnetic activity; *J. Geophys. Res.*, 83, 1141.
- Anderson, J.M. y L. Goldstein, 1955: Interaction of electromagnetic waves of radio - frequency in isothermal plasmas: Collision cross section of helium atoms and ions for electrons; *Phys. Rev.*, 100, 1037.
- Azpiazu, M.C. y S. Duhau, 1982a: Daytime E-region ion and nitric oxide densities; *J. Phys. D, App. Phys.*, 933.
- Azpiazu, M.C. y S. Duhau, 1982b: Variaciones de las densidades iónicas con la actividad solar; *GEOACTA*, 11, 169.
- Dalgarno, A., 1969: Inelastic collisions at low energies; *Can. J. Chem.*, 47, 1723.
- De la Torre, A. y S. Duhau, 1983a: La temperatura vibracional del  $N_2$  en la región E de la Ionósfera. I: Teoría; *GEOACTA*, 12, (en prensa).
- De la Torre, A. y S. Duhau, 1983b: La temperatura vibracional del  $N_2$  en la región E de la Ionósfera, II: Análisis de los parámetros y resultados; *GEOACTA*, 12, (en prensa).
- Duhau, S. y M.C. Azpiazu, 1981a: Non-thermal equilibrium between electrons and neutrals at ionospheric E-region heights, *Geophys. Res. Lett.*, 8, 819.
- Duhau, S. y M.C. Azpiazu, 1981b: La temperatura electrónica en la región E de la Ionósfera; *GEOACTA*, 11, 165.
- Hedin, A.E., C.A. Reber, G.P. Newton, N.W. Spencer, H.C. Brinton, H.G. Mayr y W.E. Potter, 1977: A global thermospheric model based on mass spectrometer and incoherent scatter data MSIS2. Composition; *J. Geophys. Res.*, 82, 2148.
- Heroux, L., M. Cohen y J.E. Higgins, 1974: Electron densities between 110 and 300 km derived from the solar E U V fluxes of August 23, 1972; *J. Geophys. Res.*, 79, 5237.
- Hoegy, W.R., 1976: New fine structure cooling rate; *Geophys. Res. Lett.*, 3, 541.
- Jacchia, L.G., 1977: Thermospheric temperature, density and composition: New models; *Smiths. Astrophys. Obs. Spaces Rep.*, 375.
- Kayser, D.C., E.L. Breig, R.A. Power, W.B. Hanson y A.O. Nier, 1979: Direct in situ measurement of thermospheric temperature, *J. Geophys. Res.*, 84, 4321.
- Mentzoni, M.H. y R.V. Row, 1963: Rotational excitation and electron relaxation in nitrogen; *Phys. Rev.*, 130, 2312.
- O'Malley, T.F., 1970: Simple model for the high energy reaction of  $O^+$  ions with  $N_2$ ; *J. Chem. Phys.*, 52, 3269.
- Richmond, A.D., 1972: Numerical model of the equatorial electrojet, AFCRL - 72 0668; *Environmental Res. Papers*, 421

- Schmeltekopf, A.L., F.C. Fehsenfeld, G.I. Gilman y E.E. Ferguson, 1967: Reaction of atomic oxygen ions with vibrationally excited nitrogen molecules; Planet. Sp. Sci., 15, 401.
- Sharp, W.E., 1980: Absolute concentrations of O (3p) in the lower thermosphere at night., Geophys. Res. Lett., 7, 485.
- Spencer, N.W., L.H. Brace y G.R. Carignan, 1962: Electron temperature evidence for nonthermal equilibrium in the ionosphere; J. Geophys. Res., 67, 157.
- Walker, J.C.G., 1968: Electron and nitrogen vibrational temperatures in the E-region of the ionosphere; Planet Sp. Sci., 16, 321.
- Zbinden, P.A., M.A. Hidalgo, P. Eberhardt y J. Geiss, 1975: Mass spectrometer measurements of the positive ion composition in the D- and E-region of the ionosphere; Planet. Sp. Sci., 23, 1621.