Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт астрономии Российской академии наук

На правах рукописи

Цуриков Григорий Николаевич

Исследование молекулы NO как потенциального биомаркера в атмосферах экзопланет

1.3.1. Физика космоса, астрономия

Диссертация на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук

> Научный руководитель: д.ф.-м.н., профессор, академик РАН, Бисикало Дмитрий Валерьевич

Москва 2025

Оглавление

Введение
Глава 1. Молекула NO как перспективный биомаркер в атмосферах экзопланет
1.1 Возможные биомаркеры в атмосферах экзопланет 19
1.2 Индикаторы N ₂ -O ₂ доминантных атмосфер
1.3 Молекула NO в верхней атмосфере Земли
Глава 2. Описание программного комплекса для исследования возможности
обнаружения молекулы NO в атмосферах экзопланет
2.1 Модель образования молекулы NO в верхней N ₂ -O ₂ атмосфере планеты 38
2.1.1 Модель химии нечетного азота
2.1.2 Кинетическая модель Монте-Карло (КММК) высыпания электронов 43
2.1.3 Модель Монте-Карло для надтепловых атомов азота 46
2.1.4 Валидация модели образования NO на примере атмосферы Земли 49
2.2 Построение спектров излучения и пропускания NO в верхних N2-O2
атмосферах планет
2.2.1 Модель излучения NO 57
2.2.2 Модель пропускания света в N ₂ -O ₂ атмосфере
2.3 Модель расчета S/N для обнаружения NO с помощью КТ Спектр-УФ 73
2.3.1 Метод трансмиссионной спектроскопии74
2.3.2 Метод эмиссионной спектроскопии 80
Глава 3. Образование NO в атмосферах экзопланет у активных звезд
3.1 Основные предположения
3.2 Нетепловое образование NO в N ₂ -O ₂ атмосферах экзопланет
3.3 Концентрация NO в атмосферах экзопланет при различной интенсивности
высыпания электронов
3.4 Оценка теплового баланса атмосферы при высыпаниях электронов 96
Глава 4. Возможность обнаружения NO с помощью КТ Спектр-УФ 106
4.1. Экзопланеты и звезлы 107

4.1.1 Экзопланеты	107
4.1.2 Звезды	112
4.2 Методы трансмиссионной и эмиссионной спектроскопии для обнар	ужения
NO на экзопланетах	116
4.3 Возможность обнаружения NO на экзопланетах у звезд с высоким	и XUV
потоками	124
4.4 Возможность обнаружения NO при интенсивных высыпаниях элек	стронов
в атмосферу экзопланеты	132
4.4.1. Глубина транзита	134
4.4.2 Предельные расстояния для регистрации NO со Спектр-УФ	136
Заключение	145
Благодарности	147
Список литературы	149

Введение

Поиск потенциально Актуальность работы. обитаемых миров представляет собой сложную теоретическую и наблюдательную задачу, решение которой зависит от множества факторов [1]. Обязательным (но не достаточным) условием обитаемости считается [2] нахождение планеты в зоне потенциальной обитаемости (ЗПО), в пределах которой на поверхности планеты возможно существование жидкой воды, а в ее атмосфере отсутствует сильный парниковый эффект. Исследования [3,4] показывают, что важным дополнительным условием потенциальной обитаемости является наличие у данной планеты N2-O2 доминантной атмосферы. Такая атмосфера может образоваться на планете в результате геологических и биологических процессов [3]. Прямыми индикаторами такой атмосферы и, следовательно, биомаркерами могут служить молекулы N_2O , NO_2 , NO и N_2-O_2 димеры [4]. Их спектральные особенности можно потенциально зарегистрировать В атмосферах экзопланет с помощью современных космических телескопов (KT) [4–6].

К настоящему моменту открыто уже более 5800 экзопланет, среди которых около 35-ти ближайших (< 100 пк) экзопланет земного типа (экзо- и супер-земель, < $2R_E$, суб-нептунов, < $4R_E$) находятся в ЗПО у своих звезд [7]. С помощью спектрографов наземных и космических телескопов открыто и проанализировано около 250 атмосфер экзопланет, в которых обнаружено суммарно около 60 атомов и молекул. Большинство из этих атмосфер исследовано у горячих газовых гигантов. С запуском современных КТ (например, КТ им. Джеймса Уэбба) появилась возможность получать спектры атмосфер экзопланет земного типа и исследовать их на предмет наличия молекул-биомаркеров. Эта задача будет входить и в научную программу разрабатываемого в России КТ Спектр-УФ [8], который будет получать данные в ультрафиолетовом (УФ) диапазоне длин волн.

Среди молекул-биомаркеров, индикаторов N_2-O_2 доминантной атмосферы, перспективной для поиска с КТ Спектр-УФ является молекула окиси азота. Из спектральных наблюдений верхней атмосферы Земли (спутники SNOE, SME, AE-C, AE-D, обсерватория OGO) известно, что наиболее интенсивными спектральными полосами этой молекулы в ближнем УФ диапазоне являются γ -полосы, 203–248 нм. При высоком содержании NO γ -полосы практически не блендируются полосами Шумана-Рунге O₂ и Хартли O₃. Наблюдения земной атмосферы также показывают [9], что NO эффективно образуется в ее верхних слоях при: (а) высыпаниях энергичных электронов (1-10 кэВ) из магнитосферы; (б) воздействии мягкого рентгеновского излучения Солнца (X-ray, 1-10 нм).

В связи с этим особую актуальность приобретает работа по созданию численных моделей, которые позволят: 1. Исследовать образование молекулы NO в N_2 – O_2 атмосферах экзопланет земного типа; 2. Моделировать спектры пропускания и излучения NO в N_2 – O_2 атмосферах в УФ диапазоне длин волн; 3. Определить отношение сигнала к шуму, S/N, необходимого для регистрации спектральных линий биомаркера NO в атмосферах экзопланет земного типа с помощью планируемого к запуску КТ Спектр-УФ, с целью формирования научной программы данного телескопа. Решение этих задач позволит определить шансы для обнаружения биомаркера NO в атмосферах экзопланет и сформировать список наиболее перспективных целей для КТ Спектр-УФ. Само же обнаружение NO на экзопланетах позволит сделать выводы об их обитаемости.

Цели и задачи. Основными целями диссертационной работы являются: исследование молекулы NO как перспективного биомаркера в атмосферах экзопланет; определение условий, при которых возможно обнаружить этот биомаркер с помощью планируемого к запуску российского КТ Спектр-УФ; формирование списка экзопланет для поиска NO с КТ Спектр-УФ. В работе предлагается решить ряд задач:

- Исследование тепловых и нетепловых механизмов образования молекулы NO в верхних атмосферах экзопланет земного типа. Построение модели химии нечетного азота и ее валидация на атмосфере Земли. Определение высотных профилей молекулы NO в верхних атмосферах планет земного типа.
- Определение возможности обнаружения молекулы NO в атмосферах экзопланет методами трансмиссионной и эмиссионной спектроскопии с помощью КТ Спектр-УФ. Моделирование спектров пропускания и излучения NO в предполагаемой N₂-O₂ атмосфере экзопланеты. Определение наблюдательного времени для надежного (S/N ≥ 3) обнаружения NO с КТ Спектр-УФ.
- 3. Исследование влияния жесткого УФ (XUV, 1-91.2 нм) излучения звезды и высыпания магнитосферных электронов в атмосферы экзопланет на изменение содержания NO. Определение возможности обнаружения NO в таких планетных системах.
- Отбор экзопланет, наиболее подходящих для поиска NO с КТ Спектр-УФ.

Научная новизна. В диссертационной работе впервые:

- Исследована возможность обнаружения потенциального биомаркера NO в атмосферах экзопланет земного типа с помощью планируемого к запуску КТ Спектр-УФ. Установлено, что с помощью спектрографа с длиной щелью (СДЩ, R = 1000) КТ Спектр-УФ обнаружение NO возможно на типичных супер-землях и суб-нептунах, находящихся в радиусе вплоть до 30 пк от Земли.
- Разработана химическая модель, позволяющая исследовать нетепловое образование молекулы-биомаркера NO при высыпании магнитосферных электронов в верхние N₂-O₂ атмосферы планет земного типа. Установлено, что при продолжительном высыпании электронов даже с небольшими потоками энергии (1 эрг см⁻² с⁻¹)

прирост концентрации NO за счет нетеплового канала ее образования составляет 2 порядка величины по сравнению с тепловым каналом.

- 3. Исследовано образование молекулы NO в атмосферах экзопланет у активных звезд. Показано, что с увеличением интенсивности высыпания электронов в атмосферу экзопланеты (при увеличении потока звездного ветра) содержание NO растет линейно за счет нетеплового канала образования этой молекулы. Рекомендован поиск NO на экзопланетах в зоне потенциальной обитаемости у активных звезд спектральных классов G и ранних K.
- 4. Проанализированы и отобраны наиболее перспективные экзопланеты для поиска NO с помощью КТ Спектр-УФ.

Научная и практическая значимость. Проведено исследование возможности обнаружения потенциального биомаркера NO в атмосферах экзопланет земного типа. Показано, что с помощью КТ Спектр-УФ возможно обнаружить NO на типичных супер-землях и суб-нептунах в радиусе вплоть до 30 пк от Земли.

В ходе выполнения диссертации выработаны рекомендации для научной программы КТ Спектр-УФ по поиску биомаркера NO в атмосферах экзопланет. Отобраны экзопланеты-кандидаты для поиска в их атмосферах NO с помощью КТ Спектр-УФ.

Модель расчета отношения сигнала к шуму, S/N, разработанная в рамках выполнения диссертации, использовалась при создании калькулятора экспозиций КТ Спектр-УФ (код государственной регистрации программы для ЭВМ - № 2024686952). Эта модель позволяет планировать эксперимент по основным научным задачам КТ Спектр-УФ и будет использоваться при отборе заявок на наблюдения данного КТ.

Разработанная в диссертации модель образования NO в верхней N₂-O₂ атмосфере Земли может использоваться при формировании краткосрочного прогноза изменения структуры термосферы как отклика на воздействие

факторов космический погоды. Это необходимо при исследовании динамики низкоорбитальных спутников.

Методология и методы исследования. В ходе выполнения диссертационной работы создан программный комплекс для исследования молекулы-биомаркера NO в N₂–O₂ атмосферах экзопланет и определения возможности обнаружения этой молекулы с помощью КТ Спектр-УФ. Комплекс включает следующие модели и алгоритмы:

1. Для исследования образования молекулы NO в N₂-O₂ доминантных атмосферах планет земного типа разработана одномерная модель химии нечетного азота с учетом молекулярной и турбулентной диффузии. Эта модель позволяет описать процессы химии нечетного азота в верхней атмосфере планеты при высыпании в нее энергичных электронов. Численное решение задачи осуществляется методом расщепления по физическим процессам. Для решения уравнений химической кинетики используется системы программный пакет CVODE [10], предназначенный для решения жестких систем дифференциальных уравнений. Численное решение уравнения диффузии производится методом Кранка-Николсона. В качестве входных данных используются результаты расчетов процессов высыпания электронов в верхнюю атмосферу планеты. Расчеты производятся с помощью следующих а) Кинетической модели Монте-Карло (КММК) моделей: высыпания электронов в верхнюю атмосферу планеты [11]. На основе решения уравнения данная модель описывает взаимодействие высыпающихся Больцмана электронов с окружающим атмосферным газом и перенос электронов. Выходными данными этой модели являются скорости диссоциации, ионизации, диссоциативной ионизации молекулярного азота N₂ электронным ударом; б) Модели КММК кинетики и переноса надтепловых атомов азота в верхней атмосфере [A4], [A5], которые образуются при диссоциации N₂ электронным ударом. Результат работы модели – частоты нетеплового образования NO.

2. Для моделирования спектров пропускания N2-O2 атмосфер экзопланет в УФ диапазоне длин волн модифицирована line-by-line модель переноса Py4CAtS Модификация излучения [12]. модели заключалась В ee переориентации с ИК на ближний УФ спектральный диапазон (180–250 нм) путем расчета и обновления сечений поглощения. Помимо спектральных линий молекулы NO, у-полос (203-248 нм), в модели также учитывается поглощение света в полосах молекул O_2 , O_3 , N_2O , NO_2 , SO_2 , а также рэлеевское рассеяние на молекулах N₂, O₂, CO₂, Ar в ближнем УФ диапазоне. Модель позволила рассчитать коэффициенты поглощения исследуемых атомов и молекул в каждом атмосферном слое, оптическую толщину, эффективную высоту атмосферы и наблюдаемую глубину транзита экзопланеты.

Моделирование излучения молекулы NO в γ-полосах производилось с помощью разработанного соискателем численного кода, основанного на методиках [13,14], которые предназначены для обработки результатов наблюдений излучения NO в γ-полосах в атмосфере Земли.

Для расчета отношения S/N, необходимого для обнаружения 3. спектральных полос NO в атмосферах экзопланет методами трансмиссионной и эмиссионной спектроскопии, использовалась методика [15]. Для более точных расчетов в модели были учтены все полезные и шумовые характеристики измерительного канала спектрографа, а также зодиакальный свет и свечение земной атмосферы. Разработанная модель использовалась при создании калькулятора экспозиций КΤ Спектр-УФ. Исследование возможности обнаружения излучения NO на экзопланетах с помощью коронографа на борту КТ Спектр-УФ производилось на основе методики [16], которая предназначена для поиска экзопланет методом прямого обнаружения.

Достоверность представленных в диссертационной работе результатов исследования потенциального биомаркера NO в атмосферах экзопланет обеспечивается применением хорошо обоснованных теоретических моделей. Разработанные модели прошли валидацию на атмосфере Земли, что позволило провести их тонкую настройку по результатам сравнения с экспериментальными данными и другими моделями. Результаты работы на всех этапах докладывались на конференциях и семинарах. Основные результаты опубликованы в рецензируемых журналах из списка, рекомендованного ВАК.

Апробация работы. Основные результаты работы представлены на следующих российских и зарубежных конференциях:

- 7-я, 8-я и 9-я Международные школы для студентов и молодых ученых «Исследования экзопланет 2022, 2023, 2024». г. Москва, Россия, 17-18.10.2022, 04-05.11.2023, 18-19.11.2024.
- Всероссийская конференция «Звездообразование и планетообразование», г. Москва, Россия, 15-17.11.2022.
- Всероссийская конференция «Исследования звезд с экзопланетами 2022», г. Суздаль, Россия, 23-27.11.2022.
- 4. 50-я Всероссийская с международным участием студенческая научная конференция «Физика Космоса», с. Слобода, Россия, 30.01-03.02.2023
- 5. Всероссийская конференция с международным участием «Физика звёзд: теория и наблюдения», г. Москва, Россия, 26-30.06.2023.
- 6. XX Международный симпозиум по молекулярной спектроскопии высокого разрешения, г. Иркутск, Россия, 03-07.07.2023.
- 1-я и 2-я Всероссийские школы по экспериментальной и лабораторной астрофизике и геофизике, г. Саров, Россия, 10- 14.07.2023, 1-5.07.2024.
- 8. Региональная конференция МАС для Азиатско-Тихоокеанского региона APRIM 2023, г. Корияма, Япония, 7-11.08.2023.
- Всероссийская конференция «Ультрафиолетовая Вселенная 2023», г. Москва, Россия, 16-19.10.2023.
- 10.45-я Научная ассамблея COSPAR 2024, г. Пусан, Корея, 12-21.07.2024
- 11. Генеральная ассамблея МАС 2024, г. Кейптаун, ЮАР, 6-15.08.2024

12.Всероссийская астрономическая конференция 2024 года (ВАК-2024), п. Нижний Архыз, Россия, 25-31.08.2024

Основные положения, выносимые на защиту.

- 1. Установлено, что с помощью спектрографа с длинной щелью космического телескопа (КТ) Спектр-УФ возможно обнаружить молекулу-биомаркер NO в атмосферах экзопланет земного типа. Пределы обнаружения NO на экзопланетах в зоне потенциальной обитаемости у спокойных звезд солнечного типа не превышают 1 пк. Пределы обнаружения NO могут увеличиться до 8 и 30 пк для типичных супер-земель и суб-нептунов в зоне потенциальной обитаемости у активных звезд, которые подвержены высоким потокам энергии высыпающихся электронов (80 эрг см⁻² с⁻¹) и XUV излучения (5 солнечных XUV потоков).
- 2. Сформирован список экзопланет для поиска молекулы NO с КТ Спектр-УФ в их атмосферах. Среди 35 ближайших (<100 пк) экзопланет в зоне потенциальной обитаемости кандидатами для обнаружения NO с КТ Спектр-УФ являются: т Сеt е (14 транзитов для регистрации сигнала), HD 192310 с (4 транзита), HD 31527 d (17 транзитов), а также HD102365 b, HD69830 b, HD216520 с и HD10180g.
- 3. Разработан программный комплекс для исследования молекулы биомаркера NO в N₂–O₂ атмосферах экзопланет и определения возможности обнаружения этой молекулы с помощью КТ Спектр УФ. В комплексе алгоритмически объединены модели, позволяющие: исследовать тепловое и нетепловое образование молекулы NO в N₂-O₂ атмосферах экзопланет; строить спектры пропускания и излучения NO в УФ диапазоне длин волн; рассчитывать отношение S/N, необходимое для регистрации спектральных линий NO с помощью спектрографов Спектр-УФ.

4. Для расширения списка потенциальных целей КТ Спектр-УФ по поиску NO исследованы возможные пути увеличения концентрации этой молекулы в атмосферах экзопланет у активных звезд. Установлено, что за счет вклада надтепловых атомов азота в образование NO при интенсивных высыпаниях электронов прирост содержания NO в атмосфере может а) составить 2 порядка величины и б) иметь линейных характер с увеличением потока высыпающихся электронов. Показано, что поиск молекулы NO оптимально вести на экзопланетах в зоне потенциальной обитаемости у активных звезд спектральных классов G и ранних K.

Личный вклад автора. Соискатель в равной степени участвовал в постановке задач. Им самостоятельно разработан программный комплекс для исследования молекулы-биомаркера NO в N2-O2 атмосферах экзопланет и определения возможности обнаружения этой молекулы с помощью КТ В Спектр-УФ. разработанных моделях используются результаты кинетического моделирования [11]. С помощью созданного комплекса соискателем были: проведены расчеты содержания NO в атмосферах экзопланет земного типа; построены спектры излучения и пропускания N₂-O₂ атмосферы планеты в ближнем УФ диапазоне; определено наблюдательное время для регистрации спектральных полос NO в атмосферах экзопланет и отобраны экзопланеты-кандидаты для поиска NO с КТ Спектр-УФ. Соискатель активно участвовал в написании статей, в которых изложены результаты проведённого исследования.

Структура и объем диссертации. Диссертация состоит из введения, четырех глав и заключения. Число страниц в диссертации — 169, рисунков — 31, таблиц — 10. Список литературы содержит 230 наименований.

Содержание работы. Во Введении обсуждается актуальность темы диссертационной работы и степень ее разработанности; формулируются цели и задачи работы; описаны методология и методы проводимых исследований; показана научная новизна полученных результатов, их теоретическая и практическая значимость, апробация; представлены основные положения, выносимые на защиту; обосновывается достоверность результатов и указывается личный вклад соискателя; представлен список публикаций соискателя.

В Главе 1 проведен анализ современного состояния проблемы поиска биомаркеров в атмосферах экзопланет. Сформулирована задача по созданию программного комплекса для исследования потенциального биомаркера молекулы NO и определению возможности обнаружения этой молекулы в атмосферах экзопланет с помощью КТ Спектр-УФ. В разделе 1.1 представлены общие критерии к выбору молекул-биомаркеров и обсуждаются известные ИЗ литературы биомаркеры. В 1.2 некоторые разделе проанализированы молекулы-индикаторы N₂-O₂ доминантной атмосферы планеты. Выделена молекула NO как перспективный биомаркер для поиска на экзопланетах с помощью КТ Спектр-УФ. В разделе 1.3 проведен анализ а) спутниковых наблюдений NO в ближнем УФ диапазоне земной атмосферы и б) известных из наблюдений [9] источников образования NO в верхней атмосфере Земли.

В Главе 2 представлено описание разработанного программного комплекса для исследования образования молекулы-биомаркера NO в атмосферах экзопланет и определения условий, при которых возможно обнаружить NO с помощью планируемого к запуску КТ Спектр-УФ. В разделе 2.1 приводится описание разработанной модели теплового и нетеплового образования NO в N₂-O₂ атмосфере планеты земного типа при высыпании в нее энергичных электронов (1-10 кэВ). В модели решается система уравнений вертикальный химической а также учитывается кинетики, перенос компонентов за счет молекулярной и турбулентной диффузии. В качестве входных данных в модели используются результаты расчетов высыпания электронов в верхнюю атмосферу планеты, полученные с помощью

кинетических моделей [11], [А4], [А5]. В разделе также представлена валидация разработанной модели на примере атмосферы Земли.

В разделе 2.2.1 представлена модель излучения молекулы NO в спектральных γ -полосах (203 – 248 нм). Проведено сравнение разработанной модели с существующими моделями и наблюдениями NO в земной атмосфере [13]. В разделе 2.2.2 представлено описание модели, предназначенной для построения спектров пропускания N₂-O₂ атмосфер экзопланет в VФ диапазоне длин волн. Эта модель, основанная на line-by-line модели переноса излучения Py4CAtS [12], позволяет с рассчитать коэффициенты поглощения исследуемых атомов и молекул, оптическую толщину атмосферы и наблюдаемую глубину транзита экзопланеты. Помимо γ -полос NO, в модели также учитывается поглощение света в полосах молекул O₂, O₃, N₂O, NO₂, SO₂, а также рэлеевское рассеяние в ближнем VФ диапазоне. В разделе 2.3 описана методика расчета отношения S/N для регистрации спектральных линий NO методами эмиссионной и трансмиссионной спектроскопии. Описана также методика расчета S/N для регистрации излучения NO с помощью коронографа.

В Главе 3 представлены результаты расчетов образования молекулы NO в N_2 - O_2 атмосферах экзопланет у активных звезд. В разделе 3.1 представлен перечень предположений, в рамках которого были проведены расчеты: 1) На экзопланете сформировалась N_2 - O_2 доминантная атмосфера, аналогичная земной; 2) Экзопланета подвержена более интенсивному воздействию звездного ветра, чем Земля, и, следовательно, более интенсивным высыпаниям электронов в атмосферу; 3) Структура нейтральной верхней атмосферы не изменяется под действием высоких потоков высыпающихся электронов. Допустимость последнего предположения показана в разделе 3.4 на основе оценки теплового баланса в атмосфере.

В разделе 3.2 представлены результаты расчетов нетеплового образования NO при постоянном высыпании электронов с потоком энергии 1 эрг см⁻² с⁻¹. В Разделе 3.3 представлено описание численных расчетов

образования NO, которые проводились для разных потоков энергии высыпающихся электронов в атмосферу, 1 - 80 эрг см⁻² с⁻¹, и при рассмотрении теплового и нетеплового каналов формирования NO. По результатам расчетов показано, что существует как минимум два пути увеличения содержания NO на экзопланетах у активных звезд. Оба пути связаны с нетепловым каналом образования NO во время высыпаний энергичных электронов в верхнюю атмосферу планеты: 1) При продолжительных высыпаниях электронов (в отличие от Земли, где эти процессы спорадичны) прирост концентрации NO за счет нетеплового канала может составить 2 порядка величины по сравнению с тепловым каналом; 2) С ростом потока энергии высыпающихся электронов (при увеличении потока звездного ветра) увеличение концентрации NO за счет нетеплового канала имеет линейный характер, в отличие от теплового случая, для которого характерна нелинейная степенная зависимость с положительной дробной частью.

В Главе 4 исследуется возможность обнаружения молекулы NO в атмосферах экзопланет земного типа с помощью КТ Спектр-УФ. Основным результатом данного исследования являются предельные расстояния от Земли до экзопланет, при которых регистрация сигнала с КТ Спектр-УФ возможна с $S/N \ge 3$, а суммарное время наблюдений не превышает 120-200 часов (\approx 5-8 орбит КТ Спектр-УФ). Расчеты проводились для типичных экзо- и суперземель, суб-нептунов, которые находятся в ЗПО у звезд разных спектральных классов. Описание модельных и реальных экзопланет и звезд, для которых проводятся расчеты, представлены в **разделе 4.1**. Также обсуждаются предположения, которые были сделаны при расчетах.

В разделе 4.2 по результатам расчетов показано, что при условиях в атмосферах экзопланет, аналогичных земной атмосфере, обнаружение NO с помощью спектрографа СДЩ (R = 1000) КТ Спектр-УФ возможно на экзопланетах, расположенных на небольших расстояниях от Земли, не превышающих 1 пк, если для поиска NO используются методы

15

трансмиссионной и эмиссионной спектроскопии. Предложены условия, при которых обнаружение NO с помощью КТ Спектр-УФ может быть возможно: если экзопланета подвержена более высоким потокам XUV излучения и звездного ветра, чем Земля.

В разделе 4.3 проверяется одна из указанных гипотез – исследуется возможность обнаружения NO на экзопланетах, подверженных высоким потокам XUV излучения звезды. По результатам расчетов показано, что рост температуры и расширение атмосферы, вызванные этим фактором, повышают шансы обнаружить NO с помощью спектрографа СДЩ КТ Спектр-УФ. Предельные расстояния до экзопланет для обнаружения NO методом трансмиссионной спектроскопии могут увеличиться до 5 и 20 пк для типичных супер-земель и суб-нептунов, которые подвержены XUV потоку звезд, в 5 и более превышающему солнечный наблюдений поток. Для раз предпочтительны экзопланеты у звезд G и ранних К классов. Также показано, что регистрация излучения NO при тех же условиях в атмосферах экзопланет возможна только с использованием коронографа с контрастом $10^{-8} - 10^{-9}$ на борту КТ Спектр-УФ.

В разделе 4.4 определяется возможность обнаружения NO на экзопланетах у звезд с высокими потоками звездного ветра и XUV излучения. Показано, что рост содержания NO при интенсивных высыпаниях электронов в атмосферы экзопланет у активных звезд может привести к расширению границ для обнаружения данной молекулы. Предельные расстояния для обнаружения NO могут увеличиться до 8 и 30 пк для типичных супер-земель и суб-нептунов, которые подвержены интенсивным высыпаниям электронов с потоком энергии 80 эрг см⁻² с⁻¹ и потоку жесткого XUV излучения, равного 5 солнечным XUV потокам. Среди 35-ти ближайших (< 100 пк) экзопланет земного типа в ЗПО подходящими кандидатами для обнаружения NO с KT Спектр-УФ являются: τ Cet e (14 транзитов для регистрации сигнала) и HD

192310 с (4 транзита), HD 31527 d (17 транзитов), а также HD 102365 b, HD 69830 b, HD 216520 с и HD 10180 g.

В Заключении представлены основные итоги выполненного исследования. Обсуждаются рекомендации и перспективы дальнейшей разработки темы, а также приводятся благодарности.

Публикации по теме диссертации. Статьи в журналах, рекомендованных ВАК:

- [A1] Tsurikov G., Bisikalo D., On the Possibility of Observing Nitric Oxide on Terrestrial Exoplanets Using the WSO-UV Observatory // Astronomy Reports. 2023. V. 67, No. 2. pp. 125–143.
- [A2] Tsurikov G., Bisikalo D., NO Biomarker: Transmission and Emission Methods for Its Potential Detection in Exoplanet Atmospheres with Spektr-UF (WSO-UV) // Astronomy Reports. 2023. V. 67, No. 11. pp. 1123–1138.
- [A3] Tsurikov G., Bisikalo D., Shematovich V., Zhilkin A., Searching for Biomarkers with Spektr-UF Observatory: Nitric Oxide Molecule in Atmospheres of Exoplanets near the Active Host Stars // Astronomy Reports. 2024. V. 68, No. 12. pp. 1406–1422.
- [A4] Shematovich V., Bisikalo D., Tsurikov G., Non-Thermal Nitric Oxide Formation in the Earth's Polar Atmosphere // Atmosphere. 2023. № 14. C. 1092.
- [A5] Shematovich V., Bisikalo D., Tsurikov G., Zhilkin, A., Non-Thermal Processes of Nitric Oxide Formation during Precipitation of Auroral Electrons into the Upper Atmospheres of Terrestrial Planets // Astronomy Reports. 2024. V. 68, No. 8. pp. 843-864.
- [A6] Zhilkin, A., Shematovich V., Bisikalo D., Tsurikov G., 3D Numerical Model for Studying Electron Precipitation in the Upper Atmospheres of Venus-Like Exoplanets // Astronomy Reports. 2024. V. 68, No. 12. pp. 1252–1265.

Другие публикации автора по теме диссертации:

[В1] Цуриков Г. Н., Бисикало Д. В., Оценка возможности обнаружения окиси азота на экзопланетах земного типа — с обсерваторией Спектр-УФ // Физика космоса: труды 50-й Международной студенческой научной конференции (Екатеринбург, 30.01-03.02.2023 г.). Екатеринбург: УрФУ. 2023. С. 494-498.

Глава 1. Молекула NO как перспективный биомаркер в атмосферах экзопланет

1.1 Возможные биомаркеры в атмосферах экзопланет

Наличие у планеты, находящейся в ЗПО, атмосферы определенного химического состава может быть результатом биологической и геологической активности. Атомы и молекулы, которые являются индикаторами такой атмосферы или индикаторами отдельных биологических процессов, считаются биомаркерами. Поэтому эффективной стратегией исследования обитаемости экзопланет является поиск в их атмосферах спектральных линий молекул-биомаркеров. Анализу таких молекул посвящено большое количество работ¹ [3,4,17–26] и др. В этих работах предлагаются разные молекулы в качестве наиболее надежных биомаркеров.

Ранее перспективной считалась [17,18,22] стратегия поиска атмосфер с доминантным содержанием молекул O₂ (продукт фотосинтеза) и O₃ (продукт фотохимических реакций с участием O₂) и с примесью молекул CH₄ (продукт метаногенеза²) и N₂O (промежуточный продукт денитрификации³). Однако молекулярный кислород и озон могут в больших количествах производиться абиотическим путем при образовании первичной плотной паровой атмосферы планеты за счет диссоциации H₂O под воздействием жесткого УФ излучения звезды (см., например, [27]). Существуют и другие абиотические пути производства O₂ и O₃ в атмосферах планет (см. таблицу 1 в [26]). Поэтому обнаружение у экзопланеты атмосферы с доминантным содержанием O₂ и O₃ еще не является подтверждением ее обитаемости.

Результаты недавних исследований позволяют предположить, что надежным биомаркером на планете земного типа может служить N₂-O₂ доминантная атмосфера [3,4]. Молекулы N₂ и O₂ являются основными

¹ Большинство из этих работ направлены на поиск известных земных форм жизни.

² Процесс, в котором бактерии могут в анаэробных условиях получать энергию в реакциях типа CO₂ + 4H₂ → CH₄ + 2 H₂O с выделением метана в атмосферу.

³ Процесс, в котором бактерии в аэробных условиях преобразуют нитрат NO₃⁻ в молекулярный азот, N₂, который поступает в атмосферу.

компонентами атмосферы Земли. В работе [3] показано, что поддержание в земной атмосфере парциального давления N₂, ≈ 0.78 бар, и O₂, ≈ 0.21 бар, на современном уровне было бы невозможно без существенного поступления этих молекул в атмосферу в результате процессов с участием бактерий. Наиболее эффективными процессами производства молекулы N₂ являются денитрификация и анаэробное окисление аммония⁴, молекулы O₂ – фотосинтез. Кроме того, тектоническая активность, приводящая к субдукции литосферных плит с последующей вулканической дегазацией, по-видимому, также являлась важным процессом поступления N₂ в земную атмосферу на протяжении ее эволюции [3,28,29]. Таким образом, обнаружение N₂-O₂ атмосферы на экзопланете, находящейся в ЗПО у своей родительской звезды, может являться признаком наличия на ней аэробных форм жизни и геологической активности [3,4].

Стоит подчеркнуть, что представленный в данной работе анализ касается в основном только простых молекул, которые могут быть потенциальными биомаркерами. При этом мы рассматриваем N₂-O₂ атмосферу, которая является индикатором известных земных форм жизни. В общем случае можно рассматривать и более сложные молекулы в качестве биомаркеров (см., например, [24]), а атмосферы обитаемых планет потенциально могут быть сформированы и за счет других форм жизни.

выборе молекул-биомаркеров Важным критерием при является возможность регистрации их спектральных линий с помощью существующих инструментов с заданной точностью (отношением S/N) и за разумное времени, наблюдательное пределах время (в выделяемого научной программой телескопа). Хорошо известно, что исследование атмосфер экзопланет представляет собой сложную наблюдательную задачу, которая зачастую требует многотранзитных наблюдений. Тем не менее, к настоящему

⁴ Процесс, в котором бактерии в анаэробных условиях преобразуют ион аммония NH_4^+ и нитрит NO_2^- в молекулярный азот и воду $NH_4^+ + NO_2^- \rightarrow N_2 + 2H_2O$

моменту с помощью спектрографов современных наземных и космических телескопов открыто и проанализировано около 250 атмосфер экзопланет, в которых обнаружено суммарно около 60 атомов и молекул⁵. Большинство из этих атмосфер исследовано у горячих газовых гигантов. С помощью современных КТ, уже работающих на орбите (например, КТ им. Джеймса Уэбба, JWST) и планируемых к запуску (PLATO ~2026 г., КТ им. Нэнси Роман ~2027 г., Спектр-УФ ~2029 г., ARIEL ~2029 г., HabEx ~2035 г., LUVOIR ~2039 г., Habitable World Observatory ~2040-е г., LIFE ~2050е г.), появляется возможность получать спектры атмосфер экзопланет земного типа и исследовать их на предмет наличия молекул-биомаркеров. Эта задача является одной из основных в научной программе разрабатываемого в России КТ Спектр-УФ [8,30,31], который будет получать данные в ультрафиолетовом диапазоне длин волн.

1.2 Индикаторы N₂-O₂ доминантных атмосфер

Поиск N₂-O₂ доминантных атмосфер экзопланет представляет собой сложную наблюдательную задачу. Рассмотрим молекулы, которые являются индикаторами такой атмосферы и, следовательно, потенциальными биомаркерами (см. Таблицу 1).

Молекула N_2 является неполярной и не имеет колебательно-вращательных переходов. При этом ее спектральные линии в дальнем и ближнем УФ, видимом и ИК диапазонах, вызванные электронными переходами (см. [32]), являются слишком слабыми, чтобы зарегистрировать их в атмосферах экзопланет. Довольно большие значения сечения поглощения имеет N_2 на длинах волн < 100 нм [32,33]. Однако регистрация поглощения N_2 в этом диапазоне на экзопланетах может быть осложнена высокой переменностью XUV потока у звезд спектрального класса G и более поздних классов, а также сильным межзвездным поглощением. В земной атмосфере молекулярный азот

⁵ URL: <u>https://research.iac.es/proyecto/exoatmospheres/index.php</u> (дата обращения 20.01.2025)

является основной составляющей рэлеевского рассеяния на молекулах воздуха (N₂, O₂, CO₂, Ar). Рэлеевское рассеяние может приводить к росту глубины транзита экзопланеты с уменьшением длины волны в видимом и ближнем УФ спектра [34] сечение диапазоне (так как рэлеевского рассеяния пропорционально $\sim \lambda^{-4}$). В работе [35] обнаружение данного эффекта с помощью КТ JWST на супер-земле LHS 1140 b, находящейся в ЗПО, было интерпретировано как наличие у этой планеты N₂-доминантной атмосферы с уровнем значимости 2.3 о. Другим методом регистрации N₂ является поиск спектральных линий столкновительного комплекса (димера) N₂-N₂ в ИК диапазоне. Однако на длинах волн > 40000 нм спектральные линии этого димера перекрываются полосами водяного пара, а на длине волны 4300 нм – спектральной линией CO₂ [36]. Тем не менее, при высоком содержании N₂ в атмосфере экзопланеты спектральная линия СО₂ будет претерпевать уширение, этот эффект потенциально можно зарегистрировать с помощью КТ JWST [36]. Еще одна спектральная линия N₂-N₂ димера располагается на длине волны 2200 нм. В работе [35] было сделано предположение о регистрации этой линии в атмосфере экзопланеты LHS 1140 b.

К наиболее сильным спектральным линиям O_2 и O_3 , которые можно потенциально зарегистрировать с помощью современных телескопов, обычно относят [18,22,37–41]: для O_2 – спектральные полосы Шумана-Рунге (< 200 нм) и Герцберга (> 230 нм) в ближнем УФ диапазоне, полосы Фраунгофера В (688 нм) и А (764 нм) в видимом диапазоне, полосу λ 1270 нм в ИК диапазоне; для O_3 – спектральные полосы Хартли (210 – 300 нм) в ближнем УФ диапазоне, полосы Хаггинса и Шалона-Лефевра (> 300 нм), Шапюи (500 – 700 нм) в видимом диапазоне, полосу λ 9600 нм в ИК диапазоне.

Стоит отметить, отдельное обнаружение как N₂, так и O₂ (обсуждалось paнee) в атмосфере экзопланеты может являться ложным признаком биологической активности. Так, исследования атмосферы Титана показали, что плотная N₂-доминантная атмосфера может эффективно образовываться

абиотическим путем при фото-диссоциации NH₃, который испаряется с приповерхностного H₂O-NH₃ океана [42].

Моле-	Свойства и пути	Спектральные особенности
кула	образования	
N ₂	Признак N ₂ атмосферы	ИК диапазон – слабые спектральные
	Продукт	полосы;
	денитрификации,	Видимый и ближний УФ диапазон –
	анаэробного окисления	рэлеевское рассеяние [34]. Сделано
	аммония, вулканической	предположение о регистрации на
	дегазации	экзопланете LHS 1140b [35];
		Сильная спектральная линия λ391.4 нм в
		земной атмосфере [43];
		< 100 нм – сильное поглощение [32,33].
		Обнаружение на экзопланетах
		затруднено за счет переменной звездной
		активности и межзвездного поглощения.
N_2-N_2	Признак N ₂ атмосферы	> 40000 нм – спектральные линии
		перекрываются полосами H ₂ O [36];
		А4300 нм [36] спектральная линия
		перекрывается линией СО ₂ и может
		привести к ее наолюдаемому уширению;
		лагиотронни сцелано предположение о
		регистрации спектральной линии на
Ω_{2}	Признак Оратмосфери	MK $\pi \mu \mu \mu \mu 2 \rho \mu = c \pi e \kappa \tau \rho \mu \mu \mu q$
02	Пролукт фотосинтеза	$\lambda 1270$ µm перспективна ли поиска на
	продукт фотоститези	жаопланетах [39 44].
		Вилимый лиапазон – спектральные
		полосы Фраунгофера А λ 764 нм и В λ 668
		нм перспективны лля поиска на
		экзопланетах [18,22,37–39];
		УФ диапазон – спектральные полосы
		Шумана-Рунге < 200 нм и Герцберга >
		230 нм [18,37]. Эти полосы
		перспективны для поиска на
		экзопланетах с помощью КТ Спектр-УФ
		[41]

Таблица 1. Молекулы-индикаторы N₂-O₂ атмосферы планеты земного типа, их свойства, пути образования и спектральные особенности.

