



HAL
open science

Contribution à l'étude des entrées d'énergie solaire dans l'ionosphère : Ions doublement chargés et transport cinétique des protons - Application à la Terre et à Titan

Cyril Simon

► **To cite this version:**

Cyril Simon. Contribution à l'étude des entrées d'énergie solaire dans l'ionosphère : Ions doublement chargés et transport cinétique des protons - Application à la Terre et à Titan. Astrophysique [astro-ph]. Université Joseph-Fourier - Grenoble I, 2006. Français. NNT : . tel-00109802

HAL Id: tel-00109802

<https://theses.hal.science/tel-00109802>

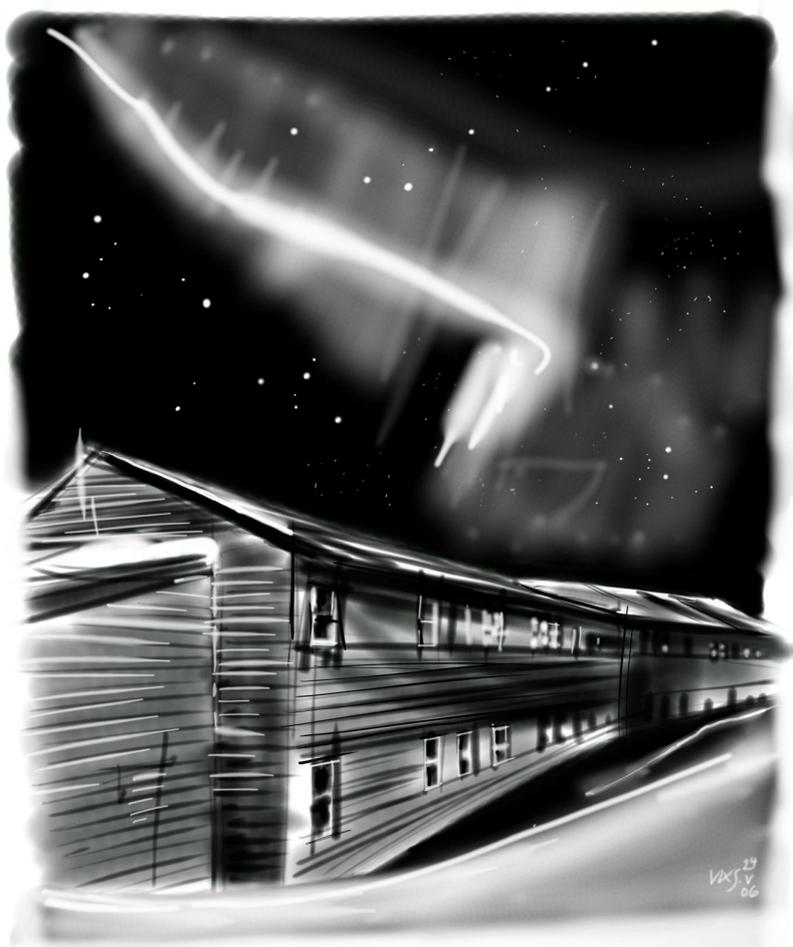
Submitted on 25 Oct 2006

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.



Contribution à l'étude des entrées d'énergie solaire dans
l'ionosphère :
ions doublement chargés et transport cinétique des protons
Application à la Terre et à Titan



Cyril Simon

Laboratoire de Planétologie de Grenoble, UJF/CNRS
Observatoire des Sciences de l'Univers de Grenoble
Université Joseph Fourier de Grenoble, France

Université Joseph Fourier · Grenoble I
Ecole Doctorale de Physique

THÈSE

Pour obtenir le grade de
DOCTEUR DE L'UNIVERSITÉ JOSEPH FOURIER
préparée au Laboratoire de Planétologie de Grenoble, UJF/CNRS

Spécialité : Astrophysique
Présentée et soutenue publiquement

par

Cyril Simon

Le 19 juin 2006

Contribution à l'étude des entrées d'énergie solaire dans
l'ionosphère :
ions doublement chargés et transport cinétique des protons
Application à la Terre et à Titan



Composition du jury :

Mme Odile DUTUIT	Directeur de Recherche, LCP	Rapporteur
M. François FORME	Professeur, Université de Versailles	Rapporteur
M. Jøran MOEN	Professeur, Université d'Oslo	Examineur
M. Hermann OPGENOORTH	Professeur, Université d'Uppsala, ESTEC	Examineur
M. Gilles HENRI	Professeur, Université Joseph Fourier	Examineur
M. Wlodek KOFMAN	Directeur de Recherche, LPG	Examineur
M. Jean LILENSTEN	Chargé de Recherche, LPG	Directeur de Thèse

Université Joseph Fourier · Grenoble I
Ecole Doctorale de Physique

A MONOGRAPH
for the degree of
DOCTOR SCIENTIARUM of the UNIVERSITÉ JOSEPH FOURIER,
prepared at Laboratoire de Planétologie de Grenoble, UJF/CNRS

Speciality: Astrophysics
Publicly presented and defended

by

Cyril Simon

on 19 June 2006

Contribution to the study of energy inputs of solar origin in
the ionosphere:
doubly-charged ions and proton kinetic transport
Application to the Earth and Titan



Jury composition :

Mrs. Odile DUTUIT	Director of Research, LCP	Referee
Mr. François FORME	Professor, Université de Versailles	Referee
Mr. Jøran MOEN	Professor, Universitetet i Oslo	Examiner
Mr. Hermann OPGENOORTH	Professor, Uppsala Universitet and ESTEC	Examiner
Mr. Gilles HENRI	Professor, Université Joseph Fourier	Examiner
Mr. Wlodek KOFMAN	Director of Research, LPG	Examiner
Mr