Продолжение Таблицы 1.

Моле- кула	Свойства и пути образования	Спектральные особенности
O ₃	Признак O ₂ атмосферы Продукт фотохимических реакций с участием O ₂ (система реакций Чэпмена)	 ИК диапазон – спектральная линия λ9600 нм перспективна для поиска на экзопланетах [22,38,40]; Видимый диапазон - спектральные полосы Шапюи λ500-700 нм перспективны для поиска на экзопланетах [37]; УФ диапазон – спектральные полосы Хартли λ210-300 нм, Хаггинса и Шалона-Лефевра > 300 нм [18,37]. Эти полосы перспективны для поиска на экзопланетах с помощью КТ Спектр-УФ [41].
NO ₂	Признак N ₂ -O ₂ атмосферы Вторичный продукт денитрификации [24] и реакций, вызванных нагревом от молний [45]. Продукт фотохимических реакций в тропосфере и стратосфере [46]. Продукт сжигания ископаемого топлива и биомассы.	Видимый диапазон – спектральные полосы λ350-500 нм вносят меньший вклад в глубину транзита, чем рэлеевское рассеяние [37]; УФ диапазон – спектральные полосы 115-300 нм перекрываются полосами O ₂ и O ₃ [37].
N ₂ O	Признак N2-O2 атмосферы. Промежуточный продукт денитрификации [5,24]. Вторичный продукт анаэробного окисления аммония [5,24]; и реакций, вызванных нагревом от молний [45]	ИК диапазон – спектральные линии λ2900 нм, λ4500 нм, λ7800 нм, 8500 нм перспективны для поиска на экзопланетах при высоком производстве N ₂ O в ходе денитрификации [5]; УФ диапазон - спектральные полосы 115- 240 нм перекрываются полосами O ₂ и O ₃ [37].
N2-O2	Признак N2-O2 атмосферы.	ИК диапазон – спектральная линия λ1270 нм блендируется линией димера O ₂ -O ₂ и более сильной линией O ₂ [47]

Продолжение Таблицы 1.

Моле-	Свойства и пути	Спектральные особенности
кула	образования	
NO	Признак N ₂ -O ₂ атмосферы. Промежуточный продукт денитрификации [24]. Продукт реакций, вызванных нагревом атмосферы за счет молний и падения малых тел [3,48– 52]. Продукт химических реакций в верхней N ₂ -O ₂ атмосфере, вызванных звездным рентгеновским излучением и высыпаниями энергичных электронов [9]. Индикатор геомагнитной и солнечной активности	ИК диапазон – фундаментальная спектральная линия λ 5300 нм ($\Delta v = 1$) перспективна [56] для поиска на экзопланетах при высокой звездной активности [57] и при сильной грозовой активности [53]; Менее интенсивные спектральные линии λ 2700 нм (первый обертон, $\Delta v =$ 2) и λ 1800 нм (второй обертон, $\Delta v =$ 3) могут перекрываться спектральными линиями CO ₂ , OH, H ₂ O; УФ диапазон – система γ-полос, λ 203- 248 нм. При высоком содержании NO может не блендироваться спектральными полосами O ₂ и O ₃ . Эта
	[53,54]; Разрушает озоновый слой [55].	система полос перспективна для
		Спектр-УФ.

То же касается атомарного азота и кислорода, которые могут в большом количестве содержаться в верхней N₂-O₂ доминантной атмосфере планеты. Спектральные линии этих атомов хорошо видны в УФ части спектра земной атмосферы [43]. Существуют различные оценки возможности их регистрации в атмосферах экзопланет. Так, в работе [58] было показано, что количество транзитов для регистрации с помощью КТ LUVOIR триплета азота λ 120 нм на экзопланетах земного типа, расположенных на расстояниях > 1 пк от Земли, превышает 10000 (время одного транзита \approx 12 часов). Согласно [59], регистрация с помощью КТ Спектр-УФ на экзо-земле Proxima Cen b за время, не превышающее 20 минут. Что, вероятно, является слишком

 $^{^{6}}$ Спектральная линия OI λ 130.4 нм примерно в 10 раз интенсивнее линии NI λ 120 нм ([43], Таблица 2).

оптимистичной оценкой. Стоит отметить, как и с молекулами N₂ и O₂, отдельное обнаружение атомов N или O может являться ложным биомаркером.

Поэтому важно вести поиск молекул, состоящих из азота и кислорода, которые могут эффективно формироваться в N₂-O₂ атмосфере планеты и, следовательно, являются более надежными биомаркерами. К таким молекулам, которые можно потенциально зарегистрировать на экзопланетах, можно отнести [3,4] N₂O, NO₂, NO и N₂-O₂ димеры.

Спектральные линии молекул NO₂ и N₂O в ближнем УФ и видимом диапазонах длин волн в атмосфере Земли перекрываются полосами поглощения O₂ и O₃ [37]. В работах [15,60] было отмечено, что полосы N₂O в ИК диапазоне (2900, 4500, 7800, 8500 нм) слабы для их регистрации на экзопланетах. Однако в [5] было показано, что при довольно высоком темпе поступления этой молекулы в атмосферу биологическим путем (в ходе денитрификации), обнаружение N₂O на экзопланете TRAPPIST-1е потенциально возможно с помощью KT JWST.

Димер N₂-O₂ может напрямую указывать на доминантное присутствие N₂ и O₂ в атмосфере экзопланеты. Однако, спектральная полоса этого столкновительного комплекса в ИК диапазоне на 1270 нм может блендироваться полосой другого димера O₂-O₂ и полностью перекрываться довольно сильной спектральной полосой O₂ на указанной длине волны [6,47].

Молекула NO также служит индикатором N₂-O₂ доминантной атмосферы. Она является промежуточным продуктом процесса денитрификации [24] и могла эффективно производиться на ранних этапах эволюции Земли при нагреве атмосферы за счет молний и падения малых тел [3,48–52]. Отличительной особенностью данной молекулы является то, что она эффективно образуется в верхней N₂-O₂ атмосфере Земли (см. раздел 1.2). Средняя объемная концентрация NO на высотах 5 – 50 км земной атмосферы [61], $\approx 1.5 \times 10^9$ см⁻³, лишь на 1 порядок величины больше, чем на высотах 100-150 км при средней геомагнитной активности [9] (см. для оценки Рисунок 2). Окись азота также является эффективным охладителем верхней атмосферы Земли за счет ИК излучения на длине волны 5300 нм [62–64], а также индикатором солнечной и геомагнитной активности [53,54]. Эту молекулу, следовательно, можно считать потенциальным био-гео-маркером.

В ИК диапазоне NO имеет сильную спектральную полосу на длине волны 5300 нм. Возможность регистрации с помощью КТ JWST излучения в этой полосе в верхних слоях атмосферы экзопланеты была продемонстрирована ранее в [57]. В этой работе было показано, что с увеличением звездной активности шансы для обнаружения NO увеличиваются. Однако оценка наблюдательного времени (1.5 часа), необходимого для обнаружения этой молекулы на экзопланетах земного типа с КТ JWST, вероятно слишком оптимистична. Обнаружение пропускания света звезды в ИК полосе NO также потенциально возможно с помощью инструментов КТ JWST на экзопланетах с высокой грозовой активностью [65]. В работе [56] было также вычислено предельное содержание NO для регистрации пропускания света в ИК полосе NO в атмосферах экзопланет разного химического состава.

Среди перечисленных азот- и кислородсодержащих молекул окись азота потенциально является наиболее перспективным биомаркером для поиска на экзопланетах в ближнем УФ диапазоне с помощью КТ Спектр-УФ. Из наблюдений атмосферы Земли (см. раздел 1.2) известно, что наиболее интенсивными спектральными полосами этой молекулы в ближнем УФ диапазоне являются γ -полосы (203-248 нм). Как известно, на длинах волн < 200 нм доминирующую роль в поглощении света занимает молекулярный кислород [37]. В более длинноволновой части спектра доминирует поглощение света молекулами О₃ в полосах Хартли. А на длине волны 210 нм достигается минимум этого поглощения [66]. Таким образом, в диапазоне образования γ -полос NO находится своеобразное окно, где эти полосы могут в меньшей степени блендироваться полосами О₂ и O₃ при высоком содержании NO.

Основной целью данной диссертационной работы является исследование возможности обнаружения потенциального биомаркера NO в атмосферах экзопланет земного типа в ближнем УФ диапазоне с помощью планируемого к запуску КТ Спектр-УФ. Основными результатами данной работы будут: а) выработка условий, при которых возможно обнаружить NO; б) формирование списка экзопланет-кандидатов для поиска этой молекулы со Спектр-УФ. Для этого необходимо создать программный комплекс, который позволит: 1) Исследовать образование молекулы NO в N_2 –O₂ атмосферах экзопланет земного типа; 2) Моделировать спектры пропускания и излучения NO в N_2 -O₂ атмосферах в УФ диапазоне длин волн; 3) Определить возможность обнаружения спектральных линий биомаркера NO в атмосферах экзопланет земного типа с помощью планируемого к запуску КТ Спектр-УФ.

1.3 Молекула NO в верхней атмосфере Земли

Из анализа спутниковых наблюдений УФ свечения верхней атмосферы Земли [43,67–69] известны спектральные проявления молекулы NO в ближнем УФ диапазоне (170 – 310 нм): β -, δ -, ϵ -, γ -полосы (Рисунок 1). Наиболее интенсивными среди этих спектральных полос в земной атмосфере являются γ -полосы [43,68]. Эта система полос вызвана электронным переходом между возбужденным $A^2\Sigma^{+7}$ и основным $X^2\Pi$ состояниями (см. Рисунок 1), $\Delta E \approx 5.4$ эВ. Известно два механизма излучения NO в γ -полосах в земной атмосфере:

а) резонансное пере-излучение (флуоресценция) солнечного света;

б) радиативная ассоциация N + O, за которой следует каскадный переход между С²П и Х²П электронными состояниями [43]:

⁷ Время жизни в возбужденном $A^2\Sigma^+$ электронном состоянии составляет около 200 нс [70].

Этот механизм излучения проявляется в ночном свечении земной атмосферы. Его также обнаружили в спектральных наблюдениях атмосфер Венеры и Марса [71–74].

Интенсивность излучения в γ-полосах NO за счет флуоресценции более чем на порядок величины превышает интенсивность излучения за счет радиативной ассоциации [43,75].



Рисунок 1. Схема некоторых энергетических уровней и радиативных переходов молекулы NO

Система γ -полос состоит из отдельных электронно-колебательновращательных линий. Наиболее сильно в земной атмосфере проявляются [43,68]⁸: (1,0) λ 214.9 нм; (0,1) λ 236.3 нм; (0,0) λ 226.2 нм; (1,1) λ 223.9 нм; (2,0) λ 204.7 нм; (2,2) λ 221.6 нм; (3,1) λ 203 нм электронно-колебательные γ -полосы. По спектральным наблюдениям колебательной (1,0) γ -полосы NO

⁸ Спектральные полосы представлены в порядке убывания интенсивности в земной атмосфере

экспериментально определяют концентрацию этой молекулы в термосфере Земли. Такие исследования проводились ранее с помощью спутников: OGO (Orbiting Geophysical Observatory [76]); AE-C и AE-D (Atmospheric Explorer [77]); SME (Solar Mesosphere Explorer [78]) и SNOE (Student Nitric Oxide Explorer [9,79,80]). По результатам наблюдений и фотохимического моделирования были выявлены и подтверждены следующие источники, влияющие на формирование окиси азота в верхней атмосфере Земли (см. Рисунок 2):

1. Излучение Солнца в мягком рентгеновском диапазоне, поток которого влияет на образование NO в большей степени в экваториальных областях [9,81,82]. Поглощение рентгеновского излучения атмосферным газом сопровождается образованием фотоэлектронов, ре, (200 – 600 эВ). Эти фотоэлектроны, как и фотоны, взаимодействуя с молекулярным азотом, приводят к его диссоциации (E_{dis} = 9.76 эВ):

$$N_2 + hv, pe \rightarrow N(^4S) + N(^2D)$$
(2)

Взаимодействие продуктов этой диссоциации, атомов азота в основном N(⁴S) и метастабильном N(²D) ($\Delta E = 2.38$ эВ) состояниях, с молекулярным кислородом O₂ является основным источником формирования NO:

$$N(^{2}D) + O_{2} \rightarrow NO + O$$
(3)

$$N(^{4}S) + O_{2} \rightarrow NO + O$$
(4)

Реакция (3) не имеет энергии активации. На высотах земной атмосферы, ниже 130 км, эта реакция в основном производит NO в течение дня и гораздо менее эффективна ночью. Реакция (4), в свою очередь, имеет энергетический барьер 0.3 эВ, т.е. сильно зависит от температуры. Она является основным источником NO днем на высотах > 130 км и ночью на высотах < 130 км [79,83].

2. Высыпание энергичных электронов (1–10 кэВ) магнитосферного происхождения (в основном из хвоста магнитосферы), ае, в полярные области атмосферы Земли. Этот процесс приводит к диссоциации, прямой и диссоциативной ионизации N₂ (E_{ion} = 15.6 эВ) электронным ударом:

$$N_2 + ae \rightarrow N(^4S) + N(^2D)$$
 (5)

$$N_2 + ae \rightarrow N_2^+ + 2e^- \tag{6}$$

$$N_2 + ae \rightarrow N^+ + N(^4S, ^2D) + e^-$$
 (7)

В дальнейшем продукты этих реакций N(⁴S, ²D) взаимодействуют с O₂ и приводят к образованию окиси азота в реакциях (3) и (4) [9,81,84]. Наблюдения атмосферы Земли показывают, что максимум концентрации NO достигается на высотах 106–110 км [9,79].

31

3. Образование надтепловых⁹ атомов азота N_{hot}(4S) в процессах (2) и (5) с избытком кинетической энергии (см. [85,86]) и неравновесной функцией распределения по энергии (см. Рисунок 16 в Главе 3). Взаимодействие N_{hot}(⁴S) с молекулами О₂ является дополнительным нетепловым источником производства NO в земной атмосфере:

$$N_{hot}(^{4}S) + O_{2} \rightarrow NO + O$$
(8)

Ранее по результатам химического и кинетического моделирования было показано [87–90], что эта реакция может приводить к довольно сильному увеличению концентрации NO в экваториальных областях. Так, учет реакции (8) с атомами $N_{hot}(^4S)$, которые образуются в ходе диссоциации N_2 фотоэлектронами (2), способствует увеличению максимума содержания NO в ~ 2 раза [90]. Детальных исследований влияния $N_{hot}(^4S)$ (которые образуются при высыпании энергичных электронов из магнитосферы) на производство NO в полярных областях атмосферы планеты ранее не производилось. Это исследование является одной из задач данной диссертационной работы.

4. Джоулев нагрев атмосферы во время геомагнитных штормов. Скорость Джоулева нагрева пропорциональна концентрации электронов, n_e, и квадрату напряженности электрического поля [91], Е. Увеличение потока энергии высыпающихся электронов, Q₀, приводит к росту величин n_e и Е и способствует довольно сильному нагреву атмосферы [91]. Данный процесс

⁹ Кинетическая энергия надтепловых частиц на 1 порядок величины и более превышает среднюю кинетическую энергии окружающего газа, которая на высотах >100 км меняется от 0.02 до 0.1 эВ.

влияет на образование NO через чувствительную к температуре реакцию (4). Кроме того, Джоулев нагрев влияет на образование вертикального ветра, который переносит NO на высоты >120 км в термосфере Земли [91]. По результатам обработки наблюдений спутника SME в работе [91] показано, что в полярных областях атмосферы Земли во время увеличения геомагнитной активности образование NO происходит как за счет высыпания электронов, так и под воздействием Джоулева нагрева. При этом первый процесс является основным источником NO на высотах <120 км, а источником NO на высотах >120 км является Джоулев нагрев (за счет вертикального переноса).



Рисунок 2. Принципиальная схема образования NO в верхней атмосфере Земли. Черным цветом выделены основные процессы, предшествующие формированию NO в атмосфере. Зеленым и красным цветом выделены основные реакции образования и потери NO, соответственно. На графике синей кривой показана концентрация NO в атмосфере. Данные для высот <80 км (штриховая кривая) взяты из ([61], программы Ру4Cats [12]). Для высот >80 км – из работы [A3].

Основными механизмами потери NO в верхней атмосфере Земли является взаимодействие этой молекулы с атомами N(4 S, 2 D) и реакция перезарядки с ионами O₂⁺:

$$N(^{2}D) + NO \rightarrow N_{2} + O$$
⁽⁹⁾

$$N(^{4}S) + NO \rightarrow N_{2} + O$$
 (10)

$$O_2^+ + NO \rightarrow NO^+ + O_2 \tag{11}$$

Эти процессы вносят основной вклад в потерю NO на ночной стороне Земли. На дневной стороне планеты NO в основном разрушается в результате диссоциации солнечными фотонами [84] (E_{dis} = 6.5 эВ). Полная совокупность процессов образования и потери NO в верхней атмосфере Земли описывается системой реакций химии нечетного азота (см. Таблицу 2 в Главе 2) [81,84,90,92,93].

33

Исследования NO в верхней атмосфере Земли показали, что скорость образования этой молекулы существенно зависит от приходящей и поглощающейся в атмосфере солнечной энергии [81,84,89,90,92,93]. С ростом потока рентгеновского излучения и потока энергии высыпающихся электронов растет и содержание NO (см. Рисунки 3 и 4) [81,84,90,92,93]. При этом увеличение концентрации NO происходит обычно на следующий день после повышения уровня солнечной активности [9,93]. От приходящей энергии зависит и высота максимума содержания NO: чем больше средняя кинетическая энергия фото- или авроральных электронов, тем глубже в атмосферу они проникают, тем ниже высота пика концентрации NO [93]. Таким образом, NO является прямым индикатором солнечной и геомагнитной активности [53,54]. По содержанию этой молекулы в земной атмосфере, решая обратную задачу, можно определить потоки приходящего рентгеновского излучения [81] и потоки энергии высыпающихся электронов [53].

Из наблюдений также известно, что значения концентрации NO в полярной области земной атмосферы обычно больше, чем в экваториальной области на дневной стороне (см. Рисунок 3) [9]. Это связано с тем, что: а) скорость диссоциации N₂ за счет столкновения с авроральными электронами (5) больше, чем за счет столкновений с фотоэлектронами (2) (см. Рисунок 5 в [81]); б) на дневной стороне в экваториальной области NO более эффективно теряется за счет фотодиссоциации.

На основе корреляционного анализа, проведенного по результатам наблюдений NO с помощью спутника SNOE с 11.03.1998 по 30.09.2000, было [9,94], что: a) в области широт 0°-35° образование NO показано контролируется за счет мягкого рентгеновского излучения Солнца; б) на широтах >55° за счет высыпания энергичных электронов; B) В промежуточной области 35°-55° ЭТИ источники вносят практически идентичный вклад при спокойных геомагнитных условиях.



Рисунок 3. Высотные распределения концентрации NO в термосфере Земли по данным наблюдений спутника SNOE [9]. Красные кривые отражают распределение концентрации NO в экваториальной области при различных уровнях солнечной активности: низком ($F_{10.7}^{10} < 132$, штриховая кривая); умеренном ($132 < F_{10.7} < 165$, сплошная кривая); высоком ($F_{10.7} > 165$, штрих-пунктирная кривая). Синие кривые отражают распределение концентрации NO в полярной области при различных уровнях геомагнитной активности: низком ($Ap^{11} < 6$, штриховая кривая); умеренном (6 < Ap < 12, сплошная кривая); высоком (Ap > 12, штрих-пунктирная кривая). Рисунок составлен на основе Рисунков 6 и 7 из [9].

 $^{^{10}}$ F_{10.7} – поток солнечного излучения на длине волны 10.7 см. Выражается в единицах солнечного потока, s.f.u, 1 s.f.u. = 10^{-22} Вт м⁻² Гц⁻¹. Является индикатором солнечной активности, имеет корреляцию с потоком рентгеновского излучения [95]

¹¹ Ар – индекс геомагнитной активности, который определяется на основе Кр индекса и характеризует колебания горизонтальной составляющей индукции магнитного поля Земли.

Однако с ростом геомагнитной активности образование NO увеличивается как в полярных областях, так в средних и экваториальных широтах [9,96,97]. Это увеличение можно наблюдать на Рисунке 4а, где показана зависимость концентрации NO на высоте 110 км от времени, широты, индекса геомагнитной активности Ap, потока энергии высыпающихся электронов, Q₀, эрг см⁻² с⁻¹, показателя солнечной активности $F_{10.7}$ и потока рентгеновского излучения в диапазоне 2 - 7 нм, эрг см⁻² с⁻¹. Из Рисунка следует, что каждый резкий скачок индекса Ap или потока Q₀ сопровождается краткосрочным содержания NO практически увеличением на всех широтах. Рост концентрации NO при этом наблюдается в экваториальной области при увеличении потока солнечного рентгеновского излучения и индекса F_{10.7}. Характерный пример воздействия высыпания электронов на широтное распределение NO показан на Рисунке 46. Этот пример подробно проанализирован в [9]. На Рисунке показан отклик содержания NO на геомагнитный шторм 25 Сентября 1998 года (268 день в 1998 году). На следующий день после геомагнитного шторма концентрация NO увеличилась по всей поверхности планеты. При этом поток рентгеновского излучения практически не менялся в рассматриваемый промежуток времени и, следовательно, не влиял на рост концентрации NO. Наблюдаемое увеличение содержания NO по всей поверхности планеты в работе [9] связали с меридиональным ветром, который мог переносить NO с полярной области в экваториальную. Эти наблюдения дают возможность использовать NO в качестве индикатора горизонтального переноса массы в верхней атмосфере [9]. И позволяют предположить, что при сильных геомагнитных штормах, вызванных, например, корональными выбросами массы (КВМ), средняя концентрация NO по поверхности Земли может определяться высыпаниями энергичных электронов.



Рисунок 4. а) Распределение концентрации NO на высоте 110 км в зависимости от времени и широты (нижняя панель), индексов Ap и $F_{10.7}$ (верхняя панель), потока энергии авроральных электронов, Q_0 , эрг см⁻² с⁻¹ и потока рентгеновского излучения в диапазоне 2-7 нм (средняя панель). На Рисунке 46 показано то же, что и на Рисунке 4а, но для выделенного интервала времени. Потоки энергии Q_0 взяты из наблюдений спутника NOAA POES 15^{12} (наблюдения в 1998 году проводились с 1-го июля по 30-е декабря). Все остальные данные взяты из наблюдений спутника SNOE¹³ за 1998 год.

¹² URL: <u>https://www.ngdc.noaa.gov/stp/satellite/poes/dataaccess.html</u> (дата обращения: 20.01.2025)

¹³ URL: <u>https://lasp.colorado.edu/snoe/data/</u> (дата обращения: 20.01.2025)
В случае если экзопланета земного типа находится в зоне потенциальной обитаемости у более активной звезды (спектрального класса G, K, M), чем Солнце, то атмосфера этой планеты может быть подвержена более интенсивным высыпаниям электронов, чем атмосфера Земли. Это безусловно может повлиять на содержание NO и возможность наблюдения этой молекулы. Поэтому важной задачей данной диссертационной работы является создание программного комплекса, позволяющего моделировать тепловое и нетепловое образование NO в предполагаемых N₂-O₂ атмосферах экзопланет при различных уровнях звездной активности. Другими задачами работы также являются: моделирование излучения и поглощения в спектральных у-полосах NO в предполагаемых N₂-O₂ атмосферах экзопланет и исследование возможности регистрации этих полос на экзопланетах с помощью планируемого к запуску КТ Спектр-УФ. Подробное описание программного комплекса для решения указанных задач представлено в следующей главе.

Глава 2. Описание программного комплекса для исследования возможности обнаружения молекулы NO в атмосферах экзопланет

В данной главе представлено описание физико-математических моделей, входящих в состав программного комплекса, созданного в ходе выполнения диссертационной работы.

Глава организована следующим образом: В разделе 2.1 представлено описание модели теплового и нетеплового образования молекулы NO в верхней N₂-O₂ атмосфере планеты и проведена ее валидация на примере верхней атмосферы Земли; В Разделе 2.2 представлено описание моделей излучения и пропускания света в спектральных линиях NO в ближнем УФ диапазоне, проведено сравнение с другими моделями и наблюдениями; В Разделе 2.3 представлена модель расчета S/N, необходимого для регистрации спектральных линий молекул в атмосферах экзопланет методами трансмиссионной и эмиссионной спектроскопии.

2.1 Модель образования молекулы NO в верхней N2-O2 атмосфере планеты

Чтобы определить возможность обнаружения потенциального биомаркера NO на экзопланетах с помощью КТ Спектр-УФ, необходимо знать распределение концентрации этой молекулы в их атмосферах. Предположим, что на экзопланете земного типа, находящейся в зоне потенциальной обитаемости, образовалась устойчивая N₂-O₂ доминантная атмосфера, аналогичная атмосфере Земли¹⁴. Тогда построим модель теплового и нетеплового (с учетом реакции 8) образования молекулы NO в верхней атмосфере Земли, которая впоследствии будет масштабирована на другие экзопланеты.

¹⁴ Это одно из центральных предположений работы, которое подробно рассмотрено в Главах 3, 4.

2.1.1 Модель химии нечетного азота

Известно фотохимических моделей, которые несколько позволяют исследовать тепловое образование молекулы NO в верхней атмосфере Земли (см., например, [81,92,93]). В работах [87–90] были представлены химические модели, учитывающие нетепловой канал образования NO (8) в экваториальных областях земной атмосферы. В данной диссертационной работе создана модель, позволяющая исследовать тепловой и нетепловой каналы образования NO в результате высыпания энергичных электронов в полярные области атмосферы планет. Согласно проведенному ранее анализу, средняя по поверхности Земли концентрация NO может определяться электронными высыпаниями при высокой геомагнитной активности. Поэтому, помимо земной атмосферы, разработанная модель может также использоваться для исследования NO на экзопланетах, подверженных более интенсивным высыпаниям электронов, чем Земля.

Полный перечень рассматриваемых в модели реакций химии нечетного азота с соответствующими коэффициентами скорости реакции представлен в таблице 2. В данной модели решается система уравнений химической кинетики для реакций P1–P19 с учетом вертикального потока, обусловленного диффузией. Таким образом, изменение концентрации, n, молекул со временем описывается уравнением [64]:

$$\frac{\partial \mathbf{n}_{i}}{\partial t} = \mathbf{P}_{i} - \mathbf{L}_{i} - \frac{1}{r^{2}} \frac{\partial (r^{2} \Phi_{i})}{\partial r}, \qquad (12)$$

где r – радиальная координата, P_i и L_i – темп производства и потери частицы сорта i, см⁻³ с⁻¹, $\Phi_i = n_i \times v_{di}$ – вертикальный поток, см⁻² с⁻¹, создаваемый молекулярной и турбулентной диффузией, v_{di} – диффузионная скорость. Под действием турбулентной диффузии профили концентрации отдельных газов соответствуют шкале высот всего газа. Под действием молекулярной диффузии профили концентрации отдельтика соответствуют шкале высот всего газа.

собственным шкалам высот. Выражение для вертикального потока можно записать следующим образом [64]:

$$\Phi_{i} = -\frac{\partial n_{i}}{\partial r} (D_{i} + K_{E}) + n_{i} \left(K_{E} + \frac{m_{i}}{m_{gas}} D_{i} \right) \frac{1}{N} \frac{\partial N}{\partial r} - n_{i} D_{i} \left(1 + \alpha_{t,i} - \frac{m_{i}}{m_{gas}} \right) \frac{1}{T} \frac{\partial T}{\partial r}$$
(13)

где: n_i - концентрация частицы сорта i, см⁻³; N - концентрация газа в атмосфере, см⁻³; m_i и m_{gas} - молекулярные массы частицы сорта i и атмосферного газа, выраженные в массе протона; T - температура газа, K; D_i и K_E – коэффициенты молекулярной и турбулентной диффузии, см²/с; $\alpha_{t,i}$ - коэффициент тепловой диффузии.

Численное решение системы уравнений (12) осуществляется в два этапа в соответствии с методом расщепления по физическим процессам:

На первом этапе в каждой ячейке расчетной области, r_{min} ≤ r ≤ r_{max} (узлы которой распределены неравномерно¹⁵), решается система уравнений химической кинетики:

$$\frac{\partial \mathbf{n}}{\partial \mathbf{t}} = \mathbf{P}_{\mathbf{i}} - \mathbf{L}_{\mathbf{i}} \tag{14}$$

и вычисляются концентрации рассматриваемых компонентов. Для решения этой системы используется программный пакет CVODE [10], предназначенный для решения систем обыкновенных дифференциальных уравнений. Метод решения основан на использовании разностной формулы дифференцирования назад (backward differentiation formulae, BDF). Система уравнений P1–P19, представленная в Таблице 2, является жесткой, так как численные значения констант скоростей реакций могут сильно различаться. Поэтому при решении данной системы необходимо вычислять матрицу Якоби:

$$J_{ij} = \frac{\partial}{\partial n_j} (P_i - L_i n_i)$$
(15)

¹⁵ Размер ячеек ниже локального значения средней длины свободного пробега, как и в модели [11], описанной далее.

Таблица 2. Реакции химии нечетного азота для полярных областей атмосферы Земли с соответствующими коэффициентами скорости реакции, скоростями реакции или частотами реакции. Для некоторых реакций также приведено значение квантового выхода.

Nº	Реакция	Коэффициент скорости, см ³ с ⁻¹ / частота реакции, с ⁻¹ / скорость реакции, см ⁻³ с ⁻¹ / квантовый выход реакции	Источ- ник
P1	$N(^{4}S) + O_{2} \rightarrow NO + O$	$1.5 \times 10^{-14} \text{ T}_{\text{n}} \text{ e}^{-\frac{3270}{\text{T}_{\text{n}}}}$	[64]
P2	$N(^{2}D) + O_{2} \rightarrow NO + O$	$9.7 \times 10^{-12} e^{\frac{-185}{T_n}}$	[64]
Р3	$NO + N(^4S) \rightarrow N_2 + O$	$4 \times 10^{-11} \left(\frac{T_n}{300}\right)^{-0.2} e^{-\frac{20}{T_n}}$	[64]
P4	$NO + O_2 + \rightarrow NO^+ + O_2$	4×10^{-10}	[64]
P6	$NO^+ + e^- \rightarrow N(^4S, ^2D) + O$	$8.4 \times 10^{-8} \left(\frac{(T_i + T_e)/2}{300}\right)^{-0.85}$ f(N(² D)) = 0.85	[64,98]
P7	$N_2^+ + O \rightarrow N(^2D) + NO^+$	$1.33 \times 10^{-10} \left(\frac{(T_{i} + T_{e})/2}{300} \right)^{-0.44}$	[64]
P8	$N_2 + e^- \rightarrow N(^2D) + N(^4S)$	Скорость реакции [cm ⁻³ s ⁻¹], $f(N(^{2}D)) = 0.5$	$2.1.2^{16}$
P9	$N(^{2}D) + O \rightarrow N(^{4}S) + O$	6.9×10^{-13}	[64]
P11	$N_2 + e^- \rightarrow N^+ + N(^4S, ^2D) + e^-$	Скорость реакции [cm ⁻³ s ⁻¹], $f(N(2D)) = 0.5$	2.1.2
P12	$N_2 + e^- \rightarrow N_2^+ + 2e^-$	Скорость реакции [cm ⁻³ s ⁻¹]	2.1.2
P13	$N_2^+ + e^- \rightarrow N(^4S) + N(^2D)$	$1.98 \times 10^{-7} \left(\frac{(T_i + T_e)/2}{300}\right)^{-0.39}$ f(N(² D)) = 0.5	[64,89]
P14	$N_2^+ + O_2 \rightarrow O_2^+ + N_2$	$5.1 \times 10^{-11} \left(\frac{(T_n + T_i)/2}{300} \right)^{-1.16}$	[64]
P15	$N(^{2}D) + NO \rightarrow N_{2} + O$	7×10^{-11}	[64]
P16	$N(^{2}D) + e^{-} \rightarrow N(^{4}S) + e^{-}$	$3.86 \times 10^{-10} \left(\frac{(T_{\rm n} + T_{\rm e})/2}{300} \right)^{0.81}$	[64]
P17	$N(^{2}D) \rightarrow N(^{4}S) + hv$	$1.06 \times 10^{-5} [1/s]$	[64]
P18	$O^+ + N_2 \rightarrow N(^4S) + NO^+$	$1.2 \times 10^{-12} \left(\frac{(T_{\rm n} + T_{\rm i})/2}{300} \right)^{-0.45}$	[64]
P19	$N^+ + O_2 \rightarrow N(^4S) + O_2^+$	$2.02 \times 10^{-10} \left(\frac{(T_n + T_i)/2}{300} \right)^{0.45}$	[64]
P20	$N_{h}(^{4}S) + O_{2} \rightarrow NO + O$	Частота реакции [1/s]	$2.1.3^{16}$

¹⁶ Скорость или частота реакции рассчитана на основе модели, представленной в Разделах 2.1.2 и 2.1.3.

Аналитический вид данной матрицы генерируется автоматически с помощью программы PYODESYS¹⁷, реализованной на языке программирования Python. С помощью программы PYCVODES¹⁸ производится запуск указанного пакета CVODE.

2) На втором этапе находится решение уравнения диффузии:

$$\frac{\partial \mathbf{n}}{\partial \mathbf{t}} = -\frac{1}{\mathbf{r}^2} \frac{\partial (\mathbf{r}^2 \Phi)}{\partial \mathbf{r}},\tag{16}$$

Это уравнение решается для атмосферных компонентов NO и N(⁴S), так как диффузия дает сравнимый с химией вклад в их высотное распределение [93]. Для других атомов и молекул N₂⁺, O₂⁺, NO⁺, N⁺, O⁺ химические процессы проходят быстрее, чем диффузионные [93]. Поэтому для них диффузионный член в правой части уравнения (12) задается равным нулю.

Коэффициент тепловой диффузии для NO и N(⁴S, ²D), $\alpha_t = 0$, согласно [64,99]. Коэффициент молекулярной диффузии определяется выражением $D_i = \frac{\alpha \, 10^{17} \, T^s}{N}$, где $\alpha = 1$, s = 0.75 [64,99]. Коэффициент турбулентной диффузии, $K_E = A \, N^B$, где $A = 10^8$, B = -0.1 согласно [63,64,99]. После дискретизации по времени методом Кранка-Николсона и пространству система уравнений (16) принимает следующую форму [64]:

$$n_{j}^{n+1} + k_{j} \left[r_{j+\frac{1}{2}}^{2} \Phi_{j+\frac{1}{2}}^{n+1} - r_{j-\frac{1}{2}}^{2} \Phi_{j-\frac{1}{2}}^{n+1} \right] = n_{j}^{n} - k_{j} \left[r_{j+\frac{1}{2}}^{2} \Phi_{j+\frac{1}{2}}^{n} - r_{j-\frac{1}{2}}^{2} \Phi_{j-\frac{1}{2}}^{n} \right]$$
(17)

, где j-1/2, j+1/2 – границы ячейки расчетной области, $k_j = \frac{\Delta t}{2r_j^2 \Delta r_j}$. И сводится к

системе линейных уравнений вида:

$$a_j n_{j-1} + b_j n_j + c_j n_{j+1} = -d_j$$
 (18)

, решение которой находится методом трехточечной прогонки. Выражения для коэффициентов a, b, c, d представлены в ([64], Приложение E).

¹⁷ URL: <u>https://github.com/bjodah/pyodesys</u> (дата обращения: 20.01.2025)

¹⁸ URL: <u>https://github.com/bjodah/pycvodes</u> (дата обращения: 20.01.2025)

Концентрации основных нейтральных атмосферных компонентов N₂, O₂, O и ионов NO⁺, O₂⁺, O⁺, N⁺, которые входят в систему реакций P1–P19, предполагаются стационарными и задаются согласно моделям MSISE90 [100] и IRI2016 [101]. Для запуска последней используется программа PyIRI2016¹⁹. Аналогично [93] на каждом расчетном шаге разработанной модели обновляются концентрации второстепенных компонентов NO, N(⁴S, ²D), N₂⁺, а концентрации основных компонентов соответствуют начальным из моделей MSISE90 и IRI2016.

На нижней границе расчетной области, 80 км, аналогично модели верхней атмосферы Земли [64] задаются объемные концентрации рассматриваемых атмосферных компонентов. Предполагается, что концентрация NO на данной высоте соответствует минимальному значению [93]. На верхней границе, которая примерно соответствует уровню экзобазы, 500 км, вертикальный диффузионный поток для NO и N(⁴S) задается равным нулю. Что вполне справедливо для частиц с массой больше, чем масса атомов H и He, которые наиболее сильно подвержены Джинсовскому убеганию из атмосферы [64].

Численное решение задачи производится до установившегося режима в соответствии с критерием установления $||u^{n+1} - u^n||_{l_2} \le \epsilon_1 ||u^n||_{l_{\infty}} + \epsilon_2$, где $\epsilon_1 = 10^{-7}, \epsilon_2 = 10^{-9}$. Шаг по времени определяется диффузионным числом, $N_D = \frac{\Delta t D}{\Delta x^2} < 1$, в соответствии с критерием положительности решения для метода Кранка-Николсона.

2.1.2 Кинетическая модель Монте-Карло (КММК) высыпания электронов

Как отмечалось ранее, основным источником образования молекулы NO в рассматриваемой модели являются высыпания электронов в верхнюю атмосферу планеты. Высыпания электронов приводят к диссоциации, ионизации и диссоциативной ионизации N₂ (5 – 7) (P8, P11-12 в Таблице 2)

¹⁹ URL: <u>https://github.com/rilma/pyIRI2016</u> (дата обращения: 20.01.2025)

электронным ударом. Эти процессы являются драйверами химии нечетного азота. Скорости данных процессов являются входными параметрами модели химии нечетного азота. И рассчитываются с помощью кинетической модели высыпания электронов, разработанной в [11] другими авторами. Ниже приведено краткое описание этой модели.

В модели рассматриваются электроны с энергиями 1-10 кэВ магнитосферного происхождения, которые переносятся в полярные области термосферы и теряют свою кинетическую энергию Е в упругих, неупругих и ионизационных столкновениях с окружающим атмосферным газом в переходной области течения газа между термосферой и экзосферой:

$$e(E) + X \rightarrow \begin{cases} e(E') + X \\ e(E') + X^* \\ e(E') + X^+ + e(E_s) \end{cases}$$
(19)

где Е и Е' < Е – кинетические энергии первичного электрона до и после столкновения; X=O₂, O, N₂; X* и X⁺ атмосферные частицы в основном, возбужденном и ионизованном состояниях; E_s – энергия вторичного электрона, образующегося в ходе столкновения и последующей ионизации. Полный перечень процессов взаимодействия электронов с атмосферным газом представлен в [11]. Сечения для электронного удара с молекулами N₂, O₂, O были взяты из работ [102–105]. Для парциальных сечений ионизации были использованы аппроксимационные формулы из [106,107].

Кинетика и перенос электронов в рассматриваемой переходной области²⁰ течения газа описывается кинетическим уравнением Больцмана [11]:

$$\mathbf{v}\frac{\partial}{\partial \mathbf{r}}\mathbf{f}_{e} + \mathbf{s}\frac{\partial}{\partial \mathbf{v}}\mathbf{f}_{e} = \mathbf{Q}_{e,aur}(\mathbf{v}) + \mathbf{Q}_{e,sec}(\mathbf{v}) + \sum_{m=0,02,N2} \mathbf{J}(\mathbf{f}_{e},\mathbf{f}_{m})$$
(20)

где $f_e(r,v)$, и $f_m(r,v)$ являются функциями распределения по скоростям v для электронов и компонентов окружающего атмосферного газа в точке

 $^{^{20}}$ Так называется область, в которой число Кнудсена, 0.1 < Kn = l/H < 10, где 1 – средняя длина свободного пробега, H = kT/mg – шкала высот. В атмосфере Земли этот диапазон значений Kn достигается в районе термосферы и экзобазы.

пространства г, соответственно. Перенос электронов в гравитационном и магнитном полях планеты s описывается в левой части уравнения. Это силовое поле может быть выражено как $s = g + e/m_e[v \times B]$, где g – ускорение силы тяжести, е и m_e – заряд электрона и его масса, B – индукция магнитного поля. В правой части кинетического уравнения, член $Q_{e,aur}$ задает энергетический спектр высыпающегося на верхней границе (700 км для атмосферы Земли) потока авроральных электронов из магнитосферы, член $Q_{e,sec}$ описываетс скорость образования вторичных электронов в процессах ионизации. Интегралы столкновений J для упругих и неупругих взаимодействий электронов с окружающими атмосферными частицами записываются в стандартном виде [108]. Предполагается, что распределение атмосферного газа по скоростям описывается распределением Максвелла:

$$f_{i}(\mathbf{v}) = \left[\frac{m_{i}}{2\pi kT_{i}}\right]^{3/2} \exp\left[-\frac{m_{i}\mathbf{v}^{2}}{2kT_{i}}\right]$$
(21)

Чтобы численно решить уравнение Больцмана, используется метод Монте-Карло, который заключается в создании набора траекторий, соответствующих состояниям модельных частиц. Таким образом, в численном моделировании рассчитывается эволюция модельных частиц, обусловленная столкновительными процессами и процессами переноса, от начального до установившегося состояния. Влияние столкновительных процессов на эволюцию частицы определяется соответствующими сечениями. Данный метод является эффективным инструментом для исследования кинетики и переноса частиц в стохастическом приближении [11,109,110].

Алгоритм задания набора траекторий для состояний частиц подробно описан в [11,108–110]. В данном алгоритме последовательность переходов между состояниями модельных частиц атмосферного газа и интервалов между данными переходами должна быть представлена в виде соответствующих распределений вероятностей. Для реализации данного алгоритма используется однородная Марковская цепь, в которой переход между состояниями в момент времени t обусловлен столкновениями высыпающихся электронов с атмосферными атомами и молекулами. Физические параметры электронов вычисляются путем усреднения реализаций траекторий случайного процесса.

Основными результатами кинетической модели являются энергетические спектры высыпающихся электронов для разных слоев атмосферы, а также высотные распределения нисходящего и восходящего потоков энергии электронов. Используя энергетические спектры электронов, можно рассчитать скорости процессов диссоциации, ионизации, диссоциативной ионизации N₂ электронным ударом (5 - 7), см⁻³ с⁻¹, с помощью выражения:

$$\int_{0}^{\infty} \phi(E, r) \sigma(E) n(r) dE$$
(22)

где $\phi(E, r)$ – энергетический спектр числового потока электронов, см⁻² с⁻¹ эВ⁻¹, $\sigma(E)$ – сечение процессов (5-7), см², n(r) – концентрация N₂ в атмосфере, см⁻³.

2.1.3 Модель Монте-Карло для надтепловых атомов азота

Система реакций P1–P19, представленная в Таблице 2, описывает тепловой канал образования NO. Как отмечалось, данная система является жесткой. Добавление дополнительных химических реакций в эту систему может довольно сильно изменить ее решение. Такой реакцией является взаимодействие надтепловых атомов азота $N_{hot}(^4S)$ с молекулами O₂ (8). Этот процесс представляет собой нетепловой канал образования NO в верхней атмосфере планеты. Частота данной реакции является входным параметром модели химии нечетного азота. Для ее расчета используется кинетическая модель надтепловых атомов $N_{hot}(^4S)$, которая является модификацией модели для высыпающихся электронов [11] и представлена в [A4, A5]. Ниже приведено краткое описание этой модели.

Как отмечалось в Главе 1, надтепловые атомы N_{hot}(⁴S) могут формироваться в ходе диссоциации N₂ электронным ударом (5). Функция источника, описывающая образование этих атомов в реакции (5), вычисляется на основе данных, полученных в кинетической модели для высыпающихся электронов:

$$Q_{Nh}(h, E) = q_{Nh}(h) \times f_{Nh}(h, E)$$
(23)

где $q_{Nh}(h)$ - скорость образования надтепловых атомов $N_{hot}({}^{4}S)$ в реакции (5) на высоте h, a $f_{Nh}(h, E)$ – нормализованная на единицу функция распределения образовавшихся атомов $N({}^{4}S)$ по кинетической энергии. Для вычисления $q_{Nh}(h)$ используются: сечения взаимодействия, зависящие от энергии столкновения, для реакции (5) [85]; коэффициенты ветвления, описывающие вероятности образования атомов N в основном и возбужденных электронных состояниях; энергетический спектр высыпающихся электронов.

Описание взаимодействия надтепловых атомов с окружающим газом аналогично описанию взаимодействия высыпающихся электронов с атмосферой планеты: надтепловые атомы азота, образующиеся в реакции (5), теряют свою избыточную кинетическую энергию при столкновениях с другими атмосферными частицами и переносятся в переходной области течения газа между термосферой и экзосферой [111], [A4]. Стационарные функции распределения данных надтепловых атомов определяются из решения кинетического уравнения Больцмана (20) с исходной функцией источника (23):

$$\mathbf{v}\frac{\partial}{\partial \mathbf{r}}\mathbf{f}_{\mathrm{Nh}} + \mathbf{s}\frac{\partial}{\partial \mathbf{v}}\mathbf{f}_{\mathrm{Nh}} = \mathbf{Q}_{\mathrm{Nh}}(\mathbf{v}) + \sum_{\mathrm{m}=\mathrm{O}_{2},\mathrm{N}_{2},\mathrm{O}} \mathbf{J}(\mathbf{f}_{\mathrm{Nh}}, \mathbf{f}_{\mathrm{m}})$$
(24)

где $f_{Nh}(r,v)$ и $f_M(r,v)$ - функции распределения надтепловых атомов N и компонентов окружающего газа по скоростям v в точке пространства r, соответственно. Аналогично (20) левая часть уравнения (24) описывает перенос надтепловых атомов азота в исследуемой области атмосферы под воздействием гравитационного поля s планеты. В правой части, помимо источника N_{hot}(⁴S), находятся интегралы столкновений J для упругого и неупругого рассеяния N_{hot}(⁴S) при столкновениях с окружающим атмосферным газом, которые записываются в стандартной форме [108,111].

Предполагается, что распределение атмосферного газа по скоростям описывается распределением Максвелла (21).

Так же, как и в кинетической модели для высыпающихся электронов в данной модели рассматривается область атмосферы планеты земного типа (в данном случае - Земли) между высотами 80 и 700 км. Нижняя граница данной области находится в относительно плотной нижней термосфере, где надтепловые частицы быстро и локально теряют свою избыточную кинетическую энергию при столкновениях с тепловыми молекулами азота и кислорода. Верхняя граница расположена над экзобазой, где течение газа становится бесстолкновительным. Исследуемая область разделена на ячейки с сеткой высот, размер которых принимался ниже локального значения длины среднего свободного пробега. В каждой ячейке атмосферный газ представлен модельными частицами с заданными концентрациями и температурами. Модельные частицы рождаются в каждой ячейке в соответствии с функцией источника (23) надтепловых атомов азота, образующихся при диссоциации N₂ электронным ударом (5). Нижняя граница энергии надтепловых атомов N_{hot}(⁴S) устанавливается равной 0.3 эВ, в соответствии с энергетическим барьером реакции (4) [98].

Как и в модели для высыпающихся электронов, численное решение уравнения Больцмана (24) производится методом Монте-Карло.

Основным результатом разработанной модели являются стационарные функции распределения надтепловых атомов $N_{hot}(^{4}S)$ по энергии. На их основе вычисляются дифференциальные, с⁻¹ эВ⁻¹, и интегральные, с⁻¹, частоты нетеплового образования NO (8):

$$\frac{dk}{dE}(E) = v(E) \sigma(E) f_{Nh}(h, E)$$
(25)

$$r_{\rm Nh} = \int_0^\infty \frac{dk}{dE} (E) dE$$
 (26)

где v(E) – относительная скорость атомов $N_h(^4S)$, σ – сечение реакции (8), взятое из теоретических расчетов [98,112]. Вычисленные частоты реакции (8)

затем используются в качестве входных данных в модели химии нечетного азота. Скорость производства NO в реакции (8) вычисляется путем перемножения интегральной частоты реакции, r_{Nh}, на концентрацию молекул O₂.

2.1.4 Валидация модели образования NO на примере атмосферы Земли

Валидация разработанной модели химии нечетного азота (далее ANOD, Atmosphere Nitric Oxide Density) была проведена на примере верхней N_2 - O_2 доминантной атмосфере Земли. Расчеты концентрации NO производились для полярной области (широта 65°N и долгота 0°) на дату 21 сентября 1999 года. Показатели солнечной и геомагнитной активности на эту дату равны $F_{10.7}$ =160 и Ap=6. Ранее для данных условий уже были проведены вычисления концентрации NO в термосфере Земли [93]. Результаты расчетов с помощью модели [93] (далее BAILEY02) в целом хорошо согласуются с измерениями содержания NO спутником SNOE [9,79]. Поэтому сравнение с расчетами [93] является хорошей проверкой модели ANOD.

Основная задача расчетов заключалась в том, чтобы определить, может ли модель ANOD в среднем описывать высотное распределение концентрации NO (высоту максимума концентрации NO и абсолютное значение этого максимума) при высыпаниях электронов в земную атмосферу. В расчетах на верхней границе (700 км) для высыпающихся электронов было задано максвелловское распределение с заданной характеристической энергией, Е₀ = E_m/2 (E_m – средняя кинетическая энергия электронов). Также предполагалось изотропное распределение высыпающихся электронов ПО питч-углу относительно линий геомагнитного поля. Моделирование проводилось для нескольких случаев высыпания электронов в атмосферу. В первом случае характеристическая энергия электронов была задана равной Е₀ = 1 кэВ. Во втором случае предполагается более жесткий энергетический спектр авроральных электронов с характеристической энергией E₀=4 кэВ, что соответствует более высокому уровню геомагнитной активности. На верхней границе расчетной области был также задан поток энергии высыпающихся электронов, $Q_0 = 1$ эрг см⁻² с⁻¹, аналогично [93]. Указанные параметры были зафиксированы на всем временном интервале расчетов.

Высотные распределения основных нейтральных компонентов O_2 , N_2 , O и N, ионов NO⁺, O_2^+ , O⁺, N⁺, электронов и их температуры (Рисунок 5) были рассчитаны при помощи эмпирических моделей MSISE90 и IRI2016 для указанных ранее даты и координат.



Рисунок 5. (*Верхняя панель*): Высотные профили концентраций нейтралов O₂, N₂, O и N (сплошные линии), ионов O⁺, O₂⁺, NO⁺, N⁺ (штриховые линии) и электронов (штрих-пунктирные линии) в верхней атмосфере Земли. (*Нижняя панель*): Высотные распределения температур нейтралов (сплошная линия), ионов (штриховая линия) и электронов (штрих-пунктирная линия) в атмосфере Земли. Расчеты проведены для 21 сентября 1999 года, широты 65°N и долготы 0°.

На Рисунке 6 представлены рассчитанные с помощью модели КММК высотные распределения нисходящего (сплошные линии) и восходящего (штриховые линии) интегральных потоков энергии электронов, эрг см⁻² c^{-1} , для Е₀ = 1 кэВ (синие линии) и 4 кэВ (красные линии), соответственно. Вертикальной пунктирной линией на данном рисунке обозначена величина, Q0 = 1эрг см⁻² с⁻¹, заданная на верхней границе расчетной области. На основе разницы между восходящим и нисходящим потоками электронов можно определить, что в обоих случаях электроны довольно глубоко проникают в атмосферу, при этом основная область потери энергии электронов находится ниже 300 км. Так, на высоте 150 км поток обратного рассеяния термализованных электронов меньше потока высыпающихся электронов: в 7 раз при $E_0 = 4$ кэВ и в 16 раз при $E_0 = 1$ кэВ. Электроны с характеристической энергией 4 кэВ проникают атмосферу глубже, В чем те же с характеристической энергией 1 кэВ.



Рисунок 6. Высотные профили нисходящего (сплошные линии) и восходящего (штриховые линии) потока энергии авроральных электронов, высыпающихся в атмосферу с характеристическими энергиями $E_0 = 1$ кэВ (синие линии) и 4 кэВ (красные линии). Вертикальная пунктирная линия показывает поток энергии авроральных электронов на верхней границе $Q_0=1$ эрг см⁻² с⁻¹.

На Рисунке 7 сплошными линиями представлены вычисленные на основе (22) высотные распределения скоростей диссоциации, ионизации, диссоциативной ионизации N₂ (5 - 7) для случаев, когда характеристическая энергия высыпающихся электронов равна 1 и 4 кэВ.



Рисунок 7. Высотные профили скоростей диссоциации (сплошная линия), ионизации (штриховая линия) и диссоциативной ионизации (штрихпунктирная линия) N_2 (5-7) потоком авроральных электронов, высыпающихся с характеристической энергией $E_0 = 1$ кэВ (верхняя панель, синие линии) и 4 кэВ (нижняя панель, красные линии).

Из анализа данного рисунка следует, что с ростом E_0 увеличиваются пиковые значения скоростей реакций (5-7), и снижаются высоты, z_{max} , на которых достигаются эти значения. Высота z_{max} соответствуют наибольшей потере энергии высыпающихся электронов (см., Рисунок 6). Для случая с $E_0 =$ 4 кэВ z_{max} достигает 102.5 км, для случая с $E_0 = 1$ кэВ максимум находится в районе 120.5 км для реакций (6-7) и на уровне 130 км для реакции (5). В работе ([93], Рисунок 4) представлены результаты аналогичных расчетов только для процесса прямой ионизации N₂ (6). Высота z_{max} на Рисунке 7 хорошо совпадает с результатами [93]. Сами значения скоростей прямой ионизации N₂ при этом отличаются от [93] примерно в 2 раза при E₀ = 4 кэB, и в 10 раз при E₀ = 1 кэB.

Скорости процессов (5-7), представленные на Рисунке 7, были добавлены в качестве входных данных в модель ANOD (реакции P1–P19 в Таблице 2) для расчета теплового образования NO в полярных областях земной атмосферы. Результаты данных расчетов – высотные профили объемных концентраций NO представлены на Рисунке 8 (сплошные линии). Пунктирной линией на данных рисунках показаны результаты расчетов [93] для того же события, которые в среднем соответствуют результатам наблюдений молекулы NO на спутнике **SNOE** [9,79,93]. Крестиками на Рисунке представлены измерения концентрации NO спутником SNOE для широты 65°N, усредненные за 1 день 21.09.1999. Относительная ошибка измерений концентрации составляет около 20% [9,97,113].

Из сравнения расчетов, проведенных с помощью моделей ANOD и BAILEY02, следует довольно хорошее согласие в значениях высот, на которых достигается максимум содержания NO (в пределах 7 %). При этом имеются различия в пиковых значениях концентрации NO между двумя моделями:

• при $E_0 = 1$ кэВ, максимум концентрации NO в модели ANOD составляет 2.4×10⁸ см⁻³ на высоте 112.5 км. В модели BAILEY02 - 1×10⁸ см⁻³ на высоте 119.5 км;

• при $E_0 = 4$ кэВ, максимум концентрации NO в модели ANOD составляет 2.8×10⁸ см⁻³ на высоте 98.5 км. В модели BAILEY02 - 1.8×10⁸ см⁻³ на высоте 106.5 км.



Рисунок 8. Высотные распределения объемной концентрации NO для 21 сентября 1999 года, широты 65°N и долготы 0, полученные на основе модели ANOD (сплошные линии), модели BAILEY02 (штриховые линии), наблюдений спутника SNOE (крестики). Модельные распределения NO соответствуют электронным высыпаниям с характеристической энергией E₀=1 кэВ (верхняя панель, синие кривые) и 4 кэВ (нижняя панель, красные кривые).

Данные отличия обусловлены:

• разными значениями скоростей прямой ионизации N₂ электронным ударом (см., Раздел 3.2);

отсутствием реакции диссоциативной ионизации N₂ в модели BAILEY02 (см. [81,93]);

• разными значениями сечений реакции диссоциации N₂ электронным ударом. В данной работе использовались значения из работ [102,103]. В работах [81,93] сечения данной реакции были взяты из более ранних работ [114,115];

• Еще одно отличие рассматриваемых моделей, которое связано с положением максимумов концентрации NO, заключается в отличии используемых коэффициентов молекулярной и турбулентной диффузии. Так, в работах [102,103] используются значения коэффициентов молекулярной диффузии, рассчитанные согласно [116], а коэффициенты турбулентной диффузии принимаются равными 1×10⁶ см²/с в интервале высот 100 – 200 км. В модели ANOD, как отмечалось ранее, используются коэффициенты молекулярной и турбулентной диффузии, рассчитанные согласно [63,64,99]. Таким образом, в интервале высот 100 – 200 км, значения коэффициента турбулентной диффузии между моделями различается в 3 – 10 раз, а значения коэффициента молекулярной диффузии отличаются в среднем в 1.5 раза.

Проведем сравнение результатов моделирования концентрации NO с измерениями спутника SNOE:

- При E₀ = 1 кэВ (верхняя панель на Рисунке 8) модельное распределение концентрации NO на высотах до максимума, 112.5 км, хорошо совпадает с наблюдениями. Положение максимума NO, полученное из наблюдений, 110 км, на 2.5 км ниже, чем в модели. Различие в пиковой концентрации NO составляет 12%, что находится в пределах ошибки измерений. На бо́льших высотах расхождение увеличивается вплоть до 50 % на 150 км. Лучевая концентрация вдоль вертикального луча зрения (параметр, который важен при дальнейшем расчете излучения NO в атмосфере) различается на 28% между наблюдаемым и модельным значениями.
- При E₀ = 4 кэВ (нижняя панель на Рисунке 8), наоборот, модель плохо описывает наблюдения в районе пика концентрации NO. Положение

максимума содержания NO различается на 11.5 км. Различие в пиковой концентрации NO составляет 25%. Однако, на бо́льших высотах различия в содержании NO находится в пределах ошибки измерений, 20%. Отметим, что наклон распределения концентрации NO выше пикового значения полностью определяется скоростью процессов (5-7): при $E_0 = 4$ кэВ этот наклон более пологий, чем при $E_0 = 1$ кэВ (см. Рисунок 7). Различие в вертикальной лучевой концентрация NO между моделью и наблюдениями составляет 40 %, т.е. больше, чем при $E_0 = 1$ кэВ.

Как известно [84,93,97], значение пикового содержания NO в полярной области земной атмосферы определяется потоком энергии высыпающихся электронов Q₀. Наблюдаемая концентрация NO в максимуме, в свою очередь, хорошо описывается моделью как при $E_0 = 1$ кэB, так и при $E_0 = 4$ кэB. Из этого следует, что значение потока энергии электронов, Q₀ = 1 эрг см⁻² с⁻¹, заданное на верхней границе модели может соответствовать реальным значениям на 20-21.09.1999.

Химическое моделирование [93] также показывает, что положение максимума концентрации NO зависит от средней кинетической энергии высыпающихся электронов. Наблюдаемые на Рисунке 8 различия в положении максимума содержания NO и в поведении концентрации NO до и после этого максимума (при $E_0 = 1$ и 4 кэВ) позволяют предположить, что характеристическая энергия электронов для рассматриваемого события находится в интервале 1 кэВ < $E_0 < 4$ кэВ.

Анализ результатов проведенных вычислений для полярных областей верхней атмосферы Земли показывает, что электронные высыпания в данных областях определяют тепловое образование NO. Так, с ростом характеристической энергии высыпающихся электронов, высота максимума объемной концентрации NO снижается, что обусловлено более глубоким проникновением электронов в атмосферу (см., Рисунок 6), и бо́льшими скоростями диссоциации (5), прямой (6) и диссоциативной (7) ионизации N₂

на более низких высотах (Рисунок 7). Стоит отметить, что несоответствие высот максимумов скоростей указанных реакций (Рисунок 7) высотам пиков концентрации NO связано с вертикальным потоком, создаваемым молекулярной и турбулентной диффузией. Абсолютные значения объемной концентрации NO, в свою очередь, меняются всего в 1.2 раза при увеличении характеристической энергии высыпающихся электронов с 1 до 4 кэВ.

2.2 Построение спектров излучения и пропускания NO в верхних N₂-O₂ атмосферах планет

Основной задачей данной работы является определение возможности регистрации спектральных γ-полос молекулы NO в атмосферах экзопланет с помощью КТ Спектр-УФ. Для решения этой задачи в работе рассматриваются возможного обнаружения сигнала: 1. Трансмиссионная два метода спектроскопия – регистрация пропускания света родительской звезды, проходящего через атмосферу экзопланеты; 2. Эмиссионная спектроскопия – регистрация резонансного пере-излучения света родительской звезды в спектральных линиях молекулы NO. Оба этих метода основаны на измерении разности потоков от родительской звезды во время, F_{in}, первичного транзита (в первом случае, Рисунок 9а) / вторичного затмения (во втором случае, Рисунок 96) и вне его, F_{out}. Модель определения сигнала к шуму, S/N, необходимого для обнаружения NO указанными методами представлена в Разделе 2.3. В данном же Разделе представлены модели излучения и пропускания света в у-полосах окиси азота в верхней N₂-O₂ атмосфере.

2.2.1 Модель излучения NO

Методики расчета излучения NO в γ-полосах окиси азота были разработаны ранее в ряде работ [13,14,68,117,118] в целях обработки результатов наблюдения этой молекулы в верхней атмосфере Земли. Модель излучения NO, построенная в данной работе, основана на данных методиках.



Рисунок 9. Общая схема исследования атмосфер экзопланет методами а) трансмиссионной и б) эмиссионной спектроскопии.

Как отмечалось ранее, система электронно-колебательно-вращательных NO ү-полос является результатом электронного перехода между возбужденным $A^2\Sigma^+$ и основным $X^2\Pi$ состояниями. Каждая электронноколебательная полоса состоит из 12-ти отдельных ветвей, каждая из которых, в свою очередь, состоит из 80-ти вращательных линий (согласно базе данных LIFBASE [119]). Кроме того, основное состояние²¹ Х²П ввиду наличия спин орбитального взаимодействия состоит из двух суб-состояний X²П_{1/2} и X²П_{3/2}. Также ввиду существования двух возможных ориентаций электронного углового момента вращения (Л-дублет) каждое из этих суб-состояний расщепляется еще на два.

В оптически тонком случае интенсивность изотропного излучения NO (вызванное пере-излучением света звезды) в полосе вдоль луча зрения, проинтегрированная по длине волны и детектируемая с помощью измерительного прибора, может быть определена как [68,120]:

$$4\pi \mathbf{I} = \mathbf{g}_{\mathbf{v}'\mathbf{v}''}\mathbf{N},\tag{27}$$

²¹ Квантовое число Λ проекции Λ орбитального момента L электронной оболочки на электрическую ось молекулы, Λ =1; Квантовое число Σ проекции Σ спинового момента S электронной оболочки на электрическую ось молекулы, Σ =±1/2; Полный спин электронной оболочки, S=1/2. Квантовое число Ω , определяющее модуль вектора $\Omega = |\Lambda + \Sigma|$, принимает два значения, $\Omega = |\Lambda \pm \Sigma| = 1/2$, 3/2.

где N – лучевая концентрация излучающей молекулы в см⁻², $g_{\nu\nu\nu'}$ - g-фактор [68] для колебательной полосы, который характеризует количество фотонов, рассеянных в секунду на молекулу, фотон/с/молекула. g-фактор для каждой колебательной полосы определяется суммированием g-факторов, $g_{J'J''}$, для всех вращательных линий и ветвей в этой полосе [13,14,117]. Величина $g_{J'J''}$ определяется следующим образом [13,14,121]:

$$g_{J'J''} = \frac{S(J'J'')}{2J'+1} \omega_{\nu'\nu''} \sum_{J} \left\{ \frac{\pi e^2}{mc^2} \lambda_{JJ'}^2 \pi F_{JJ'} f_{\nu'\nu} \frac{S(JJ')}{2J+1} \cdot \frac{N_J}{N_0} \right\}$$
(28)

где v – колебательное квантовое число; J – вращательное квантовое число; S – факторы Хенля-Лондона для вращательного перехода, значения которых для NO взяты из базы данных LIFBASE [119]; $\lambda_{JJ'}^2$ – длина волны поглощения ультрафиолетового фотона в Å; $\pi F_{JJ'}$ – поток VФ излучения звезды на данной длине волны в $\frac{\phi \text{отоны}}{\text{ссм}^2 \cdot \text{Å}}$; $\frac{\pi e^2}{\text{mc}^2} = 8.829 \times 10^{-21} \frac{\text{см}^2}{\text{Å}}$; $f_{v'v}$ – сила осциллятора, взятая из работ [122,123]. Величина $\omega_{v'v''}$ – альбедо однократного рассеяния, характеризует вероятность того, что в результате колебательного перехода будет испущен квант энергии. Значения $\omega_{v'v''}$, используемые в данной работе, были взяты из [118].

Обозначения без апострофа в выражении (28) относятся к основному состоянию молекулы перед поглощением света, один апостроф соответствует возбужденному состоянию, и два апострофа соответствуют основному состоянию после переизлучения.

Для вычисления коэффициента $g_{J'J''}$, используя выражение (28), первоначально, необходимо определить отношение заселенностей уровней, $\frac{N_J}{N_0}$. Как отмечалось ранее, основной механизм возбуждения NO в $A^2\Sigma^+$ состояние в верхней атмосфере Земли – поглощение солнечных фотонов, а время жизни NO в этом состоянии мало и составляет около 200 нс. Можно предположить [13,14], что большинство молекул NO в термосфере планеты находятся на нижнем колебательном уровне v = 0 основного состояния X²П. Кроме того, время жизни NO в верхней атмосфере составляет около суток или более [93], а время между столкновениями с другими частицами составляет десятки секунд [13]. Поэтому можно считать, что основное состояние NO находится в термодинамическом равновесии с окружающим атмосферным газом [13]. Выражение для отношения заселенностей электронно-колебательныхвращательных уровней NO представлено в [13,14] на основе уравнений [124] для гундовского типа а молекулярных термов:

$$\frac{N_{J}}{N_{0}} = \frac{\phi \cdot (2J+1) \cdot \exp\left[-\frac{hc}{kT}[F(J) + A\Lambda\Sigma]\right]}{\sum_{\Sigma=-S}^{S} \exp\left(-\frac{hc}{kT}A\Lambda\Sigma\right)\sum_{J=|\Lambda+\Sigma|}^{\infty}(2J+1)\exp\left(-\frac{hc}{kT}F(J)\right)}$$
(29)

 $\phi = 1/2$ для гетероядерной молекулы [124]; А ≈ 123 [13]; член в знаменателе $\sum_{\Sigma=-S}^{S} \exp\left(-\frac{hc}{kT}A\Lambda\Sigma\right)$ может быть аппроксимирован выражением 2S+1 [13,14]. Аналог формулы (29) можно найти в [125]. Его применение в расчетах привело к тем же результатам, что и с использованием (29).

Энергии вращательных уровней, F(J), для двух основных суб-состояний $X^2\Pi_{1/2}$ и $X^2\Pi_{3/2}$ NO были вычислены на основе выражений из [13,14] с учетом поправки на случай Λ -дублета из работы ([126], выражение 7). Выражения для вычисления молекулярных констант Bv, Dv, Y = $A\nu/B\nu$ для каждого колебательного уровня были взяты из работ [13,126,127]. Из этих же работ были взяты выражения для вычисления энергий вращательных уровней для состояния $A^2\Sigma^+$.

В целях валидации построенной модели на основе выражения (28) были вычислены значения g-факторов для наиболее интенсивных γ-полос в атмосфере Земли (см. Раздел 1.2) в предположении оптически тонкого случая излучения. И проведено сравнение с результатами моделей [13,14,67,68,117,118], которые использовались для интерпретации УФ наблюдений NO в земной термосфере. В расчетах использовался поток солнечного излучения из базы данных MODTRAN [128]. Результаты проведенных вычислений для температуры 200 К представлены в Таблице 1. Также показана доля интенсивности излучения в каждой колебательной ү-полосе относительно всей системы ү-полос.

Из проведенного сравнения следует довольно хорошее соответствие полученных результатов результатам моделирования [13,14,67,68,118]. Относительная ошибка определения g-фактора не превышает 25% для большинства колебательных γ-полос. Исключение касается γ-полосы (2,0), для которой ошибка определения g-фактора >25%. Расхождения в результатах моделирования могут быть связаны с: а) различными солнечными спектрами, используемыми в разных работах; б) различной структурой вращательных уровней; в) поправками, вносимыми в выражение для энергий вращательных уровней; г) различными значениями сил осцилляторов и альбедо однократного рассеяния.

,	1	\mathcal{L}	, 1 1 ,	1		1 1	
NO полоса	λ_c , нм	Данная работа	[13,67,68]	[117]	[118]	[14]	Доля излучения, %
(0,0)	226.2	2.524	2.58	1.744	2.724	1.92ª	15.61
(0,1)	236.3	3.251	3.59	3.173	3.773	-	20.11
(1,0)	215.0	5.779	6.36	3.931	7.678	6.77 ^a	35.74
(1,1)	223.9	2.398	2.08	1.305	2.094	-	14.83
(2,0)	204.7	0.861	2.02	0.962	2.043	-	4.70
(2,2)	221.6	1.179	-	-	0.859	-	7.29
(3,1)	203.0	0.279	0.293	0.0539	0.299	-	1.73

Таблица 3. Сравнение g-факторов, 10⁻⁶ фотон/с/молек. при температуре 200 К

^аДля расчетов используется спектр Солнца из работы [129]. В [14] были проведены расчеты и для солнечных спектров из других работ.

Как можно заметить, колебательная (1,0) γ-полоса NO является наиболее яркой в системе резонансных γ-полос. Однако в данной полосе, согласно [13] и [118], как и в других колебательных γ-полосах [14], при высоком содержании NO может иметь место эффект самопоглощения. То есть длины волн испускаемых фотонов совпадают с длинами волн фотонов, необходимых для начального возбуждения молекулы. Учет данного эффекта важен для достоверной интерпретации наблюдений [13]. Чтобы учесть самопоглощение в резонансных γ-полосах NO (далее учет данного эффекта будем называть вычислениями для оптически толстого случая излучения), g-факторы, g_J, g_J, для всех вращательных линий и ветвей в колебательном переходе умножаются на интеграл Хольштейна [13,130]:

$$g_{J'J''}^{\text{thick}} = g_{J'J''}^{\text{thin}} \cdot T(\tau_{J'J''}), \qquad (30)$$

где $g_{J'J''}^{thin}$ – g-фактор, вычисленный с помощью выражения (28), $T(\tau_{J'J''})$ – интеграл Хольштейна [130], записанный для спектральной линии, обладающей только допплеровским уширением, с оптической толщей $\tau_{J'J''}^{0} = \sigma_{J'I''}^{0} \cdot N_{J}$ в центре линии на длине волны $\lambda_{J'J''}$

$$\Gamma(\tau_{J'J''}) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left[-y^2 - \tau_{J'J''}^0 \exp\left(-y^2\right)\right] dy$$
(31)

, где у = $\frac{\lambda - \lambda_{J'J''}}{\sigma_D \sqrt{2}}$, и $\sigma_D = \frac{\lambda_{J'J''}}{c} \sqrt{\frac{kT}{m}}$ – параметры допплеровского профиля. Как

будет рассмотрено далее, предположение о допплеровском профиле уширения линии вполне допустимо для рассматриваемых высот в атмосфере, так как эффекты уширения давлением слабы на данных высотах. Сечение поглощения для вращательного перехода в центре линии согласно [13,14]:

$$\sigma_{J'J''} = \frac{\pi e^2}{mc^2} f_{\nu'0} \frac{S(J'J'')}{2J'+1} \frac{\lambda^2_{J'J}}{\Delta\lambda_D \sqrt{\pi}}$$
(32)

, где $\Delta\lambda_D = \frac{2\lambda_{J\prime J}}{c} \sqrt{\frac{2kTln2}{m}}$ – ширина допплеровского профиля, Å.

Результаты вычислений интенсивности излучения окиси азота в резонансной (1,0) γ -полосе для оптически толстого случая при различных температурах (150 К – 400 К) и лучевых концентрациях NO (10¹⁵ см⁻² – 10¹⁷ см⁻²) в верхней атмосфере представлены на рисунке 10.

Данный рисунок показывает влияние самопоглощения на видимую интенсивность излучения вдоль луча зрения в кило-Рэлеях (кР, 1 Р = 10^6 фотон

см⁻² с⁻¹) в сравнении с излучением в оптически тонком случае (пунктирная кривая). Как можно заметить, значительное отличие между оптически толстым и тонким случаями излучения начинается при лучевой концентрации окиси азота, большей чем 10¹⁶ см⁻².



Рисунок 10. Зависимость интенсивности излучения в резонансной (1,0) γполосе от лучевой концентрации NO при температурах 150-400 К с учетом (сплошные линии) и без учета (пунктирные линии) эффекта самопоглощения.

Полученные результаты для оптически толстого случая излучения хорошо согласуются в пределах 13 - 25 % (в зависимости от температуры) с моделью [13] (см. Рисунок 7 в [13]), которая использовалась для интерпретации спутниковых наблюдений NO в земной термосфере. Ошибка определения интенсивности излучения NO в γ -полосах с помощью разработанной модели может при этом достигать 15%, если относительная погрешность радиационных параметров (f, S, ω) в выражении (28) находится в пределах 5%. С такой погрешностью, 5%, например, определены силы осциллятора [121].

Представленные на Рисунке 10 результаты впоследствии используются для расчета S/N необходимого для регистрации γ-полос методом эмиссионной спектроскопии.

Стоит отметить, что γ-полосы NO могут потенциально блендироваться спектральными полосами Шумана-Рунге (<205 нм) и Герцберга I (>230 нм) О₂ и полосами Хартли О₃ (>210 нм). В данной работе рассматривается излучение NO в γ-полосах, детектируемое на высотах атмосферы >80 км. Расчет оптической толщи τ₀₂ на данных высотах с использованием концентрации O₂ из модели NRLMSIS2.0 [131] и сечения поглощения из [66] показал, что τ_{02} < 10⁻⁴ (рассматривается вертикальный луч зрения). Из-за малой концентрации О₃ на рассматриваемых высотах, оптическая толща $\tau_{O3} \ll 1$. Поэтому поглощение O₂ и O₃ не учитывалось при решении рассматриваемой задачи. Еще один эффект, потенциально влияющий на точность модели, – многократное рассеяние света в у-полосах NO. Однако, согласно [118] и [14], этот эффект вносит всего 3% в наблюдаемое излучение NO на высоте 100 км земной атмосферы. С уменьшением высоты, <60 км, тем не менее, происходит довольно сильное снижение интенсивности излучения NO в у-полосах за счет двух эффектов ([14], Рисунок 5): а) приходящий поток солнечного излучения, πF (28), снижается за счет поглощения озоном; б) увеличивается эффективность столкновительный дезактивации возбужденного $A^2\Sigma^+$ уровня NO при взаимодействии этой молекулы с О₂.

2.2.2 Модель пропускания света в N₂-O₂ атмосфере

Чтобы определить возможность обнаружения NO на экзопланете методом трансмиссионной спектроскопии первоначально необходимо построить модель пропускания света родительской звезды в атмосфере этой планеты. Основным результатом данной модели является зависимость эффективной высоты атмосферы от длины волны, которая определяет разницу между геометрической глубиной транзита (без учета атмосферы) и реальной глубиной транзита (с учетом атмосферы) [15,40]:

$$h_{eff}(\lambda) = \int_{z_1}^{z_2} \left(1 - e^{\left(-\tau(\lambda)\right)}\right) dz$$
(33)

где $\tau(\lambda) = \int \alpha(\lambda) dz$ – оптическая толща; $\alpha(\lambda) = \sum_m \sigma_m(\lambda) * N_m$ – коэффициент поглощения, см⁻¹; $\sigma_m(\lambda)$ – сечение поглощения молекулы m, см²; N_m – концентрация молекулы m в атмосфере, см⁻³. Зная эффективную высоту, можно определить вклад атмосферы экзопланеты в глубину транзита $f_A = (F_{out} - F_{in})/F_{out}$, который определяется следующим выражением [15,40]:

$$f_{A_{atm}} = \frac{\left(R_{pl} + h_{eff}(\lambda)\right)^{2}}{R_{st}^{2}} - \frac{R_{pl}^{2}}{R_{st}^{2}}$$
(34)

где R_{pl} и R_{st} – радиусы экзопланеты и родительской звезды, соответственно; $\frac{R_{pl}^2}{R_{st}^2} = C_T$ – геометрическая глубина транзита; величина $h_{eff}(\lambda)$ в этом выражении является сверткой с разрешением спектрографа. Для пояснения представленного выражения на Рисунке 11 наглядно показаны вклады планеты и атмосферы в формирование глубины транзита.



Рисунок 11. Пояснительный рисунок к выражению (34) – глубина первичного транзита.

расчетов коэффициента Для поглощения, оптической толщи И эффективной высоты атмосферы планеты в работе была модифицирована lineby-line модель переноса излучения Py4CAtS [12], которая является Pythonверсией модели GARLIC [132,133] и обычно применяется для инфракрасной области спектра. Модификация модели заключалась в обновлении базы данных сечений поглощения для интересующего нас спектрального диапазона (180-250 нм). Так, аналогично работе [37], в которой рассчитывался трансмиссионный спектр Земли, были добавлены сечения поглощения следующих молекул: O₂, O₃, N₂O, NO₂, SO₂ (см. информацию в Таблице 4). Экспериментальные значения сечений поглощения N₂O, NO₂, SO₂ были взяты из базы данных MPI-Mainz UV/VIS Spectral Atlas²² [134] - источники [135-137], соответственно. Сечения поглощения О₂ в континууме фотодиссоциации и О₃ в системе полос Хартли были взяты из работы [66]. Как и в работах [37,66] для молекул O₃, N₂O, NO₂, SO₂ использовались уже измеренные сечения поглощения для конкретного значения температуры: 298 К – для O₃ и NO₂; 302 К – для N₂O; 295 К – для SO₂.

Расчет сечений поглощения O₂ в системе полос Шумана-Рунге и системе полос Герцберга I производятся в модели Ру4Cats на основе выражения:

$$\sigma(\lambda) = S(T)g(\lambda, p, T)$$
(35)

где g(λ , p, T) – профиль спектральной линии; S(T) – сила спектральной линии. В данной работе используются значения S, взятые из базы данных HITRAN2020²³ [138] для температуры 296 К и давления 1013.25 мбар. Так как O₂ распространен в верхней атмосфере, а значение температуры довольно сильно меняется с высотой (достигая ~1000-2000 К в верхней атмосфере Земли и потенциально больших температур в атмосферах экзопланет, см. далее), важно учитывать температурную зависимость для силы спектральных линий

²² URL: <u>https://www.uv-vis-spectral-atlas-mainz.org/uvvis/</u> (дата обращения: 20.01.2025)

²³ URL: <u>https://hitran.org/</u> (дата обращения: 20.01.2025)

O₂. С этой целю в модели Py4Cats используется температурная зависимость S = f(T) из ([12], выражение (2)).

Основным отличием данной работы от [37] является то, что расчеты проводились также для γ-полос NO. Аналогично модели излучения NO данные вычисления были сделаны для (0,0), (1,0), (1,1), (2,0), (2,2), (3,1) колебательных γ-полос. Сечения поглощения в данных полосах для каждого атмосферного слоя были вычислены аналогично работе [125]. Факторы Хенля-Лондона, силы осцилляторов были взяты из [119,122,123] аналогично модели излучения. Населенности электро-колебательно-вращательных уровней NO рассчитывались согласно выражению (29).

Для описания профилей спектральных линий молекул NO (γ-полосы) и O₂ (полосы Шумана-Рунге и Герцберга I) использовалась функция Фойгта, которая представляет собой свертку профилей Лоренца, g_L, и Допплера, g_D, [12]:

$$g_{V} = g_{L} \otimes g_{D} = \int_{-\infty}^{\infty} g_{L} \times g_{D} d\lambda'$$

$$g_{L}(\lambda) = \frac{\gamma_{L}/\pi}{\left(\lambda - \hat{\lambda}\right)^{2} + \gamma_{L}^{2}}$$

$$g_{D}(\lambda) = \frac{1}{\gamma_{D}} \left(\frac{\ln 2}{\pi}\right)^{1/2} \exp\left[-\ln 2\left(\frac{\lambda - \hat{\lambda}}{\gamma_{D}}\right)^{2}\right]$$
(36)

где $\gamma_L = \gamma_L^{air} \frac{p}{p_0} \left(\frac{T_0}{T}\right)^n u \gamma_D = \lambda \sqrt{\frac{2 \ln 2 k T}{mc^2}}$ - полуширины спектральной линии на полувысоте, HWHM [12]; γ_L^{air} – коэффициент уширения спектральной линии в случае столкновения молекулы с окружающими частицами; n – показатель степени, характеризует температурную зависимость полуширины линии; p_0 и T_0 – давление и температура, при которых были определены коэффициенты γ_L^{air} .

Таким образом, учитывалось уширение рассматриваемых спектральных линий за счет эффектов давления (столкновение поглощающих молекул с

молекулами окружающего атмосферного газа при давлении смеси р) и температуры (допплеровское уширение спектральных линий за счет теплового движения молекул) в разных слоях атмосферы планеты. Так как давление в атмосфере планеты экспоненциально уменьшается с увеличением высоты, основной вклад в уширение спектральных линий в диапазоне рассматриваемых высот ($z \ge 15$ км) вносит допплеровское уширение за счет теплового движения молекул.

Чтобы учесть уширение рассматриваемых спектральных линий давлением, важно знать коэффициент уширения данной линии в случае столкновения молекулы с окружающими частицами, γ_L^{air} . Значения коэффициента уширения γ_L^{air} и показателя степени n для молекулы O_2 были взяты из базы данных HITRAN2020 [138]. Для колебательной (0,0) у-полосы NO данные параметры, соответствующие столкновениям данной молекулы с N₂ и O₂, были взяты из работы [125]. Как и в [125] мы предположили аналогичные параметры уширения давлением и для других колебательных уполос NO, рассматриваемых в работе. Важно отметить, что эффект уширения за счет столкновения поглощающих молекул между собой, не учитывается в модели Py4CatS [12]. Рассмотрение данного эффекта является предметом дальнейшей работы.

В модель также были добавлены сечения рэлеевского рассеяния для воздуха, основными составляющими которого для атмосферы Земли являются молекулы N₂, O₂, CO₂, Ar (процентное содержание \approx 99.999 % [37]). Рэлеевское рассеяние представляет собой упругое рассеяние на частицах, когда длина волны рассеянного света много больше размера частицы ($\frac{2\pi a}{\lambda} \ll 1$, а – радиус сферической частицы). Сечение рэлеевского рассеяния обратно пропорционально длине волны в четвертой степени [139]: $\sigma_{\rm R} = \frac{32 \pi^3}{3 N^2 \lambda^4} F_{\rm k} (n - 1)^2$, где N – постоянная Лошмидта; λ – длина волны; F_k – корректировочный коэффициент Кинга; (n - 1) – коэффициент рефракции. Поэтому важно учитывать данный процесс при расчетах для ультрафиолетовой области спектра. Сечения рэлеевского рассеяния для воздуха в диапазоне длин волн 200 – 250 нм были взяты из работы [139]. Для спектрального диапазона (180 – 200) нм данные сечения были экстраполированы с учетом зависимости от длины волны ($\sigma_R \sim \lambda^{-4}$). Согласно работе [37] в рассматриваемом диапазоне длин волн основной вклад в формирование эффективной высоты земной атмосферы вносит поглощение света в системе полос Шумана-Рунге O₂ (см. Рисунок 1 в [37]. Вклад рэлеевского рассеяния в этом диапазоне значительно меньше и сравним с поглощением света озоном.

Таблица 4. Экспериментальные значения сечений поглощения и рассеяния и расчетные данные, используемые в работе для их вычисления. Рассматривается спектральный диапазон 180 – 250 нм.

Молекулы	Используемые ланные	Источник	
0	λ, S, γ _{air} – для полос Шумана- Рунге, Герцберга I при T = 296 К	HITRAN2020 [138]	
	σ(λ) – для континуума фото- диссоциации	[66]	
O ₃	σ(λ) при Т = 298 К	[66,134]	
N ₂ O	σ(λ) при Т = 302 К	[134,135]	
NO ₂	σ(λ) при Т = 298 К	[134,136]	
SO ₂	σ(λ) при Т 295 К	[134,137]	
NO	λ, S	LIFBASE [119]	
NO	f	[122,123]	
N ₂ , O ₂ , CO ₂ , Ar	$\sigma_{R}(\lambda)$	[139]	

На Рисунке 12 представлены значения сечений поглощения и рассеяния для атомов и молекул, рассматриваемых в работе, вычисленные в модели с разрешением $\Delta\lambda \approx 10^{-5}$ нм. Сечения поглощения для O₂ и NO рассчитаны для температуры 288 К и давления 1013.25 мбар (1 атм). Из Рисунка следует, что сечения поглощения $\sigma(\lambda)$ для γ -полос NO являются наибольшими среди рассматриваемых спектральных признаков. Эти значения хорошо соответствуют значениям $\sigma(\lambda)$ в работе ([140], Рисунок 1). Сравнимые с NO по порядку величины значения $\sigma(\lambda)$ достигаются в полосах следующих молекул: O₃ на длинах волн >215 нм; SO₂ на длинах волн <220 нм; O₂ на длинах волн <190 нм. На высотах атмосферы >80 км, где концентрациями O₃ и SO₂ можно пренебречь, γ -полосы NO, таким образом, могут быть свободны от блендирования данными молекулами.



Рисунок 12. Сечения поглощения и рассеяния для атомов и молекул, рассматриваемых в работе (см. Таблицу 4). Значения $\sigma(\lambda)$ для O₂ и NO вычислены для T = 288 K и p = 1013.25 мбар. На Ри

Валидация построенной модели была проведена на примере N_2 - O_2 атмосферы планеты земного типа. Для этого использовались усредненные распределения объемной концентрации представленных молекул в земной атмосфере. Диапазон рассматриваемых высот составлял 15 - 500 км, с шагом 5 км. Нижний предел $z_1 = 15$ км обусловлен тем, что лучи проходящие через более глубокие слои атмосферы ввиду высокой концентрации молекул и увеличения коэффициента преломления будут недоступны для наблюдателя,

если родительской звездой планеты является звезда солнечного типа [37,141]. В работе [37] были вычислены такие предельные высоты для УФ (14.7 км при $\lambda = 115$ нм, 13.9 км при $\lambda = 198$ нм), видимого (13 км при $\lambda = 400$ нм) и ближнего ИК (12.8 км при $\lambda = 1000$ нм) диапазонов. Высотные профили температуры и давления были взяты из модели [142]. Для молекул O₃, N₂O, NO₂, SO₂ (< 120 км) использовались распределения концентрации по высоте из [61], заданные в модели Ру4CAts. Выше 120 км концентрация данных молекул мала и не влияет на результаты расчета. Изменение этой концентрации с высотой (при z >120 км) описывалось в предположении гидростатического равновесия (что вполне допустимо для земной атмосферы). Для O₂, N₂ высотные профили были взяты из модели [131]. Для молекулы NO данные для высот < 95 км взяты также из [61]. Для высот ≥ 95 км использовались значения объемной концентрации NO из наблюдений спутника SNOE [9] при высокой геомагнитной активности, Ap > 12. Заданные распределения концентраций рассматриваемых молекул представлены на Рисунке 13.



Рисунок 13. Высотные распределения концентрации молекул, используемые в работе при валидации модели пропускания на примере земной атмосфере.

На Рисунке 14 представлен результат расчетов эффективной высоты земной атмосферы (33) в спектральном диапазоне 180 – 250 нм. Для сравнения штриховыми линиями показан результат работы [37], который для наглядности сглажен фильтром Савицкого-Голея с окном 100 и порядком полинома 1. В среднем отклонение между двумя моделями в континууме составляет 25 % (heff в модели [37] в среднем на 10-15 км больше, чем в разработанной модели.



Рисунок 14. Эффективная высота земной атмосферы в спектральном диапазоне 180 – 250 нм с разрешением $\Delta\lambda \approx 10^{-5}$ нм (сплошная синяя кривая). Штриховыми красными кривыми показаны значения h_{eff} из работы [37], полученные при $\Delta\lambda \approx 0.0017$ нм. Для наглядности результат [37] сглажен фильтром Савицкого-Голея с окном 100 и порядком полинома 1.

Основные различия в значениях heff связаны с:

а) Разными значениями σ(λ) для O₂. В [37] σ₀₂ были заданы согласно экспериментальным данным для температур T = 298 – 303 K, их зависимость от температуры не учитывалась. В данной работе зависимость от T учитывается.
Характерное различие в $\sigma(\lambda)$ наблюдается также в области образования полос Герцберга I О₂ на длинах волн >240 нм (см. Рисунок 14 и для сравнения Рисунок 1 в [37]). Оно связано с различным разрешением в данных по $\sigma(\lambda)$: в нашей работе используются данные высокого разрешения из HITRAN2020 [138], в работе [37] используются данные низкого разрешения из [143];

 б) Разными высотными профилями температуры, давления, концентраций рассматриваемых молекул, которые были взяты из разных источников.

Важно отметить, что в работе [37] рассматривались молекулы, поглощающие излучение только в широком диапазоне длин волн. Атомы и молекулы с более узкими спектральными линиями, (например, молекула NO, некоторые атомы и ионы) не были предметом работы [37].

Как и в [37] до 200 нм доминирующую роль в поглощении света занимает молекулярный кислород (система полос Шумана-Рунге). Меньший вклад в формирование эффективной высоты в данном спектральном диапазоне (< 200 нм) дает рэлеевское рассеяние и поглощение молекул N₂O, NO₂, SO₂. С другой стороны спектрального диапазона минимум поглощения света озоном O₃ в полосах Хартли достигается на 210 нм [66]. Таким образом, в диапазоне образования γ -полос NO находится своеобразное окно, где при высоком содержании NO в верхней атмосфере данные полосы могут выделяться на фоне полос O₂ и O₃ и практически не блендироваться.

2.3 Модель расчета S/N для обнаружения NO с помощью КТ Спектр-УФ

При планировании эксперимента важно определить возможность его реализации. Для этого обычно рассчитывают: а) отношение сигнала к шуму, S/N, необходимое для регистрации спектральной линии при фиксированном времени наблюдении; б) время наблюдений, необходимое для регистрации спектральной линии с заданным отношением S/N или заданным уровнем значимости. В данной работе предполагается, что для надежной регистрации молекулы минимальное отношение S/N_{pl} в спектральной линии должно быть

не меньше 3. Из практических соображений следует также ограничить суммарное²⁴ наблюдательное время 120 - 200 часами (что соответствует ≈ 5-8 орбитам КТ Спектр-УФ).

В данной работе исследуется возможность обнаружения спектральных у-NO на экзопланетах с помощью КТ Спектр-УФ полос методами трансмиссионной (Рисунок 9а) и эмиссионной (Рисунок 9б) спектроскопии. К настоящему времени известно большое количество моделей расчета S/N, необходимого для обнаружения спектральных линий молекул-биомаркеров в атмосферах экзопланет с помощью представленных методов (для КТ JWST -[6,40,144–146]; для КТ PLATO – [15]; для КТ LUVOIR – [58]; для КТ им. Нэнси Роман - [16]; для телескопа ELT – [147]). Методика расчета S/N, реализованная в данной работе, основана на указанных моделях. Далее представлено ее описание.

2.3.1 Метод трансмиссионной спектроскопии

Метод трансмиссионной спектроскопии основан на измерении разности приходящих сигналов от родительской звезды во время первичного транзита, C_{in} , и вне его C_{out} . Сигнал в спектральной линии молекулы в атмосфере экзопланеты определяется как [144], $C = C_{cont} - C_{line}$, где $C_{cont} -$ сигнал в континууме приходящего излучения в районе спектральной линии, $C_{line} -$ сигнал в спектральной линии. Величину С можно также выразить через полный сигнал от звезды вне транзита [144], $C = C_{out} * f_A$, где $f_A = (C_{out} - C_{in})/C_{out}$ – глубина транзита (см. выражения (33), (34)). Отношение сигнала к шуму, согласно методике [15], в данном случае можно вычислить следующим образом:

$$S/N_{pl} = \frac{C}{N} = f_{A_{atm}} \frac{C_{out} * t}{\sqrt{2\sigma}} = \frac{f_{A_{atm}}}{\sqrt{2}} S/N_{st}$$
(37)

²⁴ Под суммарным подразумевается общее время наблюдений, которое может быть достигнуто при наблюдении нескольких транзитов.

где S/N_{st} - отношение сигнала к шуму для спектра родительской звезды; коэффициент $\sqrt{2}$ указывает на то, что сигнал от планеты определяется на основе разности измеряемого потока от родительской звезды во время транзита и вне его [15,40]; С_{out} – сигнал, приходящий от звезды на детектор [148]:

$$C_{out} = \frac{\lambda}{hc} \frac{R_s^2}{d^2} I_{st} A_{eff} d_{sp} E_f N_{\lambda pix}$$
(38)

I_{st} - интенсивность излучения на центральной длине волны λ_C, $\frac{B_T}{M^2_{HM}}$ (является сверткой с разрешением спектрографа); d - расстояние до планетной системы, м (1м ≈ 3.24E-17 пк); R_s – радиус звезды, м; A_{eff}(λ) = A Q_{tel}(λ)S_{spec}(λ)QE(λ) - эффективная площадь телескопа в м²; Q_{tel}(λ), S_{spec}(λ), QE(λ) – пропускная способность телескопа, эффективность спектрографа и квантовая эффективность ПЗС - приемника, соответственно; t - время накопления сигнала, c; h - постоянная планка; с – скорость света; E_f - доля энергии, заключенная в N_{spix} в направлении, перпендикулярном дисперсии; d_{sp} – дисперсия, нм/пиксел; N_{λpix} – количество пикселов в направлении дисперсии.

Величина σ в знаменателе выражения (37) описывает шумовой сигнал:

$$\sigma = C_{out} t + (\sigma_{det} + \sigma_{sky}) N_{pix} t + N_{read} R^2$$
(39)

где σ_{det} – темновой ток детектора; N_{pix} – количество пикселов, в которых содержится сигнал от объекта; N_{read} – количество считываний детектора (в данной работе предполагается равным 1); R – шум считывания; σ_{sky} – фон неба, рассчитывается согласно [148]:

$$\sigma_{sky} = \frac{\lambda}{hc} I_{sky} A_{eff} d_{sp} \text{ scale}_{s} W N_{spix} N_{\lambda pix}$$
(40)

где scale_s – масштаб изображения в направлении, перпендикулярном дисперсии, угл.сек/пиксел; W - ширина щели в угловых секундах; I_{sky} – спектральное распределение фона неба с одной квадратной секунды (поверхностная яркость), $\frac{BT}{M^2 HM V \Gamma N C C K^2}$. Для задания I_{sky} в данной работе

используется: 1. Спектральное распределение зодиакального света, соответствующее среднему уровню видимой поверхностной яркости 22.7 зв.вел./угл.сек², согласно [149]; 2. Спектральное распределение свечения атмосферы Земли, взятое в первом приближении согласно наблюдениям КТ им. Хаббла [148].

При определении верхнего предела возможности регистрации спектральной линии в первом приближении достаточно учесть только $S/N_{st} = \sqrt{C_{out} * t}$. статистический тогда Обычно шум, при ЭТОМ рассматривают ту область пикселов на детекторе, которая согласно функции распределения точки содержит 99% приходящего сигнала от звезды [40]. В этом случае влиянием фона неба, темнового тока, шума считывания можно пренебречь. Указанное предположение также справедливо, если в качестве приемника рассматривается приемник с микроканальной пластиной (МКП приемник) [58].

В работе [58] величине S/N_{pl}, указанной в (37), ставится в соответствие выражение X × σ , где X = S/N_{pl}, а σ - соответствует уровню значимости сигнала. Таким образом, значение S/N_{pl} = 1, 3, 5 можно интерпретировать как регистрация спектральной линии данной молекулы в атмосфере экзопланеты с уровнем значимости 1 σ , 3 σ , 5 σ , соответственно. В данной работе установлено, что для надежной регистрации сигнала отношение S/N_{pl} должно быть не меньше 3. Для сравнения в других работах в качестве приемлемого S/N для регистрации сигнала были заданы значения 3 [6,15,58,146], 5 [40,150].

В общем случае расчет планируемого времени накопления сигнала, необходимого для достижения заданного отношения S/N_{set} , производится в три этапа: 1) на первом этапе определяется значение $f_{A_{atm}}$ в рассматриваемой спектральной линии из модели пропускания света; 2) из (37) вычисляется значение S/N_{st} , которое необходимо достичь для регистрации спектральной

линии с заданной степенью значимости, $S/N_{st} = \frac{\sqrt{2}S/N_{set}}{f_{A_{atm}}};$ 3) наконец, вычисляется искомое наблюдательное время согласно выражению [148]:

$$t = \frac{S/N^{2} \left(C_{out} + N_{pix} \left(\sigma_{det} + \sigma_{sky}\right)\right)}{2C_{out}^{2}} + \frac{\sqrt{S/N^{4} \left(C_{out} + N_{pix} \left(\sigma_{det} + \sigma_{sky}\right)\right)^{2} + 4(S/N C_{out})^{2} * (N_{read} R^{2})}{2 C_{out}^{2}}}$$

$$(41)$$

При рассмотрении статистического шума в качестве основного шумового источника [15] t может быть вычислено следующим образом:

$$t = T_d \left(\frac{S/N_{set}}{S/N_{pl}}\right)^2$$
(42)

где $T_d = \frac{P}{2\pi} 2 \arcsin\left(\frac{R_s}{a}\right)$ [15,151] в предположении, что 1) $R_p \ll R_s$; 2) наклонение орбиты, $i = 90^\circ$.

В основе вычисления отношения S/N_{pl} в данной работе, как и в [15,40,58,144,150] лежит несколько важных предположений:

1) Планета проходит через центр звездного диска. Это позволяет максимизировать время накопления сигнала во время транзита.

2) Расстояние от наблюдателя до планеты и звезды равны;

3) Межзвездное поглощение на луче зрения для ближайших планетных систем мало и им можно пренебречь;

3) Эффект потемнения к краю не влияет на трансмиссионный спектр;

4) Активность звезды остается неизменной во время наблюдений;

Указанные предположения являются довольно грубыми, но приемлемыми для проведения модельных параметрических расчетов для оценки возможности обнаружения молекул-биомаркеров на экзопланетах [15,40,58]. Реальные наблюдения атмосфер экзопланет могут осложняться разными факторами, которые влияют на качество получаемого сигала. Одним из наиболее важных факторов является активность родительской звезды и проявление этой активности в ближнем УФ диапазоне. Как следует из результатов моделирования (см. например, [15,40]) и наблюдений [152], исследование атмосфер экзопланет земного типа, находящихся в ЗПО, сугубо многотранзитная задача. Во время транзита и между ними на родительской звезде могут возникать и эволюционировать пятна – области с пониженной температурой и меньшим потоком непрерывного излучения. Наличие пятен может искажать спектр звезды и, как следствие, приводить к искажениям в наблюдаемой глубине транзита [153]. Эти факторы, в свою очередь, необходимо учитывать при планировании наблюдений и последующем анализе экспериментальных данных. Учет этих факторов будет произведен в дальнейшей работе.

Как отмечалось ранее, величина $f_{A_{atm}}$ в (37) описывает вклад атмосферы экзопланеты в наблюдаемую глубину транзита. Важно также отметить, что при расчете $f_{A_{atm}}$ для системы γ -полос NO необходимо рассматривать не только поглощение фотонов родительской звезды (переход из X²П основного состояния в $A^2\Sigma^+$ возбужденное состояние), но и резонансное переизлучение ($A^2\Sigma^+ - X^2\Pi$ переход) на тех же длинах волн. В данном случае, глубина транзита будет определяться не только пропусканием через атмосферу планеты, но и собственным излучением атмосферы планеты [154], т. е. $f_A = \frac{F_{out} - (TF_{out} - F_{self})}{F_{out}}$ (здесь Т — пропускание; F_{self} — собственное излучение). Проведенные расчеты показали, что ввиду сильного влияния эффекта резонансного самопоглощения в γ -полосах, вклад флуоресценции NO в глубину транзита составляет менее 1% для рассматриваемых в работе атмосфер экзопланет (см. Раздел 4.1) при высокой лучевой концентрации NO, >10¹⁷ см⁻² (см. Рисунок 10).

В качестве основного инструмента для поиска молекулы NO на экзопланетах в данной работе рассматривается КТ Спектр-УФ (апертура 1.7 м) [8,30,31,155]. По части спектроскопии в состав комплекса научной аппаратуры Спектр-УФ входят вакуумный УФ эшельный спектрограф ВУФЭС (R ≈ 50000) для работы в диапазоне длин волн 115–176 нм, эшельный спектрограф для работы в ближнем УФ диапазоне УФЭС ($R \approx 50000, 174-310$ нм) и спектрограф с длинной щелью СДЩ ($R \approx 1000, 115-305$ нм) [156,157]. Для рассматриваемой задачи по рабочему спектральному диапазону подходят спектрографы УФЭС и СДЩ. В Таблице 5 представлены основные параметры этих спектрографов, необходимые, для расчета отношения S/N.

Таблица 5. Параметры спектрографов УФЭС и СДЩ КТ Спектр-УФ из работ [157–161].

Параметр	Значение параметра	
	УФЭС	СДЩ
Рабочий спектральный	174—310нм	115-305 нм
диапазон		
Разрешение	50000	1000
Тип приемника	ПЗС	ПЗС
Эффективность		
спектрографа в	≈9%	≈25%
диапазоне 200 – 220 нм,		
$Q_{tel}(\lambda)S_{spec}(\lambda)QE(\lambda)$		
Темновой ток	3.3×10 ⁻³ е ⁻ /с/пиксел	
Шум считывания	3 e ⁻	

Сравним эффективность спектрографов УФЭС и СДЩ для рассматриваемой в этой работе задаче. Определим, во сколько раз различается время накопления сигнала для регистрации потока от звезды типа Солнца (с солнечным спектром) 10-ой видимой звездной величины на длине волны 215 нм (соответствует центру (1,0) γ-полосы NO, см. Таблицу 3) с отношением S/N = 100. Если рассматривать статистический шум в качестве основного шумового источника, то можно воспользоваться формулой [15] для вычисления S/N_{st}: S/N_{st} = $\sqrt{\frac{\lambda}{hc} \frac{R_{st}^2}{d^2} I_{st} A q_{эф\phi} t \frac{\lambda_c}{R}}$, где $q_{эф\phi}$ – эффективность

спектрографа. В этом случае $\frac{t_{y\Phi\ni C}}{t_{CДЩ}} = \frac{q_{s\Phi\Phi}^{CДЩ}}{q_{s\Phi\Phi}^{SDC}} \frac{R_{y\Phi\ni C}}{R_{CДЩ}}$. Подставляя параметры из Таблицы 5, получим, что время накопления сигнала при рассмотрении спектрографа СДЩ в 139 раз меньше, чем при рассмотрении УФЭС. В общем случае при рассмотрении других шумовых составляющих (выражения 39-40) наблюдательное время различается в 90 раз. Из-за большего размера щели у спектрографа СДЩ фон неба дает больший вклад в шумовой сигнал (40) по сравнению со спектрографом УФЭС, поэтому различие во времени накопления сигнала в общем случае меньше. Это различие во времени накопления сигнала, тем не менее, достаточно велико для задачи по исследованию атмосфер экзопланет земного типа, так как эта задача требует больших значений S/N_{st} для звезды. Поэтому оптимальным спектрографом КТ Спектр-УФ для решения данной задачи является спектрограф СДЩ.

Методика расчета отношения сигнала к шуму S/N, реализованная в работы, рамках выполнения данной использовалась при создании калькулятора экспозиций КТ Спектр-УФ, представленного в работе [158]. Эта модель позволяет планировать эксперимент по всем основным научным задачам КТ Спектр-УФ и будет использоваться при отборе заявок на наблюдения с помощью данного КТ. В [158] проведена валидация разработанного калькулятора экспозиций Спектр-УФ на основе сравнения получаемых результатов с результатами расчетов калькулятора экспозиций КТ им. Хаббла. Продемонстрировано соответствие между получаемыми с помощью этих моделей результатами расчета S/N для различных задач фотометрии и спектроскопии.

2.3.2 Метод эмиссионной спектроскопии

Косвенно наблюдать излучение атмосферы планеты (ее собственное излучение или пере-излучение света звезды) можно при регистрации потоков от родительской звезды во время вторичного затмения планеты и вне его [15], т.е. $C_{pl} = C_{out} - C_{in} = (C_{st} + C_{pl}) - C_{st}$. В частном случае при рассмотрении

статистического шума в качестве основного шумового источника вычислить отношение S/N_{pl} можно следующим образом [15]:

$$S/N_{pl} = \frac{C_{pl}}{\sqrt{2\sigma_{st}^2 + \sigma_{pl}^2}} = \frac{C_{pl}}{C_{st}} \frac{C_{st}}{\sqrt{2\sigma_{st}^2}} = \frac{I_{pl}}{I_{st}} \frac{R_{pl}^2}{R_{st}^2} \frac{S/N_{st}}{\sqrt{2}}.$$
 (43)

где $C_E = \frac{C_{pl}}{C_{st}} = \frac{I_{pl}}{I_{st}} \frac{R_{pl}^2}{R_{st}^2}$, – отношение потоков излучения от планеты и родительской звезды (контраст); I_{pl} - интенсивность излучения в атмосфере планеты (в данной работе - резонансное переизлучение света родительской звезды в γ -полосах NO, определяется согласно выражениям (27, 30); I_{st} - интенсивность излучения родительской звезды; S/N_{st} – отношение сигнала к шуму для спектра родительской звезды, рассчитывается на основе выражений (37-40). Время накопления сигнала, необходимое для достижения заданного S/N_{set} , вычисляется аналогично (41).

Как отмечалось ранее при рассмотрении метода трансмиссионной спектроскопии, контраст в сигналах звезды во время транзита и вне его равен $C_T = \frac{R_p^2}{R_s^2}$. Из сравнения этой величины с C_E следует, что метод трансмиссионной спектроскопии является более эффективным транзитным методом для решения рассматриваемой задачи. Понятно, что при рассмотрении излучения NO в случае оптически тонкой среды рост интенсивности I_{pl} будет происходить пропорционально лучевой концентрации данной молекулы (27). Однако, учет резонансного самопоглощения в γ-полосах (30) приведет к тому, что соотношение C_E будет существенно меньше соотношения C_T.

Инструментом, способным решить проблему контраста (в методе эмиссионной спектроскопии, прямого обнаружения экзопланет) при достаточном угловом разрешении родительской звезды и ее компаньона экзопланеты, является коронограф. К настоящему моменту существует довольно большое количество конфигураций коронографов (см., например, [162]). Более того, в рамках проекта Спектр-УФ также разрабатывается ахроматический интерференционный коронограф общего пути с переменным вращательным сдвигом для работы в видимом диапазоне длин волн [163–165].

Чтобы определить потенциальную значимость коронографа при поиске излучения NO, в данной работе не будем ограничиваться определенной конфигурацией данного инструмента, а получим теоретическую оценку увеличения отношения S/N в сравнении с рассмотренными ранее подходами. И определим параметры коронографа (контраст коронографа, максимальную пропускную способность), необходимые для регистрации γ-полос NO с заданным S/N. Более подробное изучение эффективности конкретного коронографа для решения поставленной задачи является предметом дальнейших работ.

Для оценки S/N была использована методика, подробно описанная в работе ([16], см. приложение), разработанная для коронографа на борту КТ им. Нэнси Роман. Данная методика основана на том, что экзопланета рассматривается как точечный источник собственного излучения. В этом случае полезный сигнал от планеты вычисляется согласно формуле (38) за исключением нескольких моментов: вместо I_{st} используется I_{pl} - интенсивность излучения в атмосфере планеты; при расчете эффективной площади телескопа учитывается также пропускная способность коронографа, q.

Шумовой сигнал рассчитывается на основе выражения (41), то есть учитываются: статистический шум, фон неба, темновой ток и шум считывания. Помимо этого, в выражении для шумового сигнала добавляется остаточная засветка звезды, σ_{lk} , и экзо-зодиакальный свет [16], σ_{ez} . Остаточная засветка звезды определяется как сигнал от звезды, C_{st} , пришедший на приемник через измерительный канал и уменьшенный на контраст коронографа, С: $\sigma_{lk} = C * C_{st}$, где C_{st} определяется согласно выражению (38). Сигналы от зодиакального, σ_z , и экзо-зодиакального, σ_{ez} , света вычислялись согласно выражениям (16) и (18) из приложения [16], соответственно.

Глава 3. Образование NO в атмосферах экзопланет у активных звезд

Важным фактором для обнаружения спектральных линий NO в УФ диапазоне на экзопланете является высокое содержание этой молекулы в ее верхней атмосфере. Чем выше объемная концентрация NO на больших высотах, тем больше эффективная высота атмосферы (33) и глубина транзита экзопланеты (34), и тем выше отношение S/N в γ -полосах NO (37). Ранее в разделе 2.1 была представлена модель теплового и нетеплового образования NO ANOD в результате высыпания электронов в верхнюю атмосферу планеты. Также была представлена валидация этой модели на примере атмосферы Земли при высыпании в нее электронов с потоком энергии Q₀ = 1 эрг см⁻² с⁻¹. Если экзопланета земного типа с N₂-O₂ атмосферой находится в ЗПО у активной звезды (более активной, чем Солнце), она может быть подвержена более высоким потокам звездного ветра, корональным выбросам массы. Такое воздействие может привести к увеличению потока высыпающихся электронов в атмосферу планеты и способствовать росту концентрации NO.

Основная цель данной Главы заключается в том, чтобы оценить роль высыпаний энергичных электронов и нетепловых процессов, индуцированных этими высыпаниями, в образование NO в атмосферах экзопланет земного типа у активных родительских звезд.

Глава организована следующим образом: в Разделе 3.1 представлены основные предположения данной работы; В Разделе 3.2 представлены результаты моделирования нетеплового образования молекулы NO в N₂-O₂ атмосфере экзопланеты; в Разделе 3.3 представлены результаты расчетов теплового и нетеплового образования NO при различных потоках энергии высыпающихся электронов. В Разделе 3.4 представлена оценка теплового баланса в атмосфере для рассматриваемых случаев электронных высыпаний.

3.1 Основные предположения

При моделировании образования NO на экзопланетах земного типа у активных звезд мы сделали несколько важных предположений:

1) У рассматриваемых экзопланет земного типа сформировалась устойчивая N₂-O₂ доминантная атмосфера, схожая по составу и физическим условиям с атмосферой Земли. а) В работах [3,4] на основе рассмотрения эволюции атмосфер Земли, Марса и Венеры было показано, что образование и поддержание N₂-O₂ атмосферы на планете земного типа потенциально возможно при наличии на ней биологической и геологической активности. Наиболее эффективными процессами производства молекулы N₂ при аэробных условиях являются денитрификация и анаэробное окисление аммония, молекулы O₂ – фотосинтез. Тектоническая активность, приводящая к субдукции литосферных плит с последующей вулканической дегазацией, также может являться важным процессом поступления N₂ в атмосферу [3,28,29].

б) К настоящему моменту известно несколько работ, в которых исследуется устойчивость N_2 - O_2 доминантных атмосфер экзопланет земного типа, находящихся в ЗПО у активных звезд и подверженных высоким потокам XUV излучения родительской звезды [64,166,167]. Результаты моделирования [166] предсказывают полную потерю атмосферы Земли за 1 млн. лет при воздействии на нее потока XUV излучения, в 10 раз превышающего солнечный XUV поток (F_{XUV0} =3.75 эрг см⁻² с⁻¹ в диапазоне 1 - 91.2 нм на 1 а.е. [168]). Это означает, что атмосфера Земли могла быть нестабильна в Хадее и раннем Архее. Данное исследование также ставит под вопрос возможность образования N_2 - O_2 доминантных атмосфер на экзопланетах у звезд М и К спектральных классов. Повышенная активность и высокие XUV потоки у таких звезд сохраняются на несколько миллиардов лет дольше, чем у звезд солнечного типа [3,4,169–172].

Противоположные результаты были получены в работе [173]. В этой работе авторы построили схожую с [64] аэрономическую модель верхней N₂-O₂ атмосферы. В данной модели учитывалось выхолаживание атмосферы не только за счет излучения молекул CO₂, NO, H₂O (как в [64]), но за счет излучения атомов H, C, N, O. Это позволило пересмотреть результаты работы [166] и предсказать устойчивость земной атмосферы к XUV потокам звездного излучения, которые превышают солнечный вплоть до 1000 раз.

В данной работе мы опираемся на результаты представленных работ. Детальные исследования образования и устойчивости N₂-O₂ атмосферы у планеты земного типа выходят за рамки данной работы и являются предметом дальнейших исследований.

2) Рассматриваемые экзопланеты подвержены более частым и сильным возмущением звездного ветра, чем Земля. Как следствие, большие потоки энергии высыпающихся электронов магнитосферного происхождения, Q₀, (которые являются результатом взаимодействия звездного ветра с магнитосферой планеты) имеют постоянный, а не спорадический характер как на Земле.

Вообще, потоки энергии Q_0 в земной атмосфере при высокой геомагнитной активности могут достигать²⁵ от 1 эрг см⁻² с⁻¹ до >100 эрг см⁻²с⁻¹ [175,176], соответственно. При этом высыпания с $Q_0 > 1$ эрг см⁻² с⁻¹ носят спорадических характер. А частота таких событий убывает с ростом Q_0 [176].

Из наблюдений космических миссий Kepler и K2 известно, что в среднем звезды солнечного типа (спектральный класс как у Солнца) с аналогичным периодом вращения (≈25 сут.) являются более запятненными, чем Солнце [177], обладают большей болометрической переменностью [178], бо́льшими потоками энергичных частиц [179], бо́льшими энергиями вспышек [180–182]. Следовательно, могут быть более активными, чем Солнце. То же справедливо

²⁵ Значения Q0 в 1 эрг см⁻² с⁻¹ и 1000 эрг см⁻² с⁻¹ соответствуют классам полярных сияний IBC (International Brightness Coefficient) 1 и 4, соответственно, или значениям интенсивности излучения в линии O I λ 5577 Å, равным 1 и 1000 кР [174]

для звезд спектрального класса К и М, для которых характерна более высокая и продолжительная по времени активность в XUV и X-ray диапазоне, чем у звезд солнечного типа [3,4,169–172]. Высокие потоки звездного ветра от этих звезд особенно во время КВМ могут изменять структуру магнитосфер экзопланет и приводить к потери их атмосфер [183–185].

Известно также, что такие показатели активности звезды как XUV [168,186–188] и X-гау потоки [168,189], потеря массы звезды [190–192] уменьшаются с увеличением ее возраста. Таким образом, для звезд моложе Солнца можно ожидать более сильной потери массы и, как следствие, больших потоков звездного ветра (особенно, за счет корональных выбросов массы [183,192]. В качестве примера можно привести работу [190], где из наблюдений астросфер ближайших звезд солнечного типа различного возраста в спектральной линии H I Lya (121.6 нм) были определены значения потери массы, \dot{M} , этих звезд. Авторы получили степенную зависимость \dot{M} от возраста звезды: $\dot{M} \sim t^{-\alpha}$ с показателем степени $\alpha \approx 2.33$, где t возраст звезды в млрд. лет. Согласно данной зависимости, потеря массы у Солнца была бы на 2 порядка выше, чем сейчас (сейчас $\approx 10^{-14} \, M_{\odot}$ /год) при возрасте Солнца 1 млрд. лет.

Таким образом, если экзопланета земного типа находится в ЗПО у звезды, более активной чем Солнце, можно предположить, что она может быть подвержена более частым и сильным возмущением звездного ветра. Это может привести к более интенсивным и продолжительным высыпаниям электронов в ее атмосферу.

3) Структура нейтральной верхней атмосферы не изменяется под действием высоких потоков высыпающихся электронов, Q₀ ∈ [1;100]эрг см⁻²с⁻¹. Это предположение приемлемо и ранее использовалось разными авторами (см., например, [78,84,93]) при моделировании образования NO при высыпании электронов в верхнюю атмосферу Земли. В разделе 3.2 для обоснования представленного предположения мы проанализируем влияние

дополнительных источников нагрева/охлаждения, возникающих во время электронных высыпаний, на изменение температуры нейтральной атмосферы.

3.2 Нетепловое образование NO в N2-O2 атмосферах экзопланет

Как отмечалось ранее, реакция надтепловых атомов азота $N_{hot}(^4S)$ с молекулами O_2 (8) представляет собой дополнительный нетепловой канал образования NO. Частота этой реакции вычисляется с помощью кинетической модели Монте-Карло (КММК) для надтепловых атомов азота [A4, A5], краткое описание которой представлено в Разделе 2.1.

Чтобы исследовать роль нетеплового канала в образовании NO в атмосферах экзопланет у активных звезд, реакция (8) была добавлена в разработанную модель химии нечетного азота ANOD. Таким образом, производилось решение системы уравнений химической кинетики P1-P20 из Таблицы 2 (напомним, что реакции P1-P19 описывают тепловой канал формирования NO) с учетом молекулярной и турбулентной диффузии.

Важно отметить, что моделирование нетеплового канала формирования NO в условиях спорадичных высыпаний электронов с $Q_0 \ge 1.0$ эрг см⁻² с⁻¹ (как на Земле) должно производиться в рамках нестационарной модели (см., например, раздел 5 в [93], [97]). Поэтому при проведении расчетов до установившегося режима в данной модели предполагается, что экзопланета находится у более активной чем Солнце звезды и подвержена интенсивным и продолжительным высыпаниям электронов, в отличии от земной атмосферы (см. Раздел 3.1).

Исходные данные для расчетов были взяты такими же как при валидации модели ANOD на примере атмосферы Земли. Модели атмосферы MSISE90 и IRI2016 были рассчитаны для полярной области (широта 65°N и долгота 0°) на дату 21 сентября 1999 года (см. Рисунок 5). Рассматривались два случая высыпания электронов с характеристической энергией $E_0 = 1$ кэВ и 4 кэВ. На верхней границе расчетной области был задан поток высыпающихся электронов Q₀ = 1 эрг см⁻² с⁻¹.

Далее представлены результаты кинетического и химического моделирования. На Рисунке 15 показаны высотные распределения скорости образования надтепловых атомов $N_{hot}(^4S)$ в результате диссоциации N_2 электронным ударом (5). По порядку величины скорость этого процесса соответствует скорости образования тепловых атомов $N(^4S)$ в реакции (5) (см. Рисунок 7). Высота максимума скорости образования $N_{hot}(^4S)$ также соответствует высоте наибольшей потери энергии высыпающихся электронов (см. Рисунок 6).



Рисунок 15. Высотные профили скорости образования надтепловых атомов N_{hot}(⁴S) при высыпании электронов с характеристической энергией E₀= 4 кэВ (красные линии) и 1 кэВ (синие линии).

На Рисунке 16 представлены рассчитанные с помощью кинетической модели КММК для высоты 130 км стационарные функции распределения по энергии атомов $N_{hot}(^4S)$ для двух случаев высыпания электронов ($E_0 = 4$ кэВ и 1 кэВ). Функция распределения $N_{hot}(^4S)$ показана только для энергий, лежащих выше порога реакции (8) 0.3 эВ [98], который соответствует нижней границе энергий надтепловых атомов $N_{hot}(^4S)$. Штриховой линией на данном Рисунке показана максвелловская функция распределения по энергии для тепловых атомов азота. Из сравнения этих кривых наглядно видно, что энергетический спектр атомов $N_{hot}(^4S)$ имеет строго неравновесный характер. Наличие нетеплового хвоста у этого спектра важно для дальнейшего расчета

нетеплового канала образования NO и исследования вклада этого канала в химию нечетного азота.



Рисунок 16. Стационарные функции распределения энергии (ФРЭ) надтепловых атомов азота, рассчитанные для высоты 130.5 км и характеристической энергии высыпающихся электронов E₀= 1 кэВ (верхняя панель, синие линии) и 4 кэВ (нижняя панель, красные линии). Штриховой линией показана максвелловская функция распределения по энергии для тепловых атомов азота с параметрами из модели MSISE90.

На Рисунке 17 показаны высотные распределения интегральных нетепловых частот образования NO, вычисленные с помощью выражений (25-26) для двух случаев электронных высыпаний, $E_0 = 1$ кэВ и 4 кэВ. Эти частоты используются при последующем моделировании нетеплового канала образования NO. Штриховыми и штрих-пунктирными линиями на данном Рисунке показаны частоты теплового образования NO в реакциях (3) и (4), соответственно. Сравнение данных кривых показывает различие в пределах 1 и 2 порядков величины (в районе максимума теплового образования NO) для случаев высыпания электронов с энергиями $E_0 = 1$ и 4 кэВ, соответственно.

Однако, несмотря на относительно небольшие значения частот реакции (8), нетепловое образование NO происходит в более глубоких слоях атмосферы, чем тепловое (чем больше E₀, тем глубже образуется NO). Так, на

высотах, где достигается максимум частоты нетеплового образования NO, эта величина на более чем 1 порядок (при $E_0 = 1$ кэВ) и 2 порядка (при $E_0 = 4$ кэВ) превышает частоты теплового образования NO. За счет этого вклад реакции (8) в образование NO может быть значителен.



Рисунок 17. Высотные профили частоты реакции (8), рассчитанные для характеристических энергий высыпающихся электронов $E_0 = 1$ кэВ (верхняя панель, синие линии) и 4 кэВ (нижняя панель, красные линии). Штриховыми и штрих-пунктирными линиями показаны характерные частоты теплового образования NO в реакциях (3) и (4), соответственно.

Наконец, на Рисунке 18 штрих-пунктирными линиями показаны основные результаты расчетов нетеплового образования окиси азота – высотные профили концентрации NO. Результаты получены для двух случаев электронных высыпаний, E₀ = 1 кэВ и 4 кэВ. Сплошными линиями на данных

Рисунках показаны концентрации NO, полученные из моделирования теплового образования данной молекулы (см. Рисунок 8).



Рисунок 18. Высотные распределения объемной концентрации NO, образованной в нетепловом (штрих-пунктирные линии) и тепловом (сплошные линии) каналах. Расчеты произведены для двух случаев высыпания электронов с характеристической энергией E₀=1 кэВ (верхняя панель) и 4 кэВ (нижняя панель).

В обоих случаях высыпания электронов ($E_0 = 1$ и 4 кэВ) наблюдается сильное увеличение объемной концентрации NO в максимуме при рассмотрении нетеплового канала образования этой молекулы. Так, при $E_0 = 1$ кэВ наибольшая концентрация NO, образованной в нетепловом канале, в 20 раз превышает концентрацию NO, образованной в тепловом канале. Для случая E_0

= 4 кэВ различие составляет 70 раз. При этом высоты максимумов концентраций NO составляют: 108.5 км при $E_0 = 1$ кэВ, и 94.5 км при $E_0 = 4$ кэВ, что соответствует пиковым значениям частот реакции (8). Таким образом, вклад реакции с участием надтепловых атомов (8) в образование NO может быть значителен для N₂–O₂ доминантных атмосфер планет земного типа, находящихся в ЗПО у активных звезд.

3.3 Концентрация NO в атмосферах экзопланет при различной интенсивности высыпания электронов

Основной целью данной Главы было исследовать возможное образование NO в атмосферах экзопланет земного типа, находящихся в ЗПО у активных звезд. Поэтому, используя рассмотренные ранее модели и предположения, были проведены расчеты высотных профилей концентрации NO для N₂-O₂ атмосферы планеты земного типа, подверженной более частым и сильным (чем атмосфера Земли) высыпаниям электронов магнитосферного происхождения.

Для этого, на верхней границе расчетной области в модели КММК высыпания электронов задавались различные потоки энергии Q₀ от 1 до 100 эрг см⁻² с⁻¹. Распределение высыпающихся электронов по энергии на верхней было максвелловской функцией границе задано распределения с характеристической энергией $E_0 = 4$ кэВ. Это значение соответствует половине средней кинетической энергии электронов, $E_m = 2E_0 = 8$ кэВ. Из наблюдений полярных областей атмосферы Земли известно, что NO эффективно образуется при высыпании электронов со средними кинетическими энергиями 1–10 кэВ [9]. Таким образом, значение $E_0 = 4$ кэВ практически соответствует верхнему пределу из представленного диапазона энергий.

Всего было выделено 4 характерных варианта расчета (они также используются при определении возможности обнаружения NO в Разделе 4):

I. $Q_0 = 1$ эрг см⁻² с⁻¹, рассматривается тепловой канал образования NO. Такие условия зачастую реализуются в атмосфере Земли [9,81,93];

2. $Q_0 = 1$ эрг см⁻² с⁻¹, рассматривается нетепловой канал образования NO;

3. $Q_0 = 10$ эрг см⁻² с⁻¹, тепловой канал;

4. $Q_0 = 80$ эрг см⁻² с⁻¹, нетепловой канал.

Электронные высыпания, рассматриваемые в вариантах 2 – 4, могут возникать в атмосфере Земли только как спорадические явления [176]. Поэтому, как было обозначено ранее, предполагается, что N₂-O₂ атмосфера планеты земного типа подвержена более сильным и продолжительным высыпаниям электронов.

Исходные данные для расчетов были взяты такими же как при валидации модели ANOD на примере атмосферы Земли. Модели атмосферы MSISE90 и IRI2016 были рассчитаны для полярной области (широта 65°N и долгота 0°) на дату 21 сентября 1999 года (см. Рисунок 5).

На Рисунке 19 представлены результаты проведенных расчетов – высотные профили концентрации NO для четырех вариантов высыпания электронов в N₂-O₂ атмосферу планеты земного типа. Профили концентрации NO, построенные для вариантов 1 (штриховая синяя кривая) и 2 (штриховая красная кривая), соответствуют результатам на нижней панели Рисунка 18. Как обсуждалось ранее, концентрация NO существенно увеличивается в диапазоне высот 90 – 200 км при рассмотрении нетеплового канала в сравнении с тепловым. Особенно это заметно в районе максимума концентрации NO (95 – 105 км), где различие составляет практически два порядка величины. Такой рост концентрации NO обусловлен тем, что дополнительная реакция (8) вносит вклад в решение жесткой системы уравнений химической кинетики, описывающей химию нечетного азота. При этом нетепловое образование NO происходит в более глубоких слоях атмосферы (см. Рисунок 17) чем тепловое, и, следовательно, в этих слоях скорости нетеплового образования NO (произведение частоты реакции на концентрацию O₂) значительно больше скоростей теплового образования NO.

С увеличением потока энергии Q_0 в 80 раз (красная сплошная кривая) максимум концентрации NO в нетепловом канале достиг значения 1.5×10^{12} см⁻³, что еще на 2 порядка больше, чем при $Q_0 = 1$ эрг см⁻² с⁻¹. При этом в 3 варианте расчета (10 Q_0 , тепловой канал) содержание NO в пике, 2×10^9 см⁻³, все же меньше, чем в нетепловом случае²⁶ при $Q_0 = 1$ эрг см⁻² с⁻¹, 2×10^{10} см⁻³.



Рисунок 19. Высотные распределения концентрации NO в N₂-O₂ атмосфере экзопланеты земного типа, которая подвержена различным по силе высыпаниям магнитосферных электронов: $Q_0 = 1$ эрг см⁻² с⁻¹ (синие и красные штриховые кривые); 10 Q₀ (синие сплошные кривые); 80 Q₀ (красные сплошные кривые). Во всех случаях характеристическая энергия высыпающихся электронов, $E_0 = 4$ кэВ. Синий цвет кривых соответствует тепловому каналу образования NO, красный цвет – нетепловому каналу образования.

На Рисунке 20 показана зависимость максимума концентрации NO в диапазоне высот 95 – 105 км от потока энергии высыпающихся электронов.

²⁶ В качестве сокращения здесь и далее в некоторых местах используется фраза «(не)тепловой случай» вместо «рассмотрение (не)теплового канала образования NO»

Левая ось ординат соответствует тепловому каналу образования NO, правая ось ординат – нетепловому. При этом значения концентрации по данным осям отличаются на два порядка величины.



Рисунок 20. Зависимость максимального значения концентрации NO на высотах 95 – 105 км при различных потоках энергии высыпающихся электронов 1 – 80 эрг см⁻² с⁻¹. Значения по левой оси ординат соответствуют тепловому каналу образования NO (синие кружки). Правая ось ординат соответствует нетепловому каналу образования этой молекулы (красные крестики).

Из Рисунка 20 следует, что с ростом Q_0 увеличение максимума NO в тепловом случае происходит нелинейным образом и соответствует степенной зависимости с положительной дробной частью (синие кружки на Рисунке 20). При этом концентрация NO не превышает значения 10^{10} см⁻³ даже при самом сильном высыпании, $Q_0 = 80$ эрг см⁻² с⁻¹. То есть концентрация NO выходит на некоторый уровень насыщения с увеличением интенсивности высыпания электронов, вызванных возмущениями звездного ветра. Это связано с эффективной потерей NO в реакциях (9) и (10) с атомарным азотом.

Полученный результат подтверждает выводы [78,84,93], сделанные по результатам расчетов для атмосферы Земли. Относительные значения максимума концентрации NO возрастают в 30 раз при изменении потоков Q_0 с 1 до 80 эрг см⁻² с⁻¹. Это подтверждает выдвинутую ранее гипотезу о том, что для активных родительских звезд образование NO в атмосферах экзопланет земного типа может быть более эффективно, чем в атмосфере Земли.

Еще одним аргументом в пользу данной гипотезы служат результаты, полученные при рассмотрении нетеплового канала образования NO (Рисунок 20, красные крестики). В отличие от теплового канала, увеличение концентрации NO с ростом Q₀ происходит практически линейным образом. Это происходит за счет роста скорости производства атомов N_{hot}(⁴S) и, следовательно, роста частоты реакции (8). Таким образом, максимум концентрации NO в атмосфере может существенно возрасти до 1.5×10^{12} см⁻³ при значении потока Q₀ = 80 эрг см⁻² с⁻¹. Что на 2 порядка величины больше, чем при рассмотрении теплового канала производства NO.

Аналогичные результаты были получены, когда вместо пиковых объемных концентраций NO анализировались вертикальные лучевые концентрации данной молекулы. Так, при рассмотрении теплового канала образования NO лучевая концентрация данной молекулы изменяется в пределах одного - двух порядков величины с ростом Q₀ в 100 раз. Это изменение можно представить в виде степенной зависимости с положительной дробной частью. При нетепловом образовании NO наблюдается линейное увеличение лучевой концентрации молекулы с ростом потока высыпающихся электронов. Различие между лучевыми концентрациями NO при рассмотрении теплового и нетеплового каналов составляет 2 порядка величины для случая, когда значение потока Q₀ соответствует 80 эрг см⁻² с⁻¹.

3.4 Оценка теплового баланса атмосферы при высыпаниях электронов

Одно из важных предположений данной работы (см., Раздел 3.1) заключается в том, что структура верхней N₂–O₂ атмосферы не изменяется под

действием высоких потоков высыпающихся электронов. Вплоть до случая высыпаний, который соответствует 4-му варианту расчета (80 Q₀, нетепловой канал). Ранее это предположение использовалось разными авторами [78,84,93] при моделировании образования NO при высыпании электронов в верхнюю атмосферу Земли. Чтобы показать допустимость этого предположения, нами были построены оценочные профили температуры в атмосфере для различных случаев высыпания электронов. При этом было принято, что структура верхней атмосферы кардинально не изменяется, если температура увеличивается не более чем в два раза. Это довольно грубое предположение, оно основано на том, что температура в верхней атмосфере Земли может изменяться от ≤1000 К до ≥2000 К [131], при этом структура атмосферы сохраняется.

Из моделей и наблюдений известно, что в уравнение теплового баланса для верхней N₂-O₂ атмосферы Земли может входить довольно большое количество источников нагрева и охлаждения (см., например, [62–64,167]). Чтобы оценить температуру, были использованы уже посчитанные источники нагрева/охлаждения из работы ([167], Рисунок 2) для случая, когда планета земного типа подвержена XUV потоку звезды, в 5 раз превышающем XUV поток от Солнца, $F_{XUV} = 5F_{XUVO}$. Такое значение XUV потока могло быть у Солнца во 2-й миллиард лет его жизни (см., например, Рисунок 1а в [4]) и будет использоваться при расчете наблюдательных проявлений NO (см. Раздел 4.1). Таким образом, чтобы оценить температуру в атмосфере, решалось стационарное уравнение теплопроводности с известными источниками нагрева, Q, и охлаждения, L [193]:

$$\frac{\partial}{\partial z} \left(\lambda_{\text{mol}}(T) \frac{\partial T}{\partial z} \right) = Q - L$$
(44)

где λ_{mol} – полный коэффициент теплопроводности, который был рассчитан согласно работе [64] (см. выражения 45 – 47 в [64]). Значения коэффициентов A_k и s_k, которые используются в расчете коэффициента теплопроводности для

каждого атмосферного компонента, $\lambda_k = A_k T_n^{s_k}$ [99], (k – соответствует компонентам N₂, O₂, CO₂, CO, O, He, H и Ar) были взяты из работ [194,195].

Помимо основных источников Q и L из [167], в расчетах были также рассмотрены дополнительные источники нагрева и охлаждения от высыпания электронов:

- Нагрев атмосферы может возникнуть в результате [196]: а) Диссоциации молекул электронным ударом. Избыточная кинетическая энергия атомов

 продуктов диссоциации преобразуется в теплоту; б) Экзотермических реакций с выделением теплоты (реакций нейтралов с нейтралами, ионов с нейтралами, ионов с электронами); в) Столкновений тепловых вторичных электронов с нейтральными компонентами атмосферы.
- 2. Важным дополнительным источником нагрева может также являться Джоулев нагрев [91]. Скорость Джоулева нагрева пропорциональна концентрации электронов, n_e, и квадрату напряженности электрического поля, Е. С увеличением потока энергии Q₀ может увеличиваться как n_e, так и Е. Это может привести к довольно сильному нагреву атмосферы, скорость нагрева в этом случае может быть больше [91], чем скорость нагрева от процессов, описанных в пункте 1.

Высотные профили скоростей нагрева для представленных выше процессов (пункты 1 и 2) в земной атмосфере были взяты из работы [91] (Рисунки 15 и 16 в [91]). Данные Рисунки построены для двух случаев: $Q_0 = 5$ эрг см⁻² с⁻¹, E = 25 мВ м⁻¹ и $Q_0 = 50$ эрг см⁻² с⁻¹, E = 50 мВ м⁻¹. Их анализ показал, что скорость нагрева за счет высыпания электронов (пункт 1) практически прямо пропорциональна потоку энергии электронов, Q_0 . Из этого анализа также следует аналогичная практически прямо пропорциональная зависимость скорости Джоулева нагрева от Q_0 (с учетом того, что эта скорость пропорциональна E^2)

3. Как известно (см., например, [62–64]), молекула NO, наряду с CO₂ и O₃, играет важную роль в энергетике атмосферы, так как является ее

эффективным охладителем за счет ИК излучения в колебательновращательных полосах (в основном на длине волны 5.3 микрон). Возбуждение колебательных уровней молекулы NO связано с ее столкновениями с атомами кислорода:

$$NO(\nu = 1) + 0 \leftrightarrows NO(\nu = 0) + 0$$
(45)

, а также с поглощением свечения Земли [197]. В расчете скорости охлаждения атмосферы за счет ИК излучения NO как раз-таки учитываются указанные процессы возбуждения NO [197]:

$$L_{NO} = h\nu_{5.3\mu m} A_{10} [NO^*]$$

$$[NO^*] = \frac{S_E + k_{NO-O} e^{-2700/T} [O]}{A_{10} + k_{NO-O} [O]} [NO]$$
(46)

где $A_{10} = 12.54 \text{ c}^{-1} [197] - эйнштейновский коэффициент спонтанного перехода; [NO[*]] – заселенность возбужденного колебательного состояния NO; <math>k_{NO-O} = 2.8 \times 10^{-11} \text{ см}^3/\text{c} [197,198] - \text{скорость столкновительного возбуждения и девозбуждения в реакции (45); S_E = <math>1.06 \times 10^{-4} \text{ c}^{-1}$ – частота возбуждения NO за счет поглощения свечения Земли [197,199]; $hv_{5.3\mu m} = 3.75 \times 10^{-13}$ эрг; [NO] и [O] – концентрации NO и O в основном состоянии, см⁻³.

Как было показано ранее (Рисунки 19-20), с увеличением потока энергии высыпающихся электронов концентрация NO может существенно увеличиться. Скорость охлаждения за счет ИК излучения данной молекулы пропорциональна концентрации [NO] и может быть особенно высока при рассмотрении нетеплового канала образования NO.

На Рисунке 21 представлены высотные профили удельных скоростей нагрева/охлаждения за счет дополнительных источников (пункты 1-3), рассчитанные для 4-х вариантов высыпания электронов. Стоит отметить, что скорость нагрева здесь представляет собой сумму скоростей нагрева за счет высыпания электронов и Джоулева нагрева (кривые коричневого цвета).

Из анализа данного Рисунка следует, что при относительно небольших потоках энергии высыпающихся электронов, $Q_0 = 1$ эрг см⁻² с⁻¹ (как в атмосфере Земли), среди рассмотренных источников нагрева/охлаждения доминирует охлаждение атмосферы за счет излучения NO в ИК диапазоне. Это справедливо как для теплового (сплошные кривые), так и для нетеплового (пунктирные кривые) каналов образования данной молекулы.



Рисунок 21. Значения удельных скоростей нагрева/охлаждения N₂-O₂ атмосферы экзопланеты земного типа в различных случаях электронных высыпаний: *сплошные* кривые соответствуют высыпаниям с $Q_0 = 1$ эрг см⁻² с⁻¹ и тепловому каналу образования NO; *пунктирные* – 1 Q₀, нетепловой канал; *штриховые* - 10 Q₀, тепловой канал; *штрих-пунктирные* - 80 Q₀, нетепловой обозначены удельные скорости охлаждения Зеленым иветом канал. атмосферы за счет ИК излучения молекулы NO на длине волны 5.3 микрон. Коричневым цветом обозначены суммарные удельные скорости нагрева атмосферы за счет высыпания в нее электронов магнитосферного происхождения и возникающего Джоулева нагрева.

В нетепловом случае максимум скорости охлаждения примерно в 2.5 раза больше, чем в тепловом случае. С ростом Q₀ и при рассмотрении теплового канала образования NO (штриховые кривые) нагрев атмосферы за счет высыпания электронов и Джоулев нагрев начинают преобладать над

охлаждением NO. Это связано с тем, что при увеличении Q₀ рост концентрации NO имеет нелинейный характер (см., Рисунок 20), аналогичный характер имеет и скорость охлаждения. Тем временем скорость нагрева увеличивается линейным образом с ростом Q₀.

Напротив, в нетепловом случае и при более высоких потоках энергии, Q₀=80 эрг см⁻² с⁻¹ (штрих-пунктирные кривые) концентрация NO и, следовательно, скорость охлаждения существенно возрастают. Это приводит к тому, что дополнительный источник охлаждения практически уравновешивает источники нагрева.

Стоит также отметить, что полученные удельные скорости нагрева/охлаждения для расчетного варианта 3 (10 Q₀, тепловой канал) совпадают ПО порядку величины с суммарными скоростями нагрева/охлаждения из работы [167]. А скорости нагрева/охлаждения из варианта 4 (80 Q₀, нетепловой канал) значительно выше, чем суммарные скорости в [167]. Таким образом, можно заключить, что при исследовании устойчивости атмосфер экзопланет земного типа, важно также учитывать представленные дополнительные источники нагрева/охлаждения, которые отражают результат взаимодействия звездного ветра С атмосферой экзопланеты. Этот вопрос, однако, не является предметом данной работы и будет рассмотрен в дальнейших исследованиях.

Сделанные выводы справедливы и при анализе высотных профилей температуры в атмосфере, которые представлены на Рисунке 22. Как отмечалось ранее, эти оценочные профили были получены из решения стационарного уравнения теплопроводности (44) с заданными источниками нагрева/охлаждения при $F_{XUV} = 5F_{XUVO}$ из [167] и дополнительными источниками, связанными с высыпанием электронов в атмосферу. На нижней границе расчетной области, 80 км, задавалось значение температуры, взятое из ([167], Рисунок 3) на той же высоте. На верхней границе, ~1400 км (аналогично [167]), вертикальный поток теплоты был задан равным 0 (см., например, [62]).

Численное решение уравнения производилось методом трехточечной прогонки. Так как полный коэффициент теплопроводности λ_{mol} зависит от температуры, решение также уточнялось методом простой итерации.

Распределение температуры в атмосфере было получено для 4-х вариантов высыпания электронов. Палитра цветов соответствует Рисунку 19.



Рисунок 22. Высотные профили температуры в N₂-O₂ атмосфере экзопланеты земного типа, находящейся под воздействием XUV потока, $F_{XUV0}=5F_{XUV0}$ и различных потоков высыпающихся магнитосферных электронов: Q₀=1 эрг см⁻²с⁻¹ (*синие и красные штриховые кривые*); 10 Q₀ (*синие сплошные кривые*); 80 Q₀ (*красные сплошные кривые*). Во всех случаях характеристическая энергия высыпающихся электронов, E₀ = 4 кэВ. Синий цвет кривых соответствует тепловому каналу образования NO, *красный* цвет – нетепловому каналу образования данной молекулы. Цвет и стиль кривых соответствует Рисунку 19. Для построения рисунка использовались профили нагрева/охлаждения из [167] при F_{XUV} = 5F_{XUV0} - черная кривая. А также дополнительные источники нагрева/охлаждения, возникающие при сильных высыпаниях электронов в атмосферу (Рисунок 21).

Сплошной черной кривой на Рисунке 22 показан профиль температуры, полученный с использованием источников/нагрева охлаждения, взятых только из работы [167]. Сравнение же с высотным профилем температуры из этой работы показало среднюю относительную ошибку в 10%. Основное отличие решений наблюдается на высотах <140 км. В районе термопаузы, >200 км, температура практически полностью соответствует данным из [167]. Напомним, что в работе [167] для определения температуры самосогласованно решается нестационарное уравнение энергии. В данной работе только для оценки вклада дополнительных источников нагрева/охлаждения, было рассмотрено стационарное уравнение теплопроводности (44) [193].

Из Рисунков 21 и 22 следует, что при рассмотрении нетеплового канала образования NO, ИК излучение NO может вносить большой вклад в энергетику атмосферы. Это может привести к заметному охлаждению атмосферы при невысоких потоках $Q_0 = 1$ эрг см⁻² с⁻¹ (красная штриховая кривая на Рисунке 22) по сравнению с тепловым случаем (синяя штриховая кривая).

При сильных высыпаниях электронов с $Q_0 = 80$ эрг см⁻² с⁻¹ нетепловое образование NO способствует установлению относительного «равновесия» в атмосфере между нагревом и охлаждением. В этом случае наблюдается увеличение температуры ~ в 1.8 раз. Аналогичное увеличение температуры возможно и в тепловом случае, но при $Q_0 = 10$ эрг см⁻² с⁻¹.

Во всех рассмотренных вариантах 1-4 температура в атмосфере не превышает начальную (при $F_{XUV} = 5 F_{XUV\odot}$) в более чем 2 раза. Таким образом, было принято, что предположение о неизменности структуры атмосферы допустимо для представленных расчетных вариантов.

Стоит отметить, что аналогичные оценки теплового баланса были также сделаны для экзопланеты земного типа, которая находится под воздействием XUV потока излучения родительской звезды, равного современному солнечному потоку, 1F_{XUV0}. Для этого были использованы уже посчитанные для верхней атмосферы Земли источники нагрева/охлаждения из работы [64]. В качестве граничной температуры, выше которой возможно изменение структуры атмосферы, было задано значение 3500 К. Для сравнения

температура в верхней атмосфере Земли в среднем составляет ≈ 1000 К (см., например, U.S. Standard Atmosphere [142], NRLMSIS 2.0 [131]) и может увеличиваться до 2000 К и более при воздействии различных факторов космической погоды (солнечные вспышки, КВМ). На Рисунке 23 представлены рассчитанные высотные профили температуры.



Рисунок 23. Высотные профили температуры в N₂-O₂ атмосфере экзопланеты земного типа, находящейся под воздействием XUV потока, $F_{XUV}=1F_{XUV\odot}$, и различных потоков энергии высыпающихся магнитосферных электронов: Q₀ = 1 эрг см⁻² с⁻¹, тепловой случай(*синие штриховые кривые*); 5 Q₀, тепловой случай (*синие сплошные кривые*); 80 Q₀ нетепловой случай (*красные сплошные кривые*). Для построения рисунка использовались профили нагрева/охлаждения из [64] при $F_{XUV} = 1F_{XUV\odot}$ - черная кривая.

Черной сплошной кривой показан профиль температуры, рассчитанный с использованием источников/нагрева охлаждения из работы [64]. Сравнение с высотным профилем температуры из этой работы показало среднюю относительную ошибку в 16%. Из полученных результатов следует, что предельные потоки высыпающихся электронов, при которых температура увеличивается не более чем до 3500К, составляют: а) $Q_0 = 5$ эрг см⁻² с⁻¹ в

Глава 4. Возможность обнаружения NO с помощью КТ Спектр-УФ

Основная цель данной Главы заключается в том, чтобы исследовать возможность обнаружения молекулы-биомаркера NO в атмосферах экзопланет с помощью КТ Спектр-УФ. И определить условия, при которых такое обнаружения возможно. А также сформировать список экзопланет, наиболее подходящих для поиска NO с КТ Спектр-УФ. Для решения этих задач в данной Главе вычисляется время накопления сигнала, необходимое для регистрации у-полос NO в предполагаемых N₂–O₂ доминантных атмосферах экзопланет с заданным отношением S/N. В качестве методов регистрации сигнала рассматриваются эмиссионная и трансмиссионная спектроскопия. Расчеты проводятся использованием: а) моделей излучения и пропускания света в данных полосах (см. Раздел 2.2); б) модели расчета S/N (см. Раздел 2.3); в) результатов моделирования образования NO в атмосферах экзопланет (см. Главу 3). При проведении расчетов предполагается, что для надежной регистрации NO, отношение S/N в у-полосах должно быть не меньше 3. Из практических соображений также ограничено суммарное наблюдательное время 120 - 200 часами (соответствует \approx 5-8 орбитам КТ Спектр-УФ или \approx 5-8 суткам).

Глава организована следующим образом: В Разделе 4.1 описаны рассматриваемые в работе планетные системы, модельные и реальные экзопланеты – родительские звезды, для которых определяется возможность обнаружения NO; В Разделе 4.2 представлены результаты расчетов наблюдательного времени, необходимого для регистрации γ-полос NO на экзопланетах в 3ПО у спокойных звезд солнечного-типа, если условия в их атмосферах схожи с условиями в земной атмосфере. Представлено сравнение возможностей методов трансмиссионной и эмиссионной спектроскопии для обнаружения NO. В разделе 4.3 исследуются условия, при которых обнаружение NO с помощью КТ Спектр-УФ может быть возможно. Представлены результаты расчетов наблюдательного времени, необходимого для регистрации γ-полос NO на экзопланетах у активных звезд с XUV потоками ≥ 5F_{XUV☉}. Определены предельные расстояния до планетных систем, при которых обнаружение NO становится возможным с S/N = 3 за разумное время наблюдений, t = 120 часов. Предложен коронограф для регистрации γ-полос NO методом эмиссионной спектроскопии. В Разделе 4.4 представлены результаты расчетов предельных расстояний для обнаружения NO (методом трансмиссионной спектроскопии) на экзопланетах, которые подвержены интенсивным высыпаниям электронов с потоком энергии 80 эрг см⁻² с⁻¹ и потоку жесткого XUV, равного 5F_{XUV☉}. Представлен список экзопланет, наиболее подходящих для поиска NO с помощью KT Спектр-УФ.

4.1. Экзопланеты и звезды

4.1.1 Экзопланеты

В данной работе проводятся параметрические расчеты наблюдательного времени, необходимого для обнаружения молекулы NO, для разных модельных и реальных экзопланет.

а) Модельные экзопланеты

В качестве модельных экзопланет рассматриваются: экзо-земли (1 R_E , 1 M_E), супер-земли (2 R_E , 4 M_E), суб-нептуны-1 (3 R_E , 8 M_E) и суб-нептуны-2 (4 R_E , 15 M_E). Ускорение силы тяжести на поверхности этих планет практически такое же (в пределах 12%) как на Земле. Как и ранее (см. Раздел 3.1), для этих экзопланет делается важное предположение о том, что у них сформировалась N_2 – O_2 атмосфера, схожая по составу и физическим условиям с атмосферой Земли.

Важно отметить, что масса рассматриваемых модельных суб-нептунов слишком высока, чтобы гарантировано потерять первичную атмосферу в зоне потенциальной обитаемости. Так, в работах [200,201] было показано, что потеря первичной H-He атмосферы с большой вероятностью возможна в первые 100 млн. лет лишь у экзопланет с массой < 1.5 – 2 M_E, находящихся в

ЗПО у звезд с F_{XUV} < 100F_{XUV☉}. При бо́льших потоках XUV излучения, которым подвержены более массивные суб-нептуны (> 5M_E) и нептуны, находящиеся на близких к звезде орбитах (существенно ближе, чем ЗПО), потеря первичной водородной атмосферы все же возможна за счет эффекта фотоиспарения (интенсивный отток атмосферы за счет нагрева XUV излучением) [202–206]. Можно, тем не менее, предположить варианты, при которых суб-нептуны рассматриваемых масс могут потерять свою первичную атмосферу и при этом находиться в ЗПО. Эти варианты связаны с орбитальной динамикой экзопланет и описаны в [201]: а) суб-нептун может мигрировать изза пределов ЗПО на близкую к звезде орбиту (проскочив ЗПО), потерять первичную атмосферу за счет эффекта фотоиспарения и затем мигрировать в ЗПО; б) если два горячих суб-нептуна имеют резонансные орбиты, то планеты могут «оттолкнуться», в результате чего орбита внутренней планеты будет затухать, а внешняя планета отойдет на бо́льшую орбиту. Т.е. потенциально возможен случай, когда горячий суб-нептун потеряет первичную атмосферу и перейдет в область ЗПО [201]. В рамках рассматриваемого предположения о наличии N₂-O₂ атмосферы на суб-нептунах, находящихся в ЗПО, нельзя также исключать случая, когда в сохранившейся водородной атмосфере суб-нептуна возможно одновременное присутствие молекул N2 и O2 с возможностью Вообще, протекания химии нечетного азота. эволюция атмосфер рассматриваемых модельных экзопланет является сложным процессом, зависящим от многих факторов (звездный XUV поток, звездный ветер, вспышки и КВМ, орбитальная динамика и др.), а ее исследование выходит за рамки данной работы. Принятое предположение, в свою очередь, является приемлемым для проведения параметрических расчетов с целью определить потенциальные цели для поиска биомаркера NO.

Для моделирования излучения и пропускания NO мы выполнили масштабирование содержаний атмосферных компонентов для модельных экзопланет. На этом шаге концентрации молекул изменялись пропорционально
отношению масс атмосфер планет к массе атмосферы Земли, $M_{Atm_{pl}}/M_{Atm_{E}}$. Массы атмосферы Земли и планет вычислялись из соображения гидростатического равновесия, согласно [207], для двух различных значений начальной плотности: 1) на уровне моря, 1,2255 кг/м³ при p₀ = 101325 Па; 2) в 1.75 раза больше при p₀ = 175310 Па. В таблице 6 представлены вычисленные значения масс $M_{Atm_{pl}}$, а также значения $M_{Atm_{pl}}/M_{Atm_{E}}$.

При расчете излучения NO в ү-полосах важно знать лучевую концентрацию этой молекулы, N_{NO} (27), вдоль вертикального луча зрения. Поэтому для рассматриваемых модельных экзопланет были определены возможные диапазоны N_{NO}. Они представлены в Таблице 6. В качестве нижнего предела для экзо-земель было установлено значение N_{NO} 1×10¹⁵ см⁻². Это среднее значение лучевой концентрации NO в атмосфере Земли при высокой геомагнитной активности (Ар индекс > 12, Рисунок 3), определенное по данным наблюдений спутника SNOE [9]. Напомним, что при высокой NO геомагнитной активности концентрация В земной атмосфере увеличивается как в полярных, так и в экваториальных широтах (см. Раздел 1.2, Рисунок 4). И средняя концентрация NO по поверхности Земли может определяться высыпаниями энергичных электронов. В качестве верхнего предела для экзо-земли было задано значение $N_{NO} = 3 \times 10^{16}$ см⁻². Оно было рассчитано на основе результатов работы [84], в которой авторы производили нестационарные вычисления объемной концентрации NO для сильных авроральных высыпаний. С учетом отношения MAtmnl/MAtmE в Таблице 6 указан диапазон значений N_{NO} для экзо-земель 1×10¹⁵ см⁻² - 5×10¹⁶ см⁻². Для остальных модельных экзопланет эти концентрации также масштабировались с учетом отношения $M_{Atm_{pl}}/M_{Atm_{E}}$.

Стоит отметить, что в последующих расчетах содержания NO с помощью модели ANOD было определено, что для экзо-земли значение N_{NO} из Таблицы 6, равное 5×10¹⁶ см⁻² достигаются при высыпании электронов

характеристической энергии $E_0 = 4$ кэВ с потоком энергии $Q_0 = 1$ эрг см⁻² с⁻¹ (нетепловой случай).

		Диапазон	
Наименование планеты	Диапазон	значений	Диапазон
	отношений	масс	лучевых
	M _{atmpl}	атмосфер	концентраций
	M_{atm_E}	$M_{atm_{pl}}, 10^{18}$	NO, 10^{15} cm ⁻²
		КГ	
экзо-Земля: 1R _E , 1 M _E	1 - 1.75	5.14 - 9.04	1-50
супер-Земля (SE): 2R _E , 4 M _E	4 – 7	20.6 - 36.1	4 - 400
суб-нептун-1 (Sn1): 3R _E , 8 M _E	10.4 - 18	53.5 - 92.7	10 -1000

Таблица 6. Диапазоны отношений масс атмосфер модельных экзопланет к массе земной атмосферы и диапазоны лучевых концентраций NO

б) Реальные экзопланеты

Одной из главных целей данной работы является формирование списка экзопланет, наиболее подходящих для поиска NO с КТ Спектр-УФ. Поэтому для дальнейших расчетов мы отобрали несколько подтвержденных экзопланет из каталога NASA Exoplanet Archive²⁷ (NEA), находящихся в ЗПО у своих родительских звезд, и отстоящих от Земли на расстоянии < 10 пк.

Первоначально, мы рассматривали экзопланеты, которые находятся в центре ЗПО или рядом с ним (в пределах 25%). Большая полуось орбиты в центре ЗПО, a_{HZ}^{28} , рассчитывалась согласно [144]. Предполагая, что рассматриваемые планеты обладают альбедо таким же, как у Земли, и имеют схожий парниковый эффект, a_{HZ} может быть вычислено следующим образом [144]:

$$a_{\rm HZ} = \left(\frac{T_{\rm st}}{T_{\rm Sun}}\right)^2 \left(\frac{R_{\rm st}}{R_{\rm Sun}}\right) \tag{47}$$

²⁷ URL: <u>https://exoplanetarchive.ipac.caltech.edu/</u> (дата обращения: 20.01.2025)

²⁸ HZ - Habitable Zone

Орбитальный период планеты в центре ЗПО в случае круговой орбиты вычисляется, как $P_{HZ} = 365.25 \times 24 \times (a_{HZ})^{\frac{3}{2}} \left(\frac{M_{st}}{M_{Sun}}\right)^{-\frac{1}{2}}$ [144].

Впоследствии среди выбранных экзопланет были выделены те, которые входят в оптимистичную ЗПО²⁹. Границы данной зоны для родительских звезд разных спектральных классов были определены с помощью модели [208]. Для этого использовался программный код VPlanet³⁰ [209], позволяющий воспроизводить результаты [208] (см. Рисунок 7b в [208]). При этом в [208] не учитывается эллиптичность орбит экзопланет.

Наконец, мы также проанализировали каталог экзопланет [7], находящихся в ЗПО, в котором учитывается эллиптичность орбит. Согласно этому каталогу, в пределах 100 пк существует 35 планетных систем, в которых экзо- и супер-земли и суб-нептуны находятся в пределах консервативной³¹ или оптимистичной ЗПО. Мы нашли 5 пересечений с этим каталогом по следующим экзопланетам: Proxima Cen b, GJ 514 b, HD 192310 c, GJ 832 c, GJ 1061 d. Впоследствии, используя полученные (см. Раздел 4.3, 4.4) критерии для планетных систем, в которых потенциально можно обнаружить NO, мы также расширили список следующими экзопланетами: HD 31527 d, HD 10180 g, HD 102365 b, HD 69830 b, HD 216520 c из каталога [7].

Полный перечень рассматриваемых в работе экзопланет и их параметры представлены в Таблице 7 и на Рисунке 24. Для всех реальных экзопланет, как и ранее, предполагается наличие N₂–O₂ атмосферы и производится масштабирование концентраций атмосферных компонентов в соответствии с рассмотренными ранее предположениями.

²⁹ Внутренняя и внешняя границы оптимистичной ЗПО соответствуют недавнему состоянию Венеры и раннему Марсу, соответственно, когда на поверхности этих планет могла существовать вода в жидкой форме [2,7,208].

³⁰ URL: <u>https://github.com/VirtualPlanetaryLaboratory/vplanet</u> (дата обращения: 20.01.2025)

³¹ Нижняя и верхняя граница консервативной ЗПО определяется эффективностью парникового эффекта [7,208]. На внутренней границе ЗПО сильный парниковый эффект приводит к разогреву поверхности планеты и испарению воды. На верхней границе ЗПО дополнительный прирост парникового газа CO₂ не приводит к дополнительному нагреву поверхности, CO₂ может конденсироваться на поверхность [7,208].

Планета	Радиус, R _E	Расстояние, пк	Тип звезды	a, a.e.
Proxima Cen b	1.08	1.3	M5.5V	0.0485
Tau Cet e	1.81	3.603	G8	0.538
GJ1061 d	1.64	3.67	M5.5	0.054
GJ687 b	4.32	4.549	M3V	0.163
GJ 832 c	2.18	4.964	M1.5V	0.163
GJ682 c	2.89	5.007	M3.5V	0.176
GJ 229 A c	2.6	5.756	M1V	0.339
HD 20794 e	2.03	6.003	G8	0.509
GJ667 C e	1.45	7.243	M1.5V	0.213
GJ 514 b	2.13	7.618	M0.5-1V	0.422
HD 192310 c	5.3	8.797	K2V	1.18
GJ 433 d	2.14	9.064	M2V	0.178
HD 102365 b	3.95	9.28	G3/5V	0.46
GJ357 d	2.34	9.44	M2.5V	0.204
HD 69830 d	4.36	12.55	G8	0.63
HD 216520 c	2.9	19.55	K0V	0.528
HD 31257 d	3.5	38.447	G2V	0.81
HD 10180 g	4.9	38.961	G1V	1.427

Таблица 7. Параметры реальных экзопланет, рассматриваемых в работе.

4.1.2 Звезды

При расчете излучения NO в γ-полосах (27-28), полезного сигнала от звезды (38), отношения S/N для регистрации спектральных линий молекул (37, 43) важно знать поток звездного излучения в ближнем УФ диапазоне. Излучение звезд спектральных классов G-M в этом диапазоне (170 – 320 нм) в основном формируется в фотосфере [186]. Поток теплового излучения более холодных звезд M-K классов в данном спектральном диапазоне значительно меньше, чем у звезд солнечного типа. Поэтому спектральные наблюдения этих звезд в рассматриваемом диапазоне с высоким разрешением затруднены и проводятся только для ближайших звезд [210].



Рисунок 24. Зона потенциальной обитаемости для звезд разных масс. Рисунок построен с помощью кода VPlanet [209]. Крестиками нанесены экзопланеты земного типа (из Таблицы 7), для которых в данной работе исследуется возможность обнаружения биомаркера NO.

В данной работе для параметрических расчетов наблюдательного времени используются реальные спектры родительских звезд разных спектральных классов: Солнце (G2V), HD 22049 (K2V), GJ 644 (M3V), AD Leo (M4.5V), Proxima Cen (M5.5V), взятые с веб-сайта VPL³² [211–213], а также спектр GJ 832 (M1.5V) из базы данных MUSCLES³³ [214]. Спектры этих звезд представлены на Рисунке 25. Они масштабированы согласно [40] так, чтобы поверхностная температура модельной планеты, находящейся в ЗПО у данных

113

³² URL: <u>https://vpl.astro.washington.edu/spectra/stellar/</u> (дата обращения: 20.01.2025)

 $^{^{33}}$ Была использована версия 2.2 адаптированного панхроматического спектра звезды с разрешением в 1 Å из базы данных MUSCLES

звезд, была равна 288.15 К. Коэффициенты масштабирования были взяты из работы [40].



Рисунок 25. Спектры реальных звезд, рассматриваемых в данном исследовании, масштабированные так, чтобы поверхностная температура модельных планет, находящихся в ЗПО у этих звезд, достигала 288.15 К. На верхней панели представлен УФ и ИК спектр в линейном масштабе, на нижней панели представлен УФ спектр в логарифмическом масштабе.

Для звезд HD 192310 (K2V), HD 10180 (G1V), HD 31527 (G2V), которые являются родительскими звездами рассматриваемых реальных экзопланет, на момент проведения исследований отсутствовали измеренные спектры. В связи с этим мы воспользовались каталогом [215] с фотометрическими данными космической миссии GALEX [216] для родительских звезд в ближнем и

дальнем УФ диапазонах³⁴. С помощью программы galex_motion³⁵ [215] были определены сигналы (отсчеты/с) от рассматриваемых звезд в ближнем УФ диапазоне (полоса 170-300 нм), откорректированные за собственное движение звезд и нелинейные эффекты приемника. Используя затем преобразования отсчеты/с в $\frac{3 \text{рг}}{\text{см}^2 \text{A}}^{36}$, были определены средние спектральные потоки от данных родительских звезд на эффективной длине волны $\lambda_{\text{eff}} = 231.5$ нм, которые применялись в расчетах.

Также в предположении: 1) об отсутствии сильной активности звезд в ближнем УФ диапазоне; 2) об отсутствии влияния хромосферной эмиссии в спектральном диапазоне λ > 170 нм [186] были добавлены спектры звезд М5 — M0, K2, G8, G1 спектральных классов, аппроксимированные функцией Планка. Похожие предположения были сделаны в работах [15,144]. Безусловно данные предположения являются грубыми, особенно для УФ диапазона. Однако они приемлемы для параметрических расчетов, проводимых в данном исследовании.

На Рисунке 26 представлены средние потоки в центре ЗПО от рассмотренных звезд в спектральном диапазоне 180 - 250 нм. При анализе данного Рисунка стоит учитывать, что расстояния до центров ЗПО разные для звезд разных спектральных классов (см., выражение 47). Из данного следуют довольно существенные различия между реальными и чернотельными спектрами звезд.

³⁴ URL: <u>https://cdsarc.cds.unistra.fr/viz-bin/cat/J/ApJ/890/23</u> (дата обращения: 20.01.2025)

³⁵URL: <u>https://github.com/parkus/galex_motion</u> (дата обращения: 20.01.2025)

³⁶URL: <u>https://asd.gsfc.nasa.gov/archive/galex/FAQ/counts_background.html</u> (дата обращения: 20.01.2025)



Рисунок 26. Средние потоки от родительских звезд в ЗПО в диапазоне длин волн 180-250 нм. Различные цвета точек соответствуют различным спектральным классам звезд.

4.2 Методы трансмиссионной и эмиссионной спектроскопии для обнаружения NO на экзопланетах

Для определения возможности обнаружения молекулы-биомаркера NO в атмосферах экзопланет с помощью КТ Спектр-УФ были произведены параметрические расчеты наблюдательного времени, необходимого для регистрации γ -полос NO с S/N = 3 методами эмиссионной и трансмиссионной спектроскопии. Стоит отметить, что отношение S/N рассчитывалось для каждой электронно-колебательной γ -полосы NO, рассматриваемой в работе (см., например, Таблицу 3), после чего определялось среднее из полученных значений. Расчеты были сделаны для: различных модельных и реальных экзопланет (см. Таблицы 6 и 7); различных типов родительских звезд (см. Рисунок 26); разных расстояний до планетных систем. Далее представлены результаты расчетов.

а) Трансмиссионная спектроскопия

Используя построенную модель пропускания света звезды в атмосфере планеты (см. Раздел 2.2.1) и параметры спектрографа СДЩ, была определена эффективная высота атмосфер рассматриваемых модельных экзопланет. Данные вычисления были произведены для определенного ранее диапазона лучевых концентраций NO (Таблица 6) с учетом масштабирования, описанного ранее. На Рисунке 27 представлены результаты данных вычислений для: экзо-земель ($N_{NO}^{37} = 5 \times 10^{16} \text{сm}^{-2}$); супер-земель ($N_{NO} =$ 4×10^{17} см⁻²); суб-нептунов-1 (N_{NO} = 1×10^{18} см⁻²); суб-нептунов-2 (N_{NO} = 2×10^{18} см⁻²). Для сравнения на рисунок добавлены результаты для субнептунов-2 с $N_{NO} = 1 \times 10^{19} \text{сm}^{-2}$. Увеличение N_{NO} до этого значения было сделано из предположения о влиянии дополнительных источников пополнения NO в верхней атмосфере (за счет увеличения потока высыпающихся электронов [78], нетеплового образования NO [111], [A4], Джоулева нагрева в верхней атмосфере [91], биологической и геологической активности на экзопланете). Детальное исследование влияния первых двух источников на изменение концентрации NO представлено в Главе 3. Последующие расчеты показали, что достижение такого значения лучевой концентрации возможно при потоке энергии электронов $Q_0 = 20$ эрг см⁻² с⁻¹ и реализации нетеплового канала образования NO (без учета нагрева атмосферы), т.е. если атмосфера планеты подвержена более продолжительным высыпаниям электронов, чем Земля. Влияние других источников будет исследовано в последующих работах.

На рисунке также идентифицированы некоторые спектральные линии, рассматриваемые в работе. До 200 нм доминирующую роль в поглощении света занимает молекулярный кислород (система полос Шумана-Рунге). Также незначительное влияние на формирование эффективной высоты в данном спектральном диапазоне (<200 нм) оказывает поглощение молекул N₂O, NO₂, SO₂ и рэлеевское рассеяние [37]. С другой стороны спектрального диапазона минимум поглощения света озоном в полосах Хартли достигается на 210 нм [66]. Таким образом, в диапазоне образования γ-полос NO находится

³⁷ Подчеркнем, что вертикальная лучевая концентрация N_{NO} является лишь параметром, удобным для анализа результатов. Расчет эффективной высоты производится в соответствии с формулой (33).

своеобразное окно, где данные полосы практически не блендируются при высоком содержании NO.



Рисунок 27. Эффективная высота для модельных экзопланет: экзо-земель (зеленые линии), супер-земель (синие линии), суб-нептунов-1 (черные линии), суб-нептунов-2 с лучевой концентрацией NO 1×10^{19} см⁻² (штриховые серые линии). На Рисунке отмечены спектральные признаки, которые оказывают влияние на эффективную высоту. Рэлеевское рассеяние обозначается «Rayl.». Результат представляет собой свертку с разрешением спектрографа СДЩ, R = 1000.

На Рисунке 28 представлены рассчитанные значения глубины транзита, $f_A = \frac{F_{out} - F_{in}}{F_{out}}$, учитывающие вклад только от атмосферы планеты (см. выражение (34)). В качестве экзопланеты рассмотрена модельная супер-земля (2R_E) с N_{NO} =4 × 10¹⁷ см⁻² (верхний предел в Талице 6) в верхней атмосфере. Используются параметры следующих звезд: Солнце (G2V), HD192310 (K2V), AD Leo (M4.5V), Proxima Cen (M5.5V).

Из Рисунка 28 следует, что наибольшие значения глубины транзита в рассматриваемом спектральном диапазоне достигаются для супер-земли, родительской звездой которой является маломассивная звезда Proxima Cen (M5.5V). При этом наименьшие значения глубины транзита получены для

планетной системы с звездой солнечного типа. Это связано с различием радиусов рассматриваемых звезд. Отметим, что в проведенных расчетах влияние спектра звезды на химический состав атмосферы не учитывался. Это является предметом дальнейших исследований.



Рисунок 28. Значения глубины транзита для модельных планетных систем супер-земля (2 R_E , $N_{NO} = 2 \times 10^{17}$ см⁻²) - Солнце (G2V), HD192310 (K2V), AD Leo (M4.5V), Proxima Cen (M5.5V). Палитра цветов соответствует Рисунку 26.

На основе полученных результатов для эффективной высоты атмосферы (Рисунок 27) и глубины транзита (Рисунок 28) были даны оценки возможности обнаружения сигнала трансмиссии в γ-полосах NO для исследуемых модельных планетных систем. Удобно провести анализ данных результатов, используя значения предельных расстояний до планетных систем, при которых регистрация γ-полос NO возможна за разумное наблюдательное время (≤ 120 часов) при S/N = 3. Предельные расстояния представлены в Таблице 8. Результаты были получены для следующих значений N_{NO} в атмосферах модельных экзопланет: для супер-земли - 4×10^{18} см⁻²; для суб-нептунов-2 - 1×10^{19} см⁻². Как было указано ранее, данные значения на 1 порядок величины больше верхних пределов N_{NO} (Таблица 6) и получены из предположения о влиянии дополнительных источников образования данной молекулы (так, например, такая лучевая концентрация может быть достигнута при потоке энергии высыпающихся электронов Q₀ = 20 эрг см⁻² с⁻¹ и реализации нетеплового канала образования NO, без учета нагрева атмосферы). При использовании значений N_{NO} из Таблицы 6 предельные расстояния до рассматриваемых планетных систем не превышают 1 пк. Наилучший результат был получен для планетной системы суб-нептун-2 – звезда солнечного типа и составил 1 пк.

Таблица 8. Предельные расстояния до разных модельных планетных систем для наблюдения пропускания NO в системе γ-полос с помощью КT Спектр-УФ при S/N = 3, времени наблюдений ≤ 120 ч.

Родительская	Граничные расстояния ¹ , пк			
звезда	SE ² , 4×10^{18} cm ⁻²	Sn-1 ² , 1×10 ¹⁹ см ⁻²	Sn-2 ² , 1×10 ¹⁹ см ⁻²	
G1	<1 ^{a,b}	1ª(<1 ^b)	$2^{a}(1^{b})$	
Солнце	<<1 ^j	1ª (<1 ^j)	$2^{a}(1^{j})$	
G8	<<1 ^a	1 ^a	1 ^a	
K2	<<1 ^{a, c, d}		1 ^{a,d} (<1 ^c)	

^а используется чернотельный спектр;

^b используется средний поток GALEX для HD 10180 (G1V)

^с используется спектр HD 22049 (K2V)

^d используется средний поток GALEX для HD 192310 (K2V)

^ј используется спектр Солнца (G2V)

¹ Обозначение «<<1 пк» соответствует расстояниям, меньшим 0.1 пк

² Обозначения см. в Таблице 6

Из полученных результатов следует, что при данных условиях в предполагаемых N₂-O₂ атмосферах экзопланет наибольшее предельное

расстояние для регистрации NO составляет 2 пк (для суб-нептунов-2 в 3ПО у звезд солнечного типа). При этом в пределах 2-х пк не было обнаружено планетных систем с суб-нептунами, находящимися в пределах 3ПО (см., например, [7]).

Кроме того, вычисления наблюдательного времени были сделаны и для реальных экзопланет, представленных в Таблице 7. Наилучшие результаты были получены для планеты HD 192310 с (d = 8.797 пк, R = $5.3R_E$, a = 1.18 a.e., звезда K2V спектрального класса). Время экспозиции для регистрации сигнала трансмиссии NO с S/N = 3 составило: 450 сут. - при использовании чернотельного спектра; 510 сут. - для среднего потока GALEX для HD 192310; 8000 сут. - для спектра HD 22049 (K2V).

б) Эмиссионная спектроскопия

С помощью модели излучения NO в γ -полосах (выражения 27-29, с учетом эффекта самопоглощения 30-32) и методики расчета S/N (43) были вычислены значения времени накопления сигнала, необходимого для регистрации излучения в γ -полосах NO с S/N \geq 3. В качестве основного измерительного прибора рассматривался спектрограф СДЩ КТ Спектр-УФ (описание параметров представлено в Таблице 5, сравнение с другими спектрографами КТ Спектр-УФ представлено в Разделе 2.3).

Вычисления были произведены для модельных планетных систем, рассмотренных в Таблице 8 в целях сравнения с методом трансмиссионной спектроскопии. При этом в расчетах учитывалось неравномерность излучения по диску планеты и резонансное самопоглощение в γ -полосах (см. Рисунок 10). Средняя температура в верхней атмосфере задавалась равной 1000 К (как в термосфере Земли). В качестве вертикальной лучевой концентрации NO на рассматриваемых планетных системах было задано значение N_{NO} = 2 × 10^{17} см⁻², так как при этом значении достигается наибольший поток излучения от планеты. При бо́льших N_{NO} I_{pl} падает из-за эффекта резонансного самопоглощения.

Согласно полученным результатам, для всех представленных в Таблице 8 планетных систем предельные расстояния для регистрации излучения NO в γ -полосах с S/N = 3 не превышают 1 пк. В наилучшем модельном случае, когда рассматривается планетная система суб-нептун-2 – звезда солнечного типа, предельные расстояния не превышают 0.03 пк.

Параметрические расчеты были также произведены и для реальных экзопланет, представленных в Таблице 7. Согласно полученным результатам, наблюдательное время для обнаружения излучения NO также значительно превышает разумное (120 часов) для всех рассмотренных случаев.

в) Анализ результатов

Прежде всего из полученных результатов следует, что использование метода трансмиссионной спектроскопии для регистрации γ-полос NO с помощью спектрографа СДЩ КТ Спектр-УФ является более эффективным подходом, чем поиск сигнала эмиссии в данной системе полос. Пояснить данный вывод можно из сравнения выражений для расчета S/N при рассмотрении методов трансмиссионной (выражение 37) и эмиссионной спектроскопии (выражение 43). Как отмечалось ранее, контраст в сигналах от звезды во время первичного транзита и вне его для метода трансмиссионной спектроскопии пропорционален $C_{\rm T} = \frac{R_{\rm pl}^2}{R_{\rm rt}^2}$ (34), а в методе эмиссионной спектроскопии контраст в сигналах звезды и планеты равен $C_E = \frac{I_{pl} R_{pl}^2}{I_{at} R_{at}^2}$. Из сравнения этих двух величин следует, что метод трансмиссионной спектроскопии является более эффективным транзитным методом для решения рассматриваемой задачи. Понятно, что при рассмотрении излучения NO в случае оптически тонкой среды рост интенсивности Inl будет происходить пропорционально лучевой концентрации данной молекулы (27). Однако учет резонансного самопоглощения в γ -полосах (30) приведет к тому, что соотношение С_Е будет существенно меньше соотношения С_Т.

Из полученных результатов также следует, что существуют ограничения на обнаружение молекулы NO на экзопланетах, условия в атмосферах которых относительно схожи с земными. Обнаружение NO с помощью спектрографа СДЩ КТ Спектр-УФ возможно только на супер-землях (2 R_E) и суб-нептунах (3, 4 R_E), которые находятся в ЗПО у звезд солнечного типа, если расстояние до данных планетных систем ≤ 1 пк. Наблюдательное время для обнаружения NO на реальных экзопланетах (Таблица 7) значительно превышает разумное (120 – 200 часов).

Рассмотрим факторы, которые могут повлиять на улучшение условий для обнаружения NO. Их можно определить из анализа выражений для вычисления S/N (37, 43):

- 1) Если планета находится в ЗПО у более активной или молодой звезды чем Солнце, она может быть подвержена высоким потокам XUV излучения. Высокий XUV поток приводит к дополнительному нагреву атмосферы и ее последующему расширению, что может способствовать увеличению глубины транзита, $R_{pl}^2/R_{st}^2 = f(\lambda)$, и, как следствие, приведет к увеличению отношения S/N.
- 2) Очевидно, что помимо расширения атмосферы планеты вследствие ее нагрева, значимым фактором для регистрации NO в УФ диапазоне длин волн также является высокое содержание этой молекулы в верхней атмосфере. Если планета находится в ЗПО у звезды с высоким потоком звездного ветра, который приводит к интенсивным высыпаниям электронов и росту содержания NO, то шансы обнаружить NO в атмосфере этой планеты могут увеличиться.
- Для метода эмиссионной спектроскопии проблема небольшого контраста С_Е может быть решена на инструментальном уровне путем использования коронографа.

Указанные факторы детально исследуются в следующих Разделах (В Разделе 4.3 – факторы 1 и 3; в Разделе 4.4 – факторы 1 и 2).

4.3 Возможность обнаружения NO на экзопланетах у звезд с высокими XUV потоками

а) Трансмиссионная спектроскопия

Проанализируем выражения (33-34, 37), с помощью которых можно оценить шансы для обнаружения атомов и молекул в атмосферах экзопланет. Согласно этим выражениям, увеличение S/N_{pl} для регистрации молекулы на экзопланете возможно при большом значении эффективной высоты ее атмосферы $h_{eff}(\lambda)$, т. е. при наличии у данной экзопланеты расширенной и плотной атмосферы. В рамках рассматриваемой задачи уровень атмосферы, где $\tau \approx 1$ в районе образования у-полос NO, составляет: 115 км - для суперземель (N_{NO} = 4×10^{17} см⁻²); 145 км - для суб-нептунов-1 (N_{NO} = $1 \times$ 10^{18} см⁻²); 155 и 185 км - для суб-нептунов-2 (N_{NO} = 2 × 10^{18} см⁻² и N_{NO} = 1 × 10¹⁹см⁻²). Из первичных соображений увеличение эффективной высоты возможно за счет повышения уровня экзобазы, которая определяется из равенства H(h) = l(h) [217], где H(h) = $\frac{kT}{ug}$ - шкала высот, l(h) = $(\sqrt{2}\sigma n)^{-1}$ средняя длина свободного пробега упругих сферических молекул в простом равновесном газе [218]. Повышение уровня экзобазы возможно за счет увеличения температуры и, как следствие, расширения атмосферы планеты. Температура в верхней атмосфере планеты во многом зависит от XUV потока излучения родительской звезды (см., например, рисунки 1, 3 в [167]; рисунок 2 в [4]). Соответственно на температуру может влиять: орбитальное расстояние экзопланеты (в пределах ЗПО), активность родительской звезды, ее спектральный класс, возраст, вращение. Для более активных звезд температура в верхней атмосфере будет более высокой, что может способствовать образованию более плотной и расширенной атмосферы.

Стоит отметить, что XUV поток, приходящий на планету от звезды, также является важным параметром при определении потенциальной обитаемости. Этот поток излучения влияет на ионизацию, нагрев, убегание атмосферы и, как следствие, на ее устойчивость и эволюцию (например, переход от первичной атмосферы к вторичной или полная потеря атмосферы). На настоящий момент существует несколько моделей, с помощью которых можно исследовать устойчивость N₂-O₂ атмосфер у экзопланет земного типа (см., например, [64,167]). Так, согласно расчетам по модели [64], в работе [166] было показано, что при XUV потоке от родительской звезды, в 60 раз большем солнечного, возможен гидродинамический отток N₂-O₂ атмосферы, приводящий к ее потере за время < 10⁵ лет. Однако модель [167] показывает устойчивость N₂-O₂ атмосферы к таким и более высоким XUV потокам (вплоть до 1000 XUV) за счет эффективного выхолаживания атмосферы при излучении в спектральных линиях атомов. В данной работе мы использовали результаты расчетов [167] – значения температур при XUV потоке ≤ 30 XUV солнечного (см. Раздел 3).

Для проверки рассмотренной гипотезы были выполнены расчеты наблюдательного времени (аналогично расчетам в Разделе 4.2.1) в предположении о более высоких температурах (T = 3000 K, 5000 K) в верхних атмосферах исследуемых экзопланет. Согласно модели [167], такие температуры могут быть достигнуты в N₂-O₂ атмосфере при XUV потоках от звезды, в 5 и 30 раз превышающих современный XUV поток от Солнца. Такие значения XUV потока могли быть у Солнца при возрасте 2 млрд. лет и 800 млн. лет, соответственно (см., например, Рисунок 1а в [4]). Для сравнения температура в верхней атмосфере Земли в среднем составляет \approx 1000 K (см., например, U.S. Standard Atmosphere [142], NRLMSIS 2.0 [131]) и может увеличиваться до 2000 К и более при воздействии различных факторов космической погоды (солнечные вспышки, KBM).

Расчеты выполнялись в рамках предположения, что атмосфера на высотах >200 км является изотермической. Анализ высотных профилей температуры в земной атмосфере и в расчетах [167] для экзопланет у звезд с высокими XUV потоками показывает, что это предположение вполне допустимо. Таким образом, для учета нагрева мы производили дополнительное

масштабирование концентраций исследуемых атмосферных компонентов на указанных высотах в соответствии с законом Дальтона. Верхней границей атмосферы в расчете считалась та, на которой объемная концентрация NO составляла 10⁴ см⁻³ (при таких концентрациях вклад поглощения в γ-полосах NO в эффективную высоту незначителен).

Результаты расчетов предельных расстояний до планетных систем для регистрации γ-полос NO (аналогично Таблице 8) представлены в Таблице 9.

Таблица 9. Предельные расстояния до разных модельных планетных систем для обнаружения трансмиссии NO в γ -полосах со спектрографом СДЩ КТ Спектр-УФ при S/N = 3, t \leq 120, T|_{h>200км} = 3000 K и F_{XUV} = 5F_{XUV} \odot , T|_{h>200км} = 5000 K и F_{XUV} = 30F_{XUV} \odot

	Граничные расстояния, пк;					
Звезда	$T _{h>200 \text{KM}} = 3000 \text{ K}$ $F_{XUV} = 5F_{XUV} \odot$			$T _{h>200_{KM}} = 5000 K$ FXUV = 30FXUVO		
	SE ¹	Sn1	Sn2	SE	Sn1	Sn2
G1	1 ^{a,b}	4 ^a (2 ^b)	$6^{a}(3^{b})$	3 ^a (2 ^b)	8 ^a (5 ^b)	12 ^a (7 ^b)
Солнце	$\frac{1^a (<1^j)}{3^k}$	$4^{a}(2^{j}) 6^{k}$	$6^{a} (3^{j}) \\ 10^{k}$	$3^{a} (1^{j}) (5^{k})$	$9^{a} (4^{j}) $ 14^{k}	12 ^a (6 ^j) 20 ^k
G8	1 ^a	3ª	5 ^a	3ª	7 ^a	10 ^a
K2	<1 ^{a, c, d}	$2^{a}(<1^{c})$ (1 ^d)	3 ^a (<1 ^c) (2 ^d)	$2^{a}(<1^{c})$ (1 ^d)	$4^{a}(1^{c})$ (4 ^d)	$6^{a}(1^{c})$ (5 ^d)
M4-5	<1 ^{l, m} 1 ^{l, m}					

^а используется чернотельный спектр;

^b используется средний поток GALEX для HD 10180 (G1V)

^с используется спектр HD 22049 (K2V)

^d используется средний поток GALEX для HD 192310 (K2V)

^ј используется спектр Солнца (G2V)

^k используется средний поток GALEX для HD 31527 (G2V)

¹ используется спектр AD Leo (M4.5V)

^m используется спектр Proxima Cen (M5.5V)

¹ Обозначения см. в Таблице 6, NNO – в Таблице 8

Согласно полученным результатам, с ростом температуры в верхних атмосферах модельных экзопланет при воздействии на них XUV потоков

 $5F_{XUVO}$ и $30F_{XUVO}$ пределы для обнаружения NO методом трансмиссионной спектроскопии увеличиваются. Так, для супер-земель предельные расстояния достигают 3 пк (при T = 3000 K, $5F_{XUVO}$) и 5 пк (при T = 5000 K, F_{XUVO}); для суб-нептунов-1 — 6 пк (T = 3000 K) и 14 пк (T = 5000K); для суб-нептунов-2 — 10 и 20 пк, соответственно.

Стоит заметить, что полученные результаты зависят и от спектра родительской звезды. Это можно увидеть из анализа Таблиц 8, 9 и Рисунка 26. Так, наибольшие значения предельных для обнаружения трансмиссии NO расстояний достигаются для планетных систем, родительскими звездами в которых являются звезды солнечного типа. В частности, наилучшие условия для регистрации сигнала достигаются при использовании потока звезды HD 31527 (G2V), который является наибольшим в ближнем УФ диапазоне среди исследуемой выборки звезд (см. Рисунок 26, с учетом расстояния до центра 3ПО). Наблюдательное время увеличивается при рассмотрении планетных систем с маломассивными родительскими звездами. При этом регистрация сигнала за разумное наблюдательное время (< 120 часов) еще возможна при использовании спектров звезд спектрального класса K2. Однако при рассмотрении родительских звезд спектрального класса М время экспозиции превышает 120 часов наблюдений, если расстояние до планетных систем >1пк.

Увеличение температуры в верхних атмосферах при высоких XUV потоках также сказывается и на оценках возможности обнаружения NO для реальных экзопланет (Таблица 7, Рисунок 24). Проведённые расчеты показали, что регистрация NO с помощью спектрографа СДЩ КТ Спектр-УФ становится потенциально возможной для суб-нептуна HD 192310 с (5.3 R_E, d = 8.797 пк) с S/N = 3 и составляет 115 часов наблюдений (около 9 транзитов) при $T|_{h>200 \text{км}}$ =5000 K (рассматривается средний поток GALEX для HD 192310). Также при T = 5000 K и N_{NO} = 2×10¹⁸ см⁻² регистрация NO с S/N = 3 возможна в атмосфере супер-земли Tau Cet е (≈1.8 R_E, d = 3.603 пк, a = 0.538 a.e., T_d=14ч., звезда G8V спектрального класса). Наблюдательное время составляет 96 часов

(около 7 транзитов, S/N = 3, используется комбинированный спектр звезды спектрального класса G8V из атласа Pickles [219]). Стоит отметить, что данная экзопланета не входит в упомянутый ранее каталог планет, находящихся в ЗПО [7]. При этом с помощью кода VPLanet [209] мы воспроизвели результаты работы ([208], Рисунок 7b) и определили, что тСеt е входит в оптимистичную ЗПО (нижняя граница данной зоны для родительской звезды Tau Cet составляет 0.44 a.e.).

б) Эмиссионная спектроскопия

Как было показано ранее, накладываемые ограничения для регистрации излучения в γ-полосах NO являются достаточно большими ввиду эффекта резонансного самопоглощения, что делает рассматриваемый метод малоэффективным в сравнении с методом трансмиссионной спектроскопии. Из проведённых расчетов следует, что время экспозиции для регистрации излучения NO превышает 120 часов как для модельных (при d >1 пк), так и для реальных планетных систем. Тем не менее, могут существовать условия и подходы, при которых отношение S/N в γ-полосах NO может быть больше, а наблюдательное время может входить в разумные пределы (120 – 200 часов).

Экзопланеты на близких орбитах

Можно выделить несколько основных факторов, влияющих на отношение S/N для регистрации NO в γ-полосах:

1. Падающий на экзопланету поток от родительской звезды. Интенсивность излучения в атмосфере планеты (резонансное переизлучение света в γ -полосах NO) является функцией данного потока, $I_{pl} = f(F_{st})$ (28). Следовательно, S/N зависит и от орбитального расстояния экзопланеты;

2. Условия в атмосфере. Переизлученный поток от экзопланеты распространяется не только с поверхности, характеризуемой радиусом данной планеты, но и с лимба. Поэтому влияние на I_{pl} также оказывает шкала высот и, соответственно, температура в верхней атмосфере. Как отмечалось ранее, данный факт учитывался нами при построении модели излучения в γ-полосах.

При этом рост содержания NO в атмосфере экзопланеты может привести к снижению интенсивности излучения, так как при больших N_{NO} существенным становится вклад резонансного самопоглощения в γ-полосах (см. Рисунок 10).

3. Спектральный класс родительской звезды.

В целях исследования пределов обнаружения излучения в γ-полосах NO аналогично предыдущему подразделу были произведены расчеты S/N для различных:

а) температур в верхних атмосферах модельных экзопланет ($T_{atm} = 3000$ K, 5000 K, которые могут достигаться при $F_{XUV} = 5F_{XUV\odot}$ и $30F_{XUV\odot}$);

б) больших полуосей орбит экзопланет;

в) родительских звезд.

Для больших полуосей орбит использовались значения, соответствующие центру ЗПО, a_{center}^{HZ} (50), нижней границе консервативной, a^{CHZ} , и оптимистичной, a^{OHZ} , ЗПО (рассчитаны с помощью кода VPLanet [209]; $0.2 \times a_{center}^{HZ}$ и $0.1 \times a_{center}^{HZ}$.

Результаты расчетов показали, что за разумное наблюдательное время (<120 часов) регистрация излучения в γ -полосах NO возможна только для близких экзопланет, а $\leq 0.2 \times a_{center}^{HZ}$, в следующих планетных системах:

- Суб-нептун-2 звезда G1V, G2V, G8, К2 спектральных классов (используются спектры звезд, описанные в разделе 4.1.2); d ≤ 1 пк; T_{atm} = 3000, 5000 K;
- Супер-земля звезда М5 спектрального класса (используется спектр Proxima Cen); d ≤ 2 пк; T_{atm} = 3000, 5000 K;
- Суб-нептун-2 звезда М5 спектрального класса (используется спектр Proxima Cen); d ≤ 5 пк; T_{atm} = 3000, 5000 К.

Анализ каталога NEA показал, что подобных реальных планетных систем (с малыми орбитальными расстояниями) в пределах 5 пк на настоящий момент открыто не было. Кроме того, следует отметить, что при $a \le a^{OHZ}$ необходимые условия обитаемости на планете [2] (наличие жидкой воды на ее

поверхности и отсутствие сильного парникового эффекта в атмосфере) не выполняются.

Использование коронографа

Проблему малого S/N можно решить инструментально. Из расчетов по модели излучения следует, что контраст (отношение потока от экзопланеты к потоку от родительской звезды, см. выражение (43)) для γ-полос составляет порядка: 10⁻⁸ для супер-земли и 10⁻⁷ для суб-нептуна-2 (T = 3000 K) в центре ЗПО у звезды солнечного типа; 10⁻⁶ и 10⁻⁵ для супер-земли и суб-нептуна в центре ЗПО у маломассивной звезды позднего спектрального класса (например, Proxima Cen (M5.5V)). Инструментом, способным решить проблему контраста при достаточном угловом разрешении родительской звезды и ее компаньона, является коронограф. К настоящему моменту существует довольно много конфигураций коронографов (см., например, [162]. Более того, в рамках проекта Спектр-УФ также разрабатывается ахроматический интерференционный коронограф общего пути с переменным вращательным сдвигом для работы в видимом диапазоне длин волн [163–165].

Чтобы определить потенциальную значимость коронографа ДЛЯ обнаружения излучения NO, в данной работе не будем ограничиваться определенной конфигурацией данного инструмента, а получим теоретическую оценку увеличения S/N в сравнении с рассмотренными ранее подходами. И определим параметры коронографа (контраст коронографа, максимальную пропускную способность), необходимые для регистрации у-полос NO с заданным S/N. Более подробное изучение эффективности конкретного коронографа для решения поставленной задачи является предметом дальнейших исследований.

Методика расчета S/N при использовании коронографа была взята из работы [16] и описана в Разделе 2.3.2. Были зафиксированы следующие параметры (аналогично [16]): значение внутреннего рабочего угла (IWA) 2λ/d; поверхностная яркость зодиакального и экзо-зодиакального света, M_z = 23

mag/arcsec² и $M_{ez} = 22$ mag/arcsec², соответственно. Значение контраста коронографа, С, варьировалось от 10⁻⁷ до 10⁻¹⁰, максимальная пропускная способность коронографа была установлена, равной 0.6. Мы также предположили, что в канале коронографа находится спектрограф с характеристиками, аналогичными СДЩ (R = 1000, см. Таблицу 5). Расчеты наблюдательного времени были произведены также для разных планетных систем (с учетом возможности разрешения планетной системы с помощью коронографа) и разных условий в атмосферах экзопланет (см. раздел 4.3.2.1).

Согласно полученным результатам, использование коронографа существенно увеличивает возможность регистрации излучения в γ-полосах NO. Так, в модельном случае при рассмотрении планетной системы суперземля / суб-нептун-2 ($T_{atm} = 5000$ K, $30F_{XUVO}$, $a = a_{center}^{HZ}$) - звезда солнечного типа (используется спектр Солнца) на расстоянии 1 пк — наблюдательное время, необходимое обнаружения NO с S/N = 3, составляет: 4 часа для субнептуна-2 (контраст коронографа C = 10^{-7}) и 41 час для супер-земли (C = 10^{-7}). Предельные для регистрации NO расстояния для тех же планетных систем с использованием коронографа составляют: ≤ 9 пк для суб-нептунов-2 (C = 10^{-8} , $T_{atm} = 5000$ K, $30F_{XUVO}$, $a = a_{center}^{HZ}$) и ≤ 5 пк для супер-земль (C = 10^{-9} , $T_{atm} = 5000$ K, $30F_{XUVO}$, $a = a_{center}^{HZ}$).

Кроме того, результаты вычислений наблюдательного времени показали, что регистрация излучения NO становится потенциально возможной и для реальных экзопланет: HD 192310 с, наблюдательное время составляет 120 часов (при C = 10^{-8} , T_{atm} = 5000 K); Tau Cet e - 40.5 часов наблюдений при тех же условиях.

Представленные результаты являются верхним пределом возможности обнаружения NO, так как получены В приближении 0 том, ЧТО инструментальный шум не вносит большого вклада в шумовой сигнал. Важно отметить, что темновой ток и шум считывания могут достаточно сильно (на более чем 2 порядка величины) ограничить полученные оценки наблюдательного времени. Так, например, использование указанных шумовых характеристик в расчетах снижает граничные для регистрации NO расстояния до 1-го пк для суб-нептунов-2, находящихся в центре ЗПО у звезды солнечного типа.

4.4 Возможность обнаружения NO при интенсивных высыпаниях электронов в атмосферу экзопланеты

Как отмечалось ранее, важным фактором для обнаружения NO методом трансмиссионной спектроскопии в УФ диапазоне является высокое содержание этой молекулы в верхней атмосфере. Если планета находится в ЗПО у звезды с высоким потоком звездного ветра, который приводит к интенсивным и продолжительным высыпаниям электронов, это может привести к росту содержания NO в атмосфере, а шансы обнаружить NO на планете могут увеличиться. Основная цель данной работы заключается в том, чтобы проверить данную гипотезу.

Для этого в Разделе 3.1 с помощью модели ANOD было выполнено моделирование высотного распределения концентрации NO на экзопланетах земного типа при различных потоках энергии высыпающихся электронов в их атмосферу, а также при рассмотрении теплового и нетеплового каналов образования NO. Всего было выделено 4 варианта расчета: $I. Q_0 = 1$ эрг см⁻²с⁻¹, рассматривается тепловой канал образования NO. Такие условия зачастую реализуются в атмосфере Земли; $2. Q_0 = 1$ эрг см⁻² с⁻¹, рассматривается нетепловой канал образования NO; $3. 10 Q_0$, тепловой канал; $4. 80 Q_0$, нетепловой канал. Варианты 2 - 4 могут возникать в атмосфере Земли только как спорадические явления [176]. Поэтому, как было обозначено ранее, мы предполагаем, что N₂-O₂ атмосфера планеты земного типа подвержена более интенсивным и продолжительным высыпаниям электронов, чем атмосфера Земли.

Результаты расчетов концентрации NO для всех четырех вариантов и их описание представлены в Разделе 3.1 (см. Рисунки 19, 20).

Далее поэтапно рассмотрим результаты расчетов предельных расстояний до экзопланет для обнаружения пропускания света в у-полосах NO в их атмосферах. Стоит отметить, что в расчетах рассматривались экзопланеты, которые подвержены XUV потоку излучения от родительской звезды, $F_{XUV} = 5$ F_{XUVO}. Согласно выводам предыдущего Раздела, при таких и бо́льших XUV потоках от родительских звезд могут достигаться благоприятные условия для регистрации NO в атмосферах экзопланет. В результате нагрева атмосферы за счет поглощения высокого XUV потока звезды шкала высот в атмосфере может увеличиться, а сама атмосфера может расшириться. Результаты расчетов теплового баланса в атмосфере (см. Рисунок 22) показали, что сильные высыпания электронов магнитосферного происхождения в атмосферу могут также приводить к ее дополнительному нагреву. Это может также способствовать ее расширению. Чтобы учесть влияние нагрева на глубину транзита, f_{ATM}, в первом приближении мы использовали введенное ранее предположение о том, что на высотах >200 км атмосфера является изотермической. Полученные профили температуры (Рисунок 22) показывают, что это предположение вполне допустимо. Таким образом, для учета нагрева ΜЫ производили дополнительное масштабирование концентраций исследуемых атмосферных компонентов на указанных высотах в соответствии с законом Дальтона, используя значения температуры с Рисунка 22.

Важно отметить, что при расчете пропускания света через атмосферу в нашей одномерной модели (см. Раздел 2.1 и 2.2) используются усредненные по поверхности концентрации атмосферных компонентов (аналогично [12,15,40] и др.), в том числе и NO. Согласно измерениям NO в верхней атмосфере Земли (см. Раздел 1), средняя по поверхности планеты концентрация NO определяется высыпаниями электронов при высокой геомагнитной активности. Помимо этого, существует еще одна возможность равномерного образования NO по поверхности планеты. Если у экзопланеты отсутствует собственное магнитное поле, но есть плотная атмосфера и, следовательно, наведенное магнитное поле (как у Венеры). Согласно проведенным 3D МГД расчетам [А6], при взаимодействии солнечного ветра с магнитосферой планеты типа Венеры с дневной стороны планеты образуется головная ударная волна, которая вызывает замедление потока солнечного ветра от сверхзвуковой к дозвуковой скорости. Граница между замедленным потоком солнечного индуцированной магнитосферой не полностью препятствует ветра и проникновению плазмы солнечного ветра в атмосферу. Гирорадиусы частиц солнечного ветра достаточно велики по сравнению с размерами границы индуцированной магнитосферы, что позволяет частицам плазмы двигаться по спирали вдоль сжатого магнитного поля и непосредственно взаимодействовать с верхними слоями атмосферы. Это приводит к тому, что электроны и протоны высыпаются в атмосферу планеты не локально, как на Земле, а по всей поверхности. Таким образом, диффузные высыпания электронов на планетах без собственного магнитного поля, но с плотной атмосферой, могут также приводить к равномерному по поверхности образованию молекулы NO [A6].

4.4.1. Глубина транзита

Используя полученные высотные профили концентрации NO и других атмосферных компонентов, а также их сечения поглощения и рассеяния (см., Разделы 2.2 и 3.1), мы последовательно рассчитали коэффициенты поглощения, оптическую толщу и эффективную высоту атмосферы. После чего определили вклад атмосферы в наблюдаемую глубину транзита (34). Расчеты были произведены для разных модельных экзопланет и родительских звезд. В качестве характерного примера на Рисунке 29 представлены значения глубины транзита в диапазоне 180 - 250 нм для типичной супер-земли, которая находится в транзите у звезды солнечного типа (спектральный класс G2V). Эти значения были получены для 4 вариантов высыпания электронов в верхнюю атмосферу планеты. Представленный результат представляет собой свертку с разрешением спектрографа СДЩ КТ Спектр-УФ (R = 1000).

134



Рисунок 29. Значения глубины транзита, f_{ATM} , для планетной системы: «суперземля – звезда типа Солнце (G2V спектральный класс)» при $F_{XUV} = 5F_{XUV\odot}$ и различных потоках высыпающихся электронов магнитосферного происхождения: $Q_0 = 1$ эрг см⁻² с⁻¹ (*синие и красные штриховые кривые*); 10 Q_0 (*синие сплошные кривые*); 80 Q_0 (*красные сплошные кривые*). Во всех случаях характеристическая энергия высыпающихся электронов, $E_0 = 4$ кэВ. *Синий* цвет кривых соответствует тепловому каналу образования NO, *красный* цвет – нетепловому каналу образования данной молекулы.

На Рисунке 29 также представлена идентификация спектральных линий молекул, рассматриваемых в модели.

С ростом потока энергии высыпающихся электронов глубина транзита увеличивается. Так, при наиболее возмущенных условиях в атмосфере (вариант 4, 80 Q₀, нетепловой случай, красная сплошная кривая на Рисунке 29) глубина транзита возрастает практически на 1 порядок величины по сравнению со спокойными условиями (вариант 1). В терминах эффективной высоты максимум глубины транзита в наиболее интенсивной (1,0) γ -полосе NO, $\lambda_c = 214.8$ нм, соответствует ≈ 370 км при возмущенных условиях в атмосфере. Это примерно в 6 раз больше эффективной высоты в этой спектральной линии при спокойных условиях в атмосфере.

135

Несмотря на то, что содержание NO в верхней атмосфере существенно увеличивается (вплоть до 3-4 порядков величины) с ростом Q₀ и при рассмотрении нетеплового канала образования данной молекулы (Рисунок 19), эффективная высота и глубина транзита изменяются в меньших пределах (Рисунок 29). Дело в том, что наибольший эффект от высыпания электронов в производство NO достигается лишь в малом диапазоне высот, в области, где происходит наибольшая потеря энергии электронов в результате упругих, неупругих и ионизационных столкновений с окружающим атмосферным газом (см. Раздел 2.1). В этой области также наблюдаются максимальные скорости реакций диссоциации (5), ионизации (6), диссоциативной ионизации (7) N₂ электронным ударом. Кроме того, здесь достигаются и наибольшие частоты нетеплового образования NO (8). Высыпания электронов, таким образом, локальный эффект в увеличение содержания NO. Вкупе с вносят дополнительным нагревом атмосферы (напомним, экзопланета что подвержена XUV излучению с $F_{XUV} = 5 F_{XUV}$) это приводит к небольшому расширению атмосферы и увеличению содержания NO на луче зрения. Эти эффекты и отображаются на глубине транзита, создаваемой атмосферой. Полученный в результате расчетов невысокий рост данной величины (в пределах одного порядка), тем не менее, может оказаться существенным для обнаружения молекулы NO.

4.4.2 Предельные расстояния для регистрации NO со Спектр-УФ

Исследование возможности обнаружения NO было произведено с помощью выражения (37). Для этого были использованы значения глубины транзита для атмосфер различных экзопланет. Также с помощью калькулятора экспозиций Спектр-УФ [158] было определено отношение S/N_{st} для спектрального распределения рассматриваемых в работе родительских звезд. Как отмечалось ранее, в расчетах использовались параметры спектрографа низкого разрешения СДЩ (R = 1000). Как и ранее, для надежной регистрации молекулы мы предположили, что минимальное отношение S/N_{pl} должно быть

равно 3. Кроме того, из практических соображений мы ограничили суммарное наблюдательное время 200 часами (≈8 орбит КТ Спектр-УФ).

Предельные расстояния³⁸ были рассчитаны для различных условий (варианты *1 - 4*) в атмосферах различных экзопланет, которые находятся в ЗПО у различных звезд. Результаты этих расчетов представлены на Рисунках 30 и 31. Расстояния до экзопланет отложены на этих Рисунках по осям абсцисс и ординат. В начале отсчета отмечен КТ Спектр-УФ. Рисунки, таким образом, отображают сферы возможных наблюдений Спектр-УФ для рассматриваемой задачи.

На Рисунке 30 предельные расстояния определены для типичных суперземель (2R_E, 4M_E) и суб-нептунов (4R_E, 15M_E), которые находятся в 3ПО у звезды типа Солнце. В расчетах использовался поток от звезды HD 31527 в ближнем УФ диапазоне. Расчеты проведены для различных случаев высыпания электронов в верхние атмосферы экзопланет. Стиль и цвет кривых соответствует Рисункам 22 и 29. Анализ Рисунка показывает, что при относительно спокойных геомагнитных условиях (вариант 1, Q₀ = 1эрг см⁻²с⁻¹, тепловой случай, синяя штриховая кривая) пределы для обнаружения NO составляют: 1.5 пк для супер-земель и 3.5 пк для суб-нептунов-2, находящихся в 3ПО у звезд типа Солнца. Подобных планетных систем среди уже открытых в пределах указанных расстояний согласно каталогу NEA ранее обнаружено не было.

С увеличением Q_0 в 10 раз предельные расстояния увеличиваются в ≈ 1.5 раза (в тепловом случае, синие сплошные кривые). А при наиболее возмущенных условиях в атмосфере экзопланеты (вариант 4, 80 Q_0 , нетепловой канал) границы для потенциального обнаружения NO существенно расширяются и могут достигать 8 пк для супер-земель и 30 пк для суб-нептунов, находящихся в ЗПО у звезд типа Солнце. Это, в свою

 $^{^{38}}$ Это расстояния, при которых с помощью Спектр-УФ еще возможно зарегистрировать сигнал пропускания в γ -полосах NO с отношением S/N_{pl} = 3 за разумное наблюдательное время, t_{obs} = 200 ч.

очередь, подтверждает высказанное ранее предположение о том, что увеличение глубины транзита в пределах порядка величины вследствие нагрева и расширения атмосферы, а также увеличения содержания NO на луче зрения может заметно улучшить возможность обнаружения данной молекулы.



Рисунок 30. Предельные расстояния для регистрации γ -полос NO в предполагаемых N₂-O₂ атмосферах типичных модельных супер-земель (*левая панель*) и суб-нептунов-2 (*правая панель*), находящихся в ЗПО у звезды солнечного типа, с помощью спектрографа СДЩ (R = 1000) КТ Спектр-УФ с параметрами: S/N = 3, наблюдательное время в пределах 200 часов. Предельные расстояния рассчитаны при F_{XUV} = 5F_{XUV©} и различных потоках высыпающихся магнитосферных электронов: Q₀=1 эрг см⁻²с⁻¹ (*синие и красные итриховые кривые*); 10 Q₀ (*синие сплошные кривые*); 80 Q₀ (*красные сплошные кривые*). Для расчетов использовался средний поток звезды HD 31527 (G2V спектральный класс) в ближнем УФ диапазоне спектра. В начале координат отображен КТ Спектр-УФ.

Полученные результаты, тем не менее, зависят от спектрального класса родительской звезды и ее потока в ближнем УФ диапазоне. Это наглядно видно на Рисунке 31, где для тех же модельных экзопланет предельные расстояния рассчитаны для случая, когда эти экзопланеты находятся в ЗПО у разных родительных звезд. При этом предполагается, что экзопланеты подвержены

138

наиболее сильным возмущениям со стороны звездного ветра (вариант 4, 80 Q₀, нетепловой канал, красные сплошные кривые).



Рисунок 31. Предельные расстояния для регистрации γ -полос NO в предполагаемых N₂-O₂ атмосферах типичных модельных супер-земель (*левая панель*) и суб-нептунов-2 (*правая панель*), находящихся в 3ПO у звезд разных спектральных классов с помощью спектрографа СДЩ (R = 1000) КТ Спектр-УФ с S/N = 3 в пределах 200 часов. Для построения рисунка использованы NUV потоки звезд: HD 31527 (G2V) (*красные кривые*); τ Ceti (G8V) (*синие кривые*); HD 10180 (G1V) (*пурпурные кривые*); Coлнце (G2V) (*оранжевые кривые*); HD 192310 (K2V) (*зеленые кривые*). Предполагается, что N₂-O₂ атмосфера планет подвержена XUV потоку $F_{XUV} = 5F_{XUVO}$ и высыпаниям магнитосферных электронов с Q₀ =80 эрг см⁻²с⁻¹. Рассматривается нетепловой канал образования NO. На Рисунках отмечены планеты: τ Ceti е (время экспозиции составляет 200 часов при Q₀ = 100 эрг см⁻² с⁻¹); HD 192310 с (50 часов при Q₀ = 80 эрг см⁻² с⁻¹); HD 192310 с (50

Рассчитанные значения предельных расстояний на Рисунке 31 полностью отражают градацию по спектральным потокам у рассматриваемых звезд (см., Рисунок 26). Отсюда следует, что представленные на Рисунке 30 предельные

139

расстояния в 8 пк (для супер-земель) и 30 пк (для суб-нептунов) являются своеобразными верхними пределами для обнаружения NO. Действительно, поток в ближнем УФ диапазоне у звезды HD 31527 (спектральный класс G2V) выше, чем у Солнца (G2V) примерно в 20 раз. Это отражается на изменении предельных расстояний в ≈√20 раз.

Помимо модельных экзопланет, расчеты наблюдательных проявлений NO были проведены и для атмосфер реальных планет τ Cet е и HD 192310 с, которые ранее были определены как потенциальные кандидаты для обнаружения NO. Эти экзопланеты отмечены на Рисунке 31. Результаты проведенных расчетов показали, что регистрация сигнала пропускания в γ полосах NO потенциально возможна в предполагаемой N₂-O₂ атмосфере супер-земли τ Cet е за 14 транзитов или суммарно 196 часов наблюдений. При этом предполагалось, что атмосфера планеты находится под действием более сильных высыпаний электронов, Q₀ = 100 эрг см⁻² с⁻¹, и реализуется нетепловой канал образования NO. Стоит отметить, что температура в атмосфере при таких возмущенных условиях, согласно проведенным расчетам теплового баланса, может измениться в 2.2 раза. Тем не менее, как и ранее при расчете концентрации NO мы предположили, что структура атмосферы в этом предельном случае также остается неизменной.

Расчеты для суб-нептуна HD 192310 с показали, что обнаружение NO в предполагаемой N₂-O₂ атмосфере этой экзопланеты потенциально возможно за 4 транзита или примерно 52 часа наблюдений (суммарно). Результат был получен при рассмотрении наиболее возмущенных условий в атмосфере планеты (вариант 4, Q₀ = 80 эрг см⁻² с⁻¹, нетепловой случай). Регистрация сигнала пропускания в γ -полосах NO в атмосфере этой экзопланеты возможна и при рассмотрении более спокойных геомагнитных условий. Так, за 15 транзитов (195 часов наблюдений) зарегистрировать сигнал в атмосфере этой экзопланеты еще возможно, если она подвержена электронным высыпаниям с Q₀ = 65 эрг см⁻² с⁻¹ и при реализации нетеплового канала образования NO.

Мы также определили, что потенциальным кандидатом для обнаружения NO может быть суб-нептун HD 31527 d (11.8 M_E, 3.5 R_E, d = 38.447 пк, a = 0.81 a.e., T_d = 12.8 ч, родительская звезда G2V). Согласно [7], HD 31527 d находится оптимистичной 3ПО. Регистрация трансмиссионного сигнала в γ-полосах NO в атмосфере этой экзопланеты возможна в случае более сильных, чем в расчетном варианте 4, высыпаний электронов, Q₀ = 100 эрг см⁻² с⁻¹. Суммарное наблюдательное время для обнаружения биомаркера NO в этом случае может составить 220 часов, что соответствует 17 транзитам этой экзопланеты.

Впоследствии, мы также проанализировали каталог [7] на предмет наличия супер-земель и суб-нептунов в ЗПО у родительских звезд спектрального класса G и раннего K, отстоящих от Земли на расстоянии < 40 пк. И определили, что еще 4 экзопланеты могут быть потенциальными кандидатами для обнаружения NO с помощью КТ Спектр-УФ: HD 102365 b, HD 69830 b, HD 216520 c, HD 10180 g. Определение наблюдательного времени для регистрации γ-полос на этих экзопланетах является предметом дальнейшей работы. Полный перечень экзопланет, наиболее подходящих для поиска NO в их атмосферах с помощью КТ Спектр-УФ представлен в Таблице 10.

Тем не менее, реальные наблюдения атмосфер экзопланет могут осложняться разными факторами, которые влияют на качество получаемого сигала. Одним из наиболее важных факторов является активность родительской звезды и проявление этой активности в ближнем УФ диапазоне. Как следует из полученных результатов, исследование атмосфер экзопланет земного типа, находящихся в ЗПО, сугубо многотранзитная задача. Во время транзита и между ними на родительской звезде могут происходить вспышки, возникать и эволюционировать пятна – области с пониженной температурой и меньшим потоком непрерывного излучения. Наличие пятен может искажать спектр звезды и, как следствие, приводить к искажениям в наблюдаемой

141

глубине транзита [153]. Эти факторы будут учтены нами в дальнейшем при планировании наблюдений и анализе экспериментальных данных.

Таблица 10. Перечень экзопланет потенциальных кандидатов для обнаружения NO с помощью КТ Спектр-УФ. В графе количество транзитов представлено количество транзитов, необходимое для регистрации γ -полос NO с S/N = 3 в пределах 200 часов в наилучшем случае (Q₀ = 80 – 100 эрг см⁻² с⁻¹, нетепловой канал образования NO, F_{XUV} = 5 F_{XUV}.)

Планета	R _E	d, пк	a, a.e.	Звезда	Кол-во транзитов
Tau Cet e	1.81	3.603	0.538	G8	14
HD 192310 c	5.3	8.797	1.18	K2V	4
HD 102365 b	3.95	9.28	0.46	G3/5V	
HD 69830 d	4.36	12.55	0.63	G8	-
HD 216520 c	2.9	19.55	0.528	K0V	
HD 31257 d	3.5	38.447	0.81	G2V	17
HD 10180 g	4.9	38.961	1.427	G1V	-

Стоит также отметить, что ранее транзиты экзопланет т Cet е и HD 31527d не были достоверно зарегистрированы по результатам наблюдений на обсерватории TESS [220]. Эти экзопланеты были обнаружены методом лучевых скоростей.

Впоследствии мы также осуществили поиск информации о XUV потоках и потоках звездного ветра от рассматриваемых звезд. Прямых измерений XUV потоков для данных звезд произведено не было. Как и для других звезд, это во многом обусловлено сильным межзвездным поглощением в EUV диапазоне (10-91.2 нм), особенно в области спектра 40-91.2 нм, и отсутствием соответствующих инструментов [221,222]. Поэтому в последнее время разрабатываются методы определения F_{XUV} , связанные с нахождением корреляций между этим потоком и потоками в других спектральных диапазонах, например, в X-гау [223], или потоками в отдельных эмиссионных линиях звезды. В качестве таких эмиссионных линий обычно рассматривают H I Lyα [224], N V и Si IV [225], а также линии Ca II, H и K [221].

Мы рассмотрели каталог [226], в котором содержатся значения наблюдаемых X-ray потоков 344 родительских звезд по данным обзора космического телескопа eRosita, а также телескопов XMM-Newton, Chandra, ROSAT. Все потоки в данном каталоге приведены к энергетическому диапазону 0.2 - 2 кэВ (0.6 – 6 нм). Используя методику из работы [223], авторы также перевели X-ray потоки излучения в XUV диапазон. В данном каталоге содержатся пересчитанные потоки XUV излучения для трех звезд из Таблицы 10: Tau Cet, HD 102365, HD 61830. Значения этих потоков, приходящих на планеты тСеt e, $F_{XUV} = 5.56$ эрг см⁻² с⁻¹, HD 102365 b, $F_{XUV} = 7.12$ эрг см⁻² с⁻¹, HD 61830 d, $F_{XUV} = 38.2$ эрг см⁻² с⁻¹. Для сравнения современный XUV поток, приходящий на Землю, равен 3.75 эрг см⁻² с⁻¹ [168], что в 1.5, 1.8, 10 раз меньше, чем для Tau Cet e, HD 102365 b, HD 61830 d, соответственно. Тем не менее, ошибка определения абсолютного значения F_{XUV} из X-ray потока ([223], выражение 3) может достигать двух порядков величины (при этом на Рисунке 2 в [223] ошибка оценивается как \approx 1 порядок величины) поэтому расчеты для рассматриваемых планет при $F_{XUV} = 5 F_{XUVO}$ можно считать приемлемыми.

Данных о потоках звездного ветра для рассматриваемых родительских звезд (см. Таблицу 10) найдено не было. Вообще, потоки звездного ветра известны лишь для малого количества ближайших маломассивных звезд [190,227]. Перспективным методом для определения потока звездного ветра является трансмиссионная спектроскопия горячих экзопланет [228]. Горячие экзопланеты обладают протяженными оболочками, которые могут вытекать за полость Роша планеты (для горячих юпитеров это 3-3.5 RJ) [205]. Взаимодействие этих оболочек со звездным ветром можно потенциально обнаружить по поглощению, наблюдаемом при транзите экзопланеты, в спектральным линиях атомов H, He и некоторых металлов (см., например, [229]). Анализ этого поглощения с помощью ЗД ГД моделей может позволить определить потоки звездного ветра (см., например, [230]). Таким образом, если в представленных в Таблице 10 планетных системах есть горячие экзопланеты,

впоследствии можно определить поток звездного ветра от их родительских звезд.
Заключение

Основные итоги диссертационной работы заключаются в следующем:

- Установлено, что с помощью спектрографа с длинной щелью космического телескопа (КТ) Спектр-УФ возможно обнаружить молекулу-биомаркер NO в атмосферах экзопланет земного типа:
- 1.1. Пределы обнаружения NO на экзопланетах в зоне потенциальной обитаемости у спокойных звезд солнечного типа не превышают 1 пк при использовании методов трансмиссионной и эмиссионной спектроскопии.
- 1.2. Пределы обнаружения NO методом трансмиссионной спектроскопии могут увеличиться до 5 и 20 пк для типичных супер-земель и субнептунов в зоне потенциальной обитаемости у активных звезд с высокими XUV потоками излучения (в более чем 5 раз превышающими солнечный XUV поток). Обнаружение излучения NO на таких планетах методом эмиссионной спектроскопии возможно только с помощью коронографа с контрастом 10⁻⁸–10⁻⁹ на борту Спектр-УФ.
- 1.3. Пределы обнаружения NO могут увеличиться до 8 и 30 пк для типичных супер-земель и суб-нептунов, подверженных интенсивным высыпаниям электронов в атмосферу (с потоком энергии 80 эрг см⁻² с⁻¹, что в 80 раз больше, чем средний поток на Земле) и высоким потокам XUV излучения (равным 5 солнечным XUV потокам).
- Сформирован список экзопланет для поиска молекулы NO с КТ Спектр-УФ в их атмосферах. Показано, что среди 35 ближайших (<100 пк) экзопланет в зоне потенциальной обитаемости кандидатами для обнаружения NO с КТ Спектр-УФ являются: т Сеt е (14 транзитов для регистрации сигнала), HD 192310 с (4 транзита), HD 31527 d (17 транзитов), а также HD 102365b, HD 69830b, HD 216520c и HD 10180g.

- 3. Разработан программный комплекс для исследования молекулыбиомаркера NO в N₂–O₂ атмосферах экзопланет и определения возможности обнаружения этой молекулы с помощью КТ Спектр- УФ. В комплексе алгоритмически объединены модели, позволяющие: исследовать тепловое и нетепловое образование молекулы NO в N₂-O₂ атмосферах экзопланет; строить спектры пропускания и излучения NO в УФ диапазоне длин волн; рассчитывать отношение S/N, необходимое для регистрации спектральных линий NO с помощью спектрографов Спектр-УФ.
- 4. Для расширения списка потенциальных целей КТ Спектр-УФ по поиску NO исследованы возможные пути увеличения концентрации этой молекулы в атмосферах экзопланет у активных звезд. Установлено, что существует два пути увеличения содержания NO, которые связаны с нетепловым каналом ее образования (при взаимодействии надтепловых атомов азота N_{hot}(⁴S) с O₂) во время высыпаний электронов в верхние атмосферы таких экзопланет:
- 4.1. При продолжительных высыпаниях электронов в атмосферу (в отличие от Земли, где эти процессы спорадичны) прирост концентрации NO за счет нетеплового канала может составить 2 порядка величины по сравнению с тепловым каналом;
- 4.2. С ростом потока энергии высыпающихся электронов (при увеличении потока звездного ветра) увеличение концентрации NO за счет нетеплового канала имеет линейный характер в отличие от теплового канала, для которого характерна нелинейная степенная зависимость с положительной дробной частью.

По результатам исследований рекомендовано вести поиск биомаркера NO на экзопланетах в зоне потенциальной обитаемости у активных звезд спектральных классов G и ранних K.

Среди актуальных задач, для решения которых можно использовать созданные в рамках выполнения диссертации модели, можно выделить следующие:

1. Исследование роли собственного магнитного поля в качестве «защитного» механизма к воздействию звездного ветра по сравнению распределений концентрации NO в атмосферах Земли и планет без собственного магнитного поля.

2. Исследование устойчивости N₂-O₂ атмосфер планет земного типа к воздействию жесткого излучения звезды и звездного ветра на эволюционных масштабах.

3. Формирование краткосрочного прогноза изменения структуры термосферы Земли как отклика на воздействие факторов космический погоды (корональных выбросов массы, солнечных вспышек).

4. Исследование возможности обнаружения таких атмосферных биомаркеров как O, NO, O₂, O₃ на экзопланетах УФ диапазоне длин волн с помощью КТ Спектр-УФ. Вкупе с обнаружением NO регистрация спектральных признаков этих атомов и молекул позволит подтвердить вывод о наличии жизни или условий для жизни на конкретных экзопланетах.

5. Определение параметров космической погоды у других звезд по наблюдениям атмосфер горячих юпитеров.

Результаты, полученные в данной работе, послужат основой для дальнейшего исследования представленных задач.

Благодарности

Соискатель выражает особую благодарность научному руководителю Бисикало Д. В. за всестороннюю помощь в проведении исследований, критические замечания, переданные знания и формирование научного мышления и мировоззрения. Соискатель благодарен Шематовичу В. И., Жилкину А. Г. за всестороннюю помощь, переданные знания и совместные научные обсуждения, которые очень помогли соискателю при проведении научных исследований. Отдельную благодарность соискатель выражает сотрудникам отделов звездной спектроскопии, физики и эволюции звезд, отделу экспериментальной астрономии ИНАСАН, лаборатории исследования звезд с экзопланетами ИНАСАН за передачу практического и научного опыта и знаний. Соискатель благодарен коллективу Института астрономии РАН за научные обсуждения, дружелюбную обстановку, которые были очень важны при проведении научных исследований.

Исследование выполнено при финансовой поддержке Российского научного фонда в рамках научного проекта № 22-12-00364-П.

Список литературы

- 1. Meadows V.S., Barnes R.K. Factors Affecting Exoplanet Habitability // Handbook of Exoplanets / ed. Deeg H.J., Belmonte J.A. 2018. P. 57.
- 2. Kasting J.F., Whitmire D.P., Reynolds R.T. Habitable Zones around Main Sequence Stars // Icarus. 1993. Vol. 101, № 1. P. 108–128.
- Lammer H. et al. The Role of N₂ as a Geo-Biosignature for the Detection and Characterization of Earth-like Habitats // Astrobiology. 2019. Vol. 19, № 7. P. 927–950.
- Sproß L. et al. Life as the Only Reason for the Existence of N₂-O₂-Dominated Atmospheres // Astronomy Reports. 2021. Vol. 65, № 4. P. 275–296.
- 5. Schwieterman E.W. et al. Evaluating the Plausible Range of N₂O Biosignatures on Exo-Earths: An Integrated Biogeochemical, Photochemical, and Spectral Modeling Approach // Astrophysical Journal. 2022. Vol. 937, № 2. P. 109.
- 6. Misra A. et al. Using Dimers to Measure Biosignatures and Atmospheric Pressure for Terrestrial Exoplanets // Astrobiology. 2014. Vol. 14, № 2. P. 67–86.
- 7. Hill M.L. et al. A Catalog of Habitable Zone Exoplanets // Astronomical Journal.
 2023. Vol. 165, № 2. P. 34.
- Sachkov M., Kopylov E. The World Space Observatory Ultraviolet mission: science program and status report. // Proceedings of the SPIE. 2024. Vol. 13093.
 P. 130933F.
- 9. Barth C.A. et al. Global observations of nitric oxide in the thermosphere // Journal of Geophysical Research (Space Physics). 2003. Vol. 108, № A1. P. 1027.
- 10. Cohen S.D., Hindmarsh A.C., Dubois P.F. CVODE, A Stiff/Nonstiff ODE Solver in C // Computers in Physics. 1996. Vol. 10, № 2. P. 138–143.
- Bisikalo D., Shematovich V., Hubert B. The Kinetic Monte Carlo Model of the Auroral Electron Precipitation into N₂-O₂ Planetary Atmospheres // Universe.
 2022. Vol. 8, № 8. P. 437.
- 12. Schreier F. et al. Py4CAtS—PYthon for Computational ATmospheric Spectroscopy // Atmosphere. 2019. Vol. 10, № 5. P. 262.

149

- 13. Eparvier F.G., Barth C.A. Self-absorption theory applied to rocket measurements of the nitric oxide (1,0) γ band in the daytime thermosphere // Journal of Geophysical Research. 1992. Vol. 97. P. 13723–13731.
- 14. Stevens M.H. Nitric oxide γ band fluorescent scattering and self-absorption in the mesosphere and lower thermosphere // Journal of Geophysical Research.
 1995. Vol. 100. P. 14735–14742.
- 15. Rauer H. et al. Potential biosignatures in super-Earth atmospheres. I. Spectral appearance of super-Earths around M dwarfs // Astronomy & Astrophysics. 2011. Vol. 529. P. A8.
- 16. Robinson T.D., Stapelfeldt K.R., Marley M.S. Characterizing Rocky and Gaseous Exoplanets with 2 m Class Space-based Coronagraphs // Publications of the Astronomical Society of the Pacific. 2016. Vol. 128. P. 025003.
- 17. Lovelock J.E. A Physical Basis for Life Detection Experiments // Nature. 1965.Vol. 207. P. 568–570.
- 18. Owen T. The Search for Early Forms of Life in Other Planetary Systems Future Possibilities Afforded by Spectroscopic Techniques // Strategies for the Search for Life in the Universe, Proceedings of the Meeting held 15-16 August 1979 -Montreal, Canada. / ed. Papagiannis M. D. Astrophysics and Space Science Library. Vol. 83. P. 177.
- 19. Leger A., Pirre M., Marceau F.J. Search for primitive life on a distant planet: relevance of O2 and O3 detections // Astronomy and Astrophysics. 1993. Vol. 277. P. 309.
- 20. Léger A. et al. Is the Presence of Oxygen on an Exoplanet a Reliable Biosignature? // Astrobiology. 2011. Vol. 11. P. 335–341.
- 21. Sagan C. et al. A search for life on Earth from the Galileo spacecraft // Nature.1993. Vol. 365. P. 715–721.
- 22. Beichman C.A., Woolf N.J., Lindensmith C.A. The Terrestrial Planet Finder (TPF): a NASA Origins Program to search for habitable planets / ed. Beichman C.A. Washington: National Aeronautics and Space Administration. 1999.

- 23. Seager S. The search for extrasolar Earth-like planets // Earth and Planetary Science Letters. 2003. Vol. 208. P. 113–124.
- 24. Seager S., Schrenk M., Bains W. An Astrophysical View of Earth-Based Metabolic Biosignature Gases // Astrobiology. 2012. Vol. 12. P. 61–82.
- 25. Meadows V.S. Planetary Environmental Signatures for Habitability and Life // Exoplanets. 2008. P. 259.
- 26. Meadows V.S. Reflections on O2 as a Biosignature in Exoplanetary Atmospheres // Astrobiology. 2017. Vol. 17. P. 1022–1052.
- 27. Luger R., Barnes R. Extreme Water Loss and Abiotic O2 Buildup on Planets Throughout the Habitable Zones of M Dwarfs // Astrobiology. 2015. Vol. 15. P. 119–143.
- 28. Trail D., Watson E.B., Tailby N.D. The oxidation state of Hadean magmas and implications for early Earth's atmosphere // Nature. 2011. Vol. 480. P. 79–82.
- 29. Delano J.W. Redox History of the Earth's Interior since ~3900 Ma: Implications for Prebiotic Molecules // Origins of Life and Evolution of the Biosphere. 2001. Vol. 31. P. 311–341.
- 30. Boyarchuk A.A. et al. Scientific problems addressed by the Spektr-UV space project (world space Observatory—Ultraviolet) // Astronomy Reports. 2016. Vol. 60, № 1. P. 1–42.
- 31. Shustov B.M. Ultraviolet Astronomy: Astrophysical Perspectives of the Spektr-UF Project (WSO-UV) // Astrophysics. 2021. Vol. 64, № 3. P. 405–424.
- 32. Lofthus A., Krupenie P.H. The spectrum of molecular nitrogen // Journal of Physical and Chemical Reference Data. 1977. Vol. 6. P. 113–307.
- 33. Samson J.A.R. et al. Total and dissociative photoionization cross sections of N2 from threshold to 107 eV // Journal of Chemical Physics. 1987. Vol. 86. P. 6128– 6132.
- 34. Krissansen-Totton J. et al. Is the Pale Blue Dot Unique? Optimized Photometric Bands for Identifying Earth-like Exoplanets // The Astrophysical Journal. 2016. Vol. 817. P. 31.

- 35. Cadieux C. et al. Transmission Spectroscopy of the Habitable Zone Exoplanet LHS 1140 b with JWST/NIRISS // The Astrophysical Journal. 2024. Vol. 970. P. L2.
- 36. Schwieterman E.W. et al. Detecting and Constraining N2 Abundances in Planetary Atmospheres Using Collisional Pairs // The Astrophysical Journal. 2015. Vol. 810. P. 57.
- 37. Bétrémieux Y., Kaltenegger L. Transmission Spectrum of Earth as a Transiting Exoplanet from the Ultraviolet to the Near-infrared // Astrophysical Journal Letters. 2013. Vol. 772, № 2. P. L31.
- 38. Christensen P.R., Pearl J.C. Initial data from the Mars Global Surveyor thermal emission spectrometer experiment: Observations of the Earth // Journal of Geophysical Research. 1997. Vol. 102. P. 10875–10880.
- 39. Turnbull M.C. et al. Spectrum of a Habitable World: Earthshine in the Near-Infrared // The Astrophysical Journal. 2006. Vol. 644. P. 551–559.
- 40. Wunderlich F. et al. Detectability of atmospheric features of Earth-like planets in the habitable zone around M dwarfs // Astronomy & Astrophysics. 2019. Vol. 624.P. A49.
- 41. Sachkov M.E., Shematovich V.I. Exoplanet Habitability: Potential O2/O3 Biosignatures in the Ultraviolet // Solar System Research. 2019. Vol. 53, № 5. P. 322–331.
- 42. Coustenis A., Taylor F.W. Titan: Exploring an Earthlike World. Second Edition. Singapore: World Scientific Publishing. 2008. Vol. 4.
- 43. Meier R.R. Ultraviolet spectroscopy and remote sensing of the upper atmosphere // Space Science Reviews. 1991. Vol. 58. P. 1–185.
- 44. Kawahara H. et al. Can Ground-based Telescopes Detect the Oxygen 1.27 μm Absorption Feature as a Biomarker in Exoplanets? // The Astrophysical Journal. 2012. Vol. 758. P. 13.

- 45. Summers D.P., Khare B. Nitrogen Fixation on Early Mars and Other Terrestrial Planets: Experimental Demonstration of Abiotic Fixation Reactions to Nitrite and Nitrate // Astrobiology. 2007. Vol. 7. P. 333–341.
- 46. Russell M.J. et al. The variability of stratospheric and mesospheric NO2 in the polar winter night observed by LIMS // Journal of Geophysical Research. 1984. Vol. 89. P. 7267–7275.
- 47. Pallé E. et al. Earth's transmission spectrum from lunar eclipse observations // Nature. 2009. Vol. 459. P. 814–816.
- 48. Summers D.P. et al. Abiotic Nitrogen Fixation on Terrestrial Planets: Reduction of NO to Ammonia by FeS // Astrobiology. 2012. Vol. 12. P. 107–114.
- 49. Barth P. et al. Isotopic constraints on lightning as a source of fixed nitrogen in Earth's early biosphere // Nature Geoscience. 2023. Vol. 16. P. 478–484.
- 50. Barth P. et al. The effect of lightning on the atmospheric chemistry of exoplanets and potential biosignatures // Astronomy and Astrophysics. 2024. Vol. 686. P. A58.
- 51. Nna Mvondo D. et al. Production of nitrogen oxides by lightning and coronae discharges in simulated early Earth, Venus and Mars environments // Advances in Space Research. 2001. Vol. 27. P. 217–223.
- 52. Heays A.N. et al. Nitrogen Oxide Production in Laser-Induced Breakdown Simulating Impacts on the Hadean Atmosphere // Journal of Geophysical Research (Planets). 2022. Vol. 127. P. e06842.
- 53.Barth C.A., Baker D.N., Bailey S.M. Seasonal variation of auroral electron precipitation // Geophysical Research Letters. 2004. Vol. 31. P. L04809.
- 54. Mlynczak M.G. et al. A combined solar and geomagnetic index for thermospheric climate // Geophysical Research Letters. 2015. Vol. 42. P. 3677–3682.
- 55. Rozanov E. et al. Influence of the Precipitating Energetic Particles on Atmospheric Chemistry and Climate // Observing and Modelling Earth's Energy Flows. 2012. Vol. 41. P. 151–169.

- 56. Claringbold A.B. et al. Prebiosignature Molecules Can Be Detected in Temperate Exoplanet Atmospheres with JWST // The Astronomical Journal. 2023. Vol. 166, № 2. P. 39.
- 57. Airapetian V.S. et al. Atmospheric Beacons of Life from Exoplanets Around G and K Stars // Scientific Reports. 2017. Vol. 7. P. 14141.
- 58. Young M.E. et al. Observability of ultraviolet NI lines in the atmosphere of transiting Earth-like planets // Astronomische Nachrichten. 2020. Vol. 341. P. 879–886.
- 59. Horikoshi H., Kameda S., Murakami G. Feasibility studies for the detection of atomic oxygen exospheres of terrestrial planets in the habitable zone of a lowtemperature star with a UV space telescope // American Geophysical Union, Fall General Assembly 2016. 2016. P. P11A-1843.
- 60. Grenfell J.L. et al. Response of Atmospheric Biomarkers to NOx-Induced Photochemistry Generated by Stellar Cosmic Rays for Earth-like Planets in the Habitable Zone of M Dwarf Stars // Astrobiology. 2012. Vol. 12, № 12. P. 1109– 1122.
- 61. Anderson G.P. AFGL atmospheric constituent profiles (0-120km). Hanscom: Optical Physics Division, Air Force Geophysics Laboratory. 1986.
- 62. Gordietz B.F. et al. Chislennoe modelirovanie nagreva i ohlazdeniya gasa v okolozemnom kosmicheskom prostranstve // Trudi FIAN. 1982. Vol. 130, № 1. P. 3–28.
- 63. Roble R.G. Energetics of the mesosphere and thermosphere // Geophysical Monograph Series. 1995. Vol. 87. P. 1–21.
- 64. Johnstone C.P. et al. Upper atmospheres of terrestrial planets: Carbon dioxide cooling and the Earth's thermospheric evolution // Astronomy & Astrophysics. 2018. Vol. 617. P. A107.
- 65. Barth P. et al. The effect of lightning on the atmospheric chemistry of exoplanets and potential biosignatures // Astronomy & Astrophysics. 2024. Vol. 686. P. A58.

- 66. Cann M.W.P. et al. High resolution atmospheric transmission calculations down to 28.7 km in the 200-243-nm spectral range // Applied Optics. 1979. Vol. 18. P. 964.
- 67. Barth C.A. Rocket Measurement of the Nitric Oxide Dayglow // Journal of Geophysical Research. 1964. Vol. 69. P. 3301–3303.
- 68. Barth C.A. Ultraviolet spectroscopy of planets. NASA-CR-67597. 1965.
- 69. Sharp W.E. Sources of the emission features between 2000 and 8000 in the thermosphere // Canadian Journal of Physics. 1986. Vol. 64. P. 1594–1607.
- 70. Langhoff S.R., Bauschlicher C.W. Jr., Partridge H. Theoretical study of the NO γ system // Journal of Chemical Physics. 1988. Vol. 89. P. 4909–4917.
- 71. Feldman P.D. et al. Identification of the UV nightglow from Venus // Nature.1979. Vol. 279. P. 221–222.
- 72. Stewart A.I.F. et al. Morphology of the Venus ultraviolet night airglow // Journal of Geophysical Research. 1980. Vol. 85. P. 7861–7870.
- 73. Bertaux J.-L. et al. Nightglow in the Upper Atmosphere of Mars and Implications for Atmospheric Transport // Science. 2005. Vol. 307. P. 566–569.
- 74. Krasnopolsky V.A. A sensitive search for nitric oxide in the lower atmospheres of Venus and Mars: Detection on Venus and upper limit for Mars // Icarus. 2006. Vol. 182. P. 80–91.
- 75. Cleary D.D. Daytime high-latitude rocket observations of the NO γ, δ, and ε bands // Journal of Geophysical Research. 1986. Vol. 91. P. 11337–11344.
- 76. Rusch D.W., Barth C.A. Satellite measurements of nitric oxide in the polar region// Journal of Geophysical Research. 1975. Vol. 80. P. 3719.
- 77.Barth C.A., Rusch D.W., Stewart A.I. The UV nitric-oxide experiment for Atmosphere Explorer // Radio Science. 1973. Vol. 8. P. 379.
- 78.Barth C.A. Nitric oxide in the lower thermosphere // Planetary and Space Science. 1992. Vol. 40. P. 315–336.
- 79. Barth C.A. et al. The northern auroral region as observed in nitric oxide // Geophysical Research Letters. 2001. Vol. 28, № 8. P. 1463–1466.

- 80. Merkel A.W., Barth C.A., Bailey S.M. Altitude determination of ultraviolet measurements made by the Student Nitric Oxide Explorer // Journal of Geophysical Research. 2001. Vol. 106. P. 30283–30290.
- 81.Barth C.A. Nitric oxide in the lower thermosphere // Planetary and Space Science. 1992. Vol. 40, № 2–3. P. 315–336.
- 82. Barth C.A., Bailey S.M., Solomon S.C. Solar-terrestrial coupling: Solar soft X-rays and thermospheric nitric oxide // Geophysical Research Letters. 1999. Vol. 26, № 9. P. 1251–1254.
- 83. Bermejo-Pantaleón D. et al. Global observations of thermospheric temperature and nitric oxide from MIPAS spectra at 5.3 μm // Journal of Geophysical Research (Space Physics). 2011. Vol. 116. P. A10313.
- 84. Gerard J.-C., Barth C.A. High-latitude nitric oxide in the lower thermosphere // Journal of Geophysical Research. 1977. Vol. 82, № 4. P. 674.
- 85. Cosby P.C. Electron-impact dissociation of nitrogen // Journal of Chemical Physics. 1993. Vol. 98, № 12. P. 9544–9553.
- 86. Walter C.W., Cosby P.C., Helm H. N(⁴S⁰), N(²D⁰), and N(²P⁰) yields in predissociation of excited singlet states of N₂ // Journal of Chemical Physics. 1993. Vol. 99, № 5. P. 3553–3561.
- 87. Shematovich V.I., Bisikalo D.V., Gerard J.C. Non thermal nitrogen atoms in the Earth's thermosphere 1. Kinetics of hot N(⁴S) // Geophysical Research Letters. 1991. Vol. 18, № 9. P. 1691–1694.
- 88. Gérard J.-C., Shematovich V.I., Bisikalo D.V. Non thermal nitrogen atoms in the Earth's thermosphere 2. A source of nitric oxide // Geophysical Research Letters. 1991. Vol. 18. P. 1695–1698.
- 89. Gérard J.-C., Shematovich V.I., Bisikalo D.V. The role of fast N(4S) atoms and energetic photoelectrons on the distribution of NO in the Thermosphere // Geophysical Monograph Series. 1995. Vol. 87. P. 235–241.

- 90. Gérard J.-C. et al. An updated model of the hot nitrogen atom kinetics and thermospheric nitric oxide // Journal of Geophysical Research. 1997. Vol. 102. P. 285–294.
- 91. Siskind D.E. et al. The response of thermospheric nitric oxide to an auroral storm
 2. Auroral latitudes // Journal of Geophysical Research. 1989. Vol. 94, № A12. P. 16899–16911.
- 92. Siskind D.E. et al. On the relationship between the solar soft X ray flux and thermospheric nitric oxide: An update with an improved photoelectron model // Journal of Geophysical Research. 1995. Vol. 100. P. 19687–19694.
- 93. Bailey S.M., Barth C.A., Solomon S.C. A model of nitric oxide in the lower thermosphere // Journal of Geophysical Research (Space Physics). 2002. Vol. 107, № A8. P. 1205.
- 94. Bailey S.M. et al. Measurements of the solar soft X-ray irradiance from the Student Nitric Oxide Explorer // Geophysical Research Letters. 1999. Vol. 26. P. 1255–1258.
- 95. Bailey S.M. et al. Measurements of the solar soft X-ray irradiance by the Student Nitric Oxide Explorer: First analysis and underflight calibrations // Journal of Geophysical Research. Wiley, 2000. Vol. 105. P. 27179–27194.
- 96. Dothe H. et al. A model of odd nitrogen in the aurorally dosed nighttime terrestrial thermosphere // Journal of Geophysical Research (Space Physics). 2002. Vol. 107. P. 1071.
- 97. Sætre C. et al. Thermospheric nitric oxide at higher latitudes: Model calculations with auroral energy input // Journal of Geophysical Research (Space Physics). 2007. Vol. 112. P. A08306.
- 98. Sultanov R.A., Balakrishnan N. Quantum mechanical investigations of the N(⁴S)+O₂(X³Σ_g⁻)→NO(X²Π)+O(³P) reaction // Journal of Chemical Physics. 2006. Vol. 124, № 12. P. 124321–124321.
- 99. Banks P.M., Kockarts G. Aeronomy. New York: Academic Press. 1973.

- 100. Hedin A.E. Extension of the MSIS thermosphere model into the middle and lower atmosphere // Journal of Geophysical Research. 1991. Vol. 96, № A2. P. 1159–1172.
- 101. Bilitza D. et al. International Reference Ionosphere 2016: From ionospheric climate to real-time weather predictions // Space Weather. 2017. Vol. 15, № 2. P. 418–429.
- 102. Tabata T. et al. Analytic cross sections for electron impact collisions with nitrogen molecules // Atomic Data and Nuclear Data Tables. 2006. Vol. 92, № 3. P. 375–406.
- 103. Itikawa Y. Cross Sections for Electron Collisions with Nitrogen Molecules // Journal of Physical and Chemical Reference Data. 2006. Vol. 35, № 1. P. 31–53.
- 104. Itikawa Y. Cross Sections for Electron Collisions with Oxygen Molecules // Journal of Physical and Chemical Reference Data. 2009. Vol. 38, № 1. P. 1–20.
- 105. Anzai K. et al. Cross section data sets for electron collisions with H₂, O₂, CO, CO₂, N₂O and H₂O // European Physical Journal D. 2012. Vol. 66, № 2. P. 36.
- 106. Porter H.S., Jackman C.H., Green A.E.S. Efficiencies for production of atomic nitrogen and oxygen by relativistic proton impact in air // Journal of Chemical Physics. 1976. Vol. 65, № 1. P. 154–167.
- 107. Jackman C.H., Garvey R.H., Green A.E.S. Electron impact on atmospheric gases, I. Updated cross sections // Journal of Geophysical Research. 1977. Vol. 82, № 32. P. 5081.
- 108. Marov M.Ya., Shematovich V.I., Bisikalo D.V. Nonequilibrium Aeronomic Processes: A Kinetic Approach to the Mathematical Modeling // Space Science Reviews. 1996. Vol. 76, № 1–2. P. 1–204.
- 109. Shematovich V.I. et al. Monte Carlo model of electron transport for the calculation of Mars dayglow emissions // Journal of Geophysical Research (Planets). 2008. Vol. 113, № E2. P. E02011.
- 110. Shematovich V.I. Suprathermal particles in astrochemistry // Russian Chemical Reviews. 2019. Vol. 88, № 10. P. 1013–1045.

- 111. Shematovich V.I., Bisikalo D.V., Gerard J.C. The thermospheric odd nitrogen photochemistry Role of non thermal N(4S) atoms // Annales Geophysicae. 1992.
 Vol. 10, № 10. P. 792–801.
- 112. Balakrishnan N., Dalgarno A. Rate coefficients for NO formation in energetic N+O₂ collisions // Chemical Physics Letters. 1999. Vol. 302, № 5. P. 485–488.
- 113. Barth C.A., Bailey S.M. Comparison of a thermospheric photochemical model with Student Nitric Oxide Explorer (SNOE) observations of nitric oxide // Journal of Geophysical Research (Space Physics). 2004. Vol. 109. P. A03304.
- Zipf E.C., McLaughlin R.W. On the dissociation of nitrogen by electron impact and by E.U.V. photo-absorption // Planetary and Space Science. 1978. Vol. 26. P. 449–462.
- 115. Borst W.L., Zipf E.C. Cross Section for Electron-Impact Excitation of the (0,0) First Negative Band of N+2 from Threshold to 3 keV // Physical Review A. 1970. Vol. 1. P. 834–840.
- 116. Colegrove F.D., Hanson W.B., Johnson F.S. Eddy Diffusion and Oxygen Transport in the Lower Thermosphere // Journal of Geophysical Research. 1965. Vol. 70. P. 4931–4941.
- 117. Pearce J.B. Nitric oxide gamma band emission rate factor. // Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer. 1969. Vol. 9. P. 1593–1602.
- 118. Cravens T.E. Nitric oxide gamma band emission rate factor // Planetary and Space Science. 1977. Vol. 25. P. 369–372.
- Luque J., Crosley D.R. LIFBASE: Database and spectral simulation program (version 1.5) // SRI international report MP. 1999. Vol. 99, № 009.
- 120. Chamberlain J.W. Physics of the aurora and airglow. New York: Academic Press. 1961.
- 121. Bender S. et al. Retrieval of nitric oxide in the mesosphere and lower thermosphere from SCIAMACHY limb spectra // Atmospheric Measurement Techniques. Copernicus, 2013. Vol. 6. P. 2521–2531.

- 122. Farmer A.J.D., Hasson V., Nicholls R.W. Absolute oscillator strength estimates for some bands of the beta-system of nitric oxide. // Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer. 1972. Vol. 12. P. 635–638.
- 123. Marr G.V. Electronic transition moments and their effects on the band strengths and absorption oscillator strengths of the NO β and γ systems // Proceedings of the Physical Society. 1964. Vol. 83. P. 293–300.
- 124. Tatum J.B. The Interpretation of Intensities in Diatomic Molecular Spectra // The Astrophysical Journal Supplement Series. 1967. Vol. 14. P. 21.
- 125. Trad H. et al. Experimental study and calculations of nitric oxide absorption in the $\gamma(0,0)$ and $\gamma(1,0)$ bands for strong temperature conditions // Journal of Quantitative Spectroscopy & Radiative Transfer. 2005. Vol. 90. P. 275–289.
- 126. Reisel J.R., Carter C.D., Laurendeau N.M. Einstein coefficients for rotational lines of the (0, 0) band of the NO A2Σ+-X2Π system. // Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer. 1992. Vol. 47. P. 43–54.
- 127. Engleman R., Rouse P.E. The β and γ bands of nitric oxide observed during the flash photolysis of nitrosyl chloride // Journal of Molecular Spectroscopy. 1971. Vol. 37. P. 240–251.
- 128. Berk A. et al. MODTRAN6: a major upgrade of the MODTRAN radiative transfer code // Proceedings of the SPIE. 2014. Vol. 9088. P. 7.
- Hall L.A., Anderson G.P. High-resolution solar spectrum between 2000 and 3100 Å. // Journal of Geophysical Research. 1991. Vol. 96. P. 12,927-12,931.
- Holstein T. Imprisonment of Resonance Radiation in Gases // Physical Review. 1947. Vol. 72. P. 1212–1233.
- Emmert J.T. et al. NRLMSIS 2.1: An Empirical Model of Nitric Oxide Incorporated Into MSIS // Journal of Geophysical Research (Space Physics).
 2022. Vol. 127. P. e2022JA030896.
- 132. Schreier F. et al. GARLIC A general purpose atmospheric radiative transfer line-by-line infrared-microwave code: Implementation and evaluation // Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer. 2014. Vol. 137. P. 29–50.

- 133. Schreier F. et al. Transmission spectroscopy with the ACE-FTS infrared spectral atlas of Earth: A model validation and feasibility study // Molecular Astrophysics. 2018. Vol. 11. P. 1–22.
- 134. Keller-Rudek H. et al. The MPI-Mainz UV/VIS Spectral Atlas of Gaseous Molecules of Atmospheric Interest // Earth System Science Data. 2013. Vol. 5, № 2. P. 365–373.
- 135. Selwyn G., Podolske J., Johnston H.S. Nitrous oxide ultraviolet absorption spectrum at stratospheric temperatures // Geophysical Research Letters. 1977. Vol. 4, № 10. P. 427–430.
- 136. Schneider W. et al. Absorption cross-sections of NO2 in the UV and visible region (200 – 700 nm) at 298 K // Journal of Photochemistry and Photobiology A: Chemistry. 1987. Vol. 40, № 2. P. 195–217.
- 137. Wu R.C.Y. et al. Measurements of High-, Room-, and Low-Temperature Photoabsorption Cross Sections of SO₂ in the 2080- to 2950-Å Region, with Application to Io // Icarus. 2000. Vol. 145, № 1. P. 289–296.
- Gordon I.E. et al. The HITRAN2020 molecular spectroscopic database // Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer. 2022. Vol. 277. P. 107949.
- 139. Bates D.R. Rayleigh scattering by air // Planetary and Space Science. 1984.
 Vol. 32, № 6. P. 785–790.
- 140. Tennyson J. et al. The 2024 release of the ExoMol database: Molecular line lists for exoplanet and other hot atmospheres // Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer. 2024. Vol. 326. P. 109083.
- 141. García Muñoz A. et al. Glancing Views of the Earth: From a Lunar Eclipse to an Exoplanetary Transit // The Astrophysical Journal. 2012. Vol. 755. P. 103.
- 142. U.S. standard atmosphere, 1976 // NOAA ST76-1562. Washington. 1976.
- 143. Fally S. et al. Fourier Transform Spectroscopy of the O2 Herzberg Bands. III. Absorption Cross Sections of the Collision-Induced Bands and of the Herzberg Continuum // Journal of Molecular Spectroscopy. 2000. Vol. 204. P. 10–20.

- Kaltenegger L., Traub W.A. Transits of Earth-like Planets // The Astrophysical Journal. 2009. Vol. 698. P. 519–527.
- 145. von Paris P. et al. Spectroscopic characterization of the atmospheres of potentially habitable planets: GL 581 d as a model case study // Astronomy and Astrophysics. 2011. Vol. 534. P. A26.
- 146. Belu A.R. et al. Primary and secondary eclipse spectroscopy with JWST: exploring the exoplanet parameter space // Astronomy and Astrophysics. 2011. Vol. 525. P. A83.
- 147. Snellen I. et al. Combining high-dispersion spectroscopy with high contrast imaging: Probing rocky planets around our nearest neighbors // Astronomy and Astrophysics. 2015. Vol. 576. P. A59.
- 148. Medallon S., Rickman E., Brown J. STIS Instrument Handbook for Cycle 32v. 23. 2023. Vol. 23. P. 23.
- 149. Diaz R. Zodiacal Light contribution for the UV ETC background.: CDBS-CRDS 2015-001. 2015. P. 7.
- 150. Gialluca M.T. et al. Characterizing Atmospheres of Transiting Earth-like Exoplanets Orbiting M Dwarfs with James Webb Space Telescope // Publications of the Astronomical Society of the Pacific. 2021. Vol. 133. P. 054401.
- 151. Perryman M. The Exoplanet Handbook. Cambridge: Cambridge University Press. 2018.
- 152. Doyon R. Do Temperate Rocky Planets Around M Dwarfs have an Atmosphere? // arXiv e-prints. 2024. arXiv.2403.12617. URL: https://ui.adsabs.harvard.edu/abs/2024arXiv240312617D
- Chakraborty H. et al. SAGE: A tool for constraining the impacts of stellar activity on transmission spectroscopy // Astronomy & Astrophysics. 2024. Vol. 685. P. A173.
- 154. Villanueva G.L. et al. Fundamentals of the Planetary Spectrum Generator. Greenbelt. 2022.

- 155. Sachkov M. et al. World Space Observatory: ultraviolet mission: status 2022
 // Space Telescopes and Instrumentation 2022: Ultraviolet to Gamma Ray / ed. den Herder J.-W.A., Nikzad S., Nakazawa K. 2022. Vol. 12181. P. 121812S.
- Savanov I.S. et al. Spectrograph unit of the "Spektr-UF" space mission // A.A.
 Boyarchuk Memorial Conference / ed. Bisikalo D.V., Wiebe D.S. 2018. P. 364–369.
- 157. Shugarov A., Sachkov M. Spektr–UF Mission Spectrograph Space Qualified CCD Detector Subsystem // Photonics. 2023. Vol. 10, № 9. P. 1032.
- 158. Tsurikov G.N. et al. "Spektr-UF" exposure calculator: the first web version for users // INASAN Science Reports. 2024. Vol. 10, № 1. P. 12–31.
- 159. Fossati L. et al. Major prospects of exoplanet astronomy with the World Space Observatory-UltraViolet mission // Astrophysics and Space Science. 2014. Vol. 354, № 1. P. 9–19.
- 160. Sachkov M., Shustov B., Gómez de Castro A.I. WSO-UV project // Advances in Space Research. 2014. Vol. 53, № 6. P. 990–995.
- 161. Shugarov A. et al. UV detectors for spectrographs of WSO-UV project // Astrophysics and Space Science. 2014. Vol. 354, № 1. P. 169–175.
- 162. Guyon O. et al. Theoretical Limits on Extrasolar Terrestrial Planet Detection with Coronagraphs // The Astrophysical Journal Supplement Series. 2006. Vol. 167. P. 81–99.
- Tavrov A. et al. Common-path achromatic rotational-shearing coronagraph // Optics Letters. 2011. Vol. 36. P. 1972.
- 164. Tavrov A. et al. Stellar imaging coronagraph and exoplanet coronal spectrometer: two additional instruments for exoplanet exploration onboard the WSO-UV 1.7-m orbital telescope // Journal of Astronomical Telescopes Instruments and Systems. 2018. Vol. 4, № 4. P. 044001.
- 165. Frolov P. et al. Achromatic interfero-coronagraph with variable rotational shear: reducing of star leakage effect, white light nulling with lab prototype //

Journal of Astronomical Telescopes, Instruments, and Systems. 2016. Vol. 2. P. 011002.

- 166. Johnstone C.P. et al. Extreme hydrodynamic losses of Earth-like atmospheres in the habitable zones of very active stars // Astronomy & Astrophysics. 2019. Vol. 624. P. L10.
- 167. Nakayama A., Ikoma M., Terada N. Survival of Terrestrial N₂-O₂ Atmospheres in Violent XUV Environments through Efficient Atomic Line Radiative Cooling // Astrophysical Journal. 2022. Vol. 937, № 2. P. 72.
- 168. Ribas I. et al. Evolution of the Solar Activity over Time and Effects on Planetary Atmospheres. I. High-Energy Irradiances (1-1700 Å) // Astrophysical Journal. 2005. Vol. 622, № 1. P. 680–694.
- 169. Scalo J. et al. M Stars as Targets for Terrestrial Exoplanet Searches And Biosignature Detection // Astrobiology. 2007. Vol. 7. P. 85–166.
- 170. France K. et al. The Ultraviolet Radiation Environment around M dwarf Exoplanet Host Stars // The Astrophysical Journal. 2013. Vol. 763. P. 149.
- 171. McDonald G.D., Kreidberg L., Lopez E. The Sub-Neptune Desert and Its Dependence on Stellar Type: Controlled by Lifetime X-Ray Irradiation // The Astrophysical Journal. 2019. Vol. 876. P. 22.
- 172. Johnstone C.P., Bartel M., Güdel M. The active lives of stars: A complete description of the rotation and XUV evolution of F, G, K, and M dwarfs // Astronomy and Astrophysics. 2021. Vol. 649. P. A96.
- 173. Nakayama A., Ikoma M., Terada N. Survival of Terrestrial N2-O2 Atmospheres in Violent XUV Environments through Efficient Atomic Line Radiative Cooling // The Astrophysical Journal. 2022. Vol. 937. P. 72.
- 174. Seaton M.J. Excitation processes in the aurora and airglow 1. Absolute intensities, relative ultra-violet intensities and electron densities in high latitude aurorae // Journal of Atmospheric and Terrestrial Physics. 1954. Vol. 4. P. 285– 294.

- 175. Dalgarno A., Latimer I.D., McConkey J.W. Corpuscular bombardment and N₂⁺ radiation // Planetary and Space Science. 1965. Vol. 13, № 10. P. 1008–1009.
- 176. Jursa A.S. Handbook of geophysics and the space environment, 4th edition.1985.
- 177. Savanov I.S. On the Activity of Stars (Including Those with Planetary Systems) from Observations of the Kepler and K2 Missions // Astrophysical Bulletin. 2021. Vol. 76. P. 157–162.
- 178. Reinhold T. et al. The Sun is less active than other solar-like stars // Science.2020. Vol. 368. P. 518–521.
- 179. Savanov I.S. Proton Fluxes of Solar-Type Stars with Planetary Systems // Astronomy Reports. 2024. Vol. 68. P. 934–937.
- 180. Maehara H. et al. Statistical properties of superflares on solar-type stars based on 1-min cadence data // Earth, Planets and Space. 2015. Vol. 67. P. 59.
- 181. Okamoto S. et al. Statistical Properties of Superflares on Solar-type Stars: Results Using All of the Kepler Primary Mission Data // The Astrophysical Journal. 2021. Vol. 906. P. 72.
- 182. Su T. et al. Magnetic Activity and Physical Parameters of Exoplanet Host Stars Based on LAMOST DR7, TESS, Kepler, and K2 Surveys // The Astrophysical Journal Supplement Series. 2022. Vol. 261. P. 26.
- 183. Vidotto A.A. The evolution of the solar wind // Living Reviews in Solar Physics. 2021. Vol. 18, № 1. P. 3.
- 184. Khodachenko M.L. et al. Coronal Mass Ejection (CME) Activity of Low Mass M Stars as An Important Factor for The Habitability of Terrestrial Exoplanets. I. CME Impact on Expected Magnetospheres of Earth-Like Exoplanets in Close-In Habitable Zones // Astrobiology. 2007. Vol. 7. P. 167–184.
- 185. Cherenkov A. et al. The Influence of Coronal Mass Ejections on the Massloss Rates of Hot-Jupiters // The Astrophysical Journal. 2017. Vol. 846. P. 31.

- 186. Linsky J.L., Güdel M. Exoplanet Host Star Radiation and Plasma Environment // Characterizing Stellar and Exoplanetary Environments / ed. Lammer H., Khodachenko M. 2015. Vol. 411. P. 3.
- 187. Ribas I. et al. Evolution of the Solar Activity Over Time and Effects on Planetary Atmospheres. II. kappa Ceti, an Analog of the Sun when Life Arose on Earth // Astrophysical Journal. 2010. Vol. 714, № 1. P. 384–395.
- 188. Claire M.W. et al. The Evolution of Solar Flux from 0.1 nm to 160 μm: Quantitative Estimates for Planetary Studies // Astrophysical Journal. 2012. Vol. 757, № 1. P. 95.
- 189. Güdel M., Guinan E.F., Skinner S.L. The X-Ray Sun in Time: A Study of the Long-Term Evolution of Coronae of Solar-Type Stars // Astrophysical Journal. 1997. Vol. 483, № 2. P. 947–960.
- 190. Wood B.E. et al. New Mass-Loss Measurements from Astrospheric Ly alpha Absorption // Astrophysical Journal Letters. 2005. Vol. 628, № 2. P. L143–L146.
- Wood B.E., Linsky J.L., Güdel M. Stellar Winds in Time // Characterizing Stellar and Exoplanetary Environments / ed. Lammer H., Khodachenko M. 2015. Vol. 411. P. 19.
- 192. Aarnio A.N., Matt S.P., Stassun K.G. Mass Loss in Pre-main-sequence Stars via Coronal Mass Ejections and Implications for Angular Momentum Loss // The Astrophysical Journal. 2012. Vol. 760. P. 9.
- 193. Izakov M.N. On the Structure of the Neutral Upper Atmosphere // Space Science Reviews. 1967. Vol. 7, № 5–6. P. 579–641.
- 194. Bauer S.J., Lammer H. Planetary aeronomy: atmosphere environments in planetary systems. Berlin: Springer. 2004.
- 195. Schunk R., Nagy A. Ionospheres: Physics, Plasma Physics, and Chemistry. 2009.
- 196. Singh V., Gerard J.-C. The thermospheric heating efficiency under electron precipitation conditions // Planetary and Space Science. 1982. Vol. 30, № 11. P. 1083–1089.

- 197. Oberheide J. et al. Impact of tropospheric tides on the nitric oxide 5.3 µm infrared cooling of the low-latitude thermosphere during solar minimum conditions // Journal of Geophysical Research (Space Physics). 2013. Vol. 118, № 11. P. 7283–7293.
- 198. Dodd J.A. et al. Vibrational relaxation of NO(v=1) by oxygen atoms // Journal of Chemical Physics. 1999. Vol. 111, № 8. P. 3498–3507.
- 199. Caledonia G.E., Kennealy J.P. NO infrared radiation in the upper atmosphere // Planetary and Space Science. 1982. Vol. 30, № 10. P. 1043–1056.
- 200. Lammer H. et al. Origin and loss of nebula-captured hydrogen envelopes from `sub'- to `super-Earths' in the habitable zone of Sun-like stars // Monthly Notices of the Royal Astronomical Society. 2014. Vol. 439. P. 3225–3238.
- 201. Luger R. et al. Habitable Evaporated Cores: Transforming Mini-Neptunes into Super-Earths in the Habitable Zones of M Dwarfs // Astrobiology. 2015. Vol. 15.
 P. 57–88.
- 202. Kurokawa H., Nakamoto T. Mass-loss Evolution of Close-in Exoplanets: Evaporation of Hot Jupiters and the Effect on Population // The Astrophysical Journal. 2014. Vol. 783. P. 54.
- Owen J.E., Wu Y. Kepler Planets: A Tale of Evaporation // The Astrophysical Journal. 2013. Vol. 775. P. 105.
- 204. Owen J.E., Lai D. Photoevaporation and high-eccentricity migration created the sub-Jovian desert // Monthly Notices of the Royal Astronomical Society. 2018. Vol. 479. P. 5012–5021.
- 205. Bisikalo D.V. et al. Gas envelopes of exoplanets hot Jupiters // Physics Uspekhi. 2021. Vol. 64. P. 747–800.
- 206. Zhang M. et al. Detection of Atmospheric Escape from Four Young Mini-Neptunes // The Astronomical Journal. 2023. Vol. 165. P. 62.
- 207. Simpson L.L., Simpson D.G. Estimating Atmospheric Mass Using Air Density // arXiv e-prints. 2018. arXiv:1810.08658. URL: http://arxiv.org/abs/1810.08658

- 208. Kopparapu R.K. et al. Habitable Zones around Main-sequence Stars: New Estimates // The Astrophysical Journal. 2013. Vol. 765. P. 131.
- 209. Barnes R. et al. VPLanet: The Virtual Planet Simulator // Publications of the Astronomical Society of the Pacific. 2020. Vol. 132, № 1008. P. 024502.
- 210. France K. et al. The Ultraviolet Radiation Environment around M dwarf Exoplanet Host Stars // The Astrophysical Journal. 2013. Vol. 763. P. 149.
- 211. Segura A. et al. Ozone Concentrations and Ultraviolet Fluxes on Earth-Like Planets Around Other Stars // Astrobiology. 2003. Vol. 3, № 4. P. 689–708.
- 212. Segura A. et al. Biosignatures from Earth-Like Planets Around M Dwarfs // Astrobiology. 2005. Vol. 5, № 6. P. 706–725.
- Meadows V.S. et al. The Habitability of Proxima Centauri b: Environmental States and Observational Discriminants // Astrobiology. 2018. Vol. 18. P. 133– 189.
- 214. France K. et al. The MUSCLES Treasury Survey. I. Motivation and Overview// The Astrophysical Journal. 2016. Vol. 820. P. 89.
- 215. Loyd R.O.P. et al. Current Population Statistics Do Not Favor Photoevaporation over Core-powered Mass Loss as the Dominant Cause of the Exoplanet Radius Gap // Astrophysical Journal. 2020. Vol. 890, № 1. P. 23.
- 216. Morrissey P. et al. The Calibration and Data Products of GALEX // The Astrophysical Journal Supplement Series. 2007. Vol. 173. P. 682–697.
- 217. Shematovich V.I., Marov M.Y. Escape of planetary atmospheres: physical processes and numerical models // Physics Uspekhi. 2018. Vol. 61. P. 217.
- 218. Bird G.A. Molecular gas dynamics. Clarendon Press. 1976.
- 219. Pickles A.J. A Stellar Spectral Flux Library: 1150-25000 Å // Publications of the Astronomical Society of the Pacific. 1998. Vol. 110, № 749. P. 863–878.
- 220. Lovos F.V., Díaz R.F., Nieto L.A. Null transit detections of 68 radial-velocity exoplanets observed by TESS // Astronomy & Astrophysics. 2022. Vol. 665. P. A157.

- 221. Sreejith A.G. et al. Ca II H&K stellar activity parameter: a proxy for extreme ultraviolet stellar fluxes // Astronomy and Astrophysics. 2020. Vol. 644. P. A67.
- 222. France K. et al. The extreme-ultraviolet stellar characterization for atmospheric physics and evolution (ESCAPE) mission concept // Proceedings of the SPIE. 2019. Vol. 11118. P. 14.
- 223. Sanz-Forcada J. et al. Estimation of the XUV radiation onto close planets and their evaporation // Astronomy and Astrophysics. 2011. Vol. 532. P. A6.
- 224. Linsky J.L., Fontenla J., France K. The Intrinsic Extreme Ultraviolet Fluxes of F5 V TO M5 V Stars // The Astrophysical Journal. 2014. Vol. 780. P. 61.
- 225. France K. et al. Far-ultraviolet Activity Levels of F, G, K, and M Dwarf Exoplanet Host Stars // The Astrophysical Journal Supplement Series. 2018. Vol. 239. P. 16.
- 226. Foster G. et al. Exoplanet X-ray irradiation and evaporation rates with eROSITA // Astronomy and Astrophysics. 2022. Vol. 661. P. A23.
- Kislyakova K.G. et al. X-ray detection of astrospheres around three mainsequence stars and their mass-loss rates // Nature Astronomy. 2024. Vol. 8. P. 596– 605.
- 228. Шематович В. И. и др. Наблюдения горячих экзопланет как новый инструмент исследования и прогноза космической погоды // ФИЗМАТ. 2023. № 1. С. 33–54.
- 229. Sreejith A.G. et al. CUTE Reveals Escaping Metals in the Upper Atmosphere of the Ultrahot Jupiter WASP-189b // The Astrophysical Journal. 2023. Vol. 954. P. L23.
- 230. Руменских М. Моделирование транзитных поглощений теплого нептуна WASP-69 b линиях метастабильного гелия // Астрономический Журнал. 2025. В печати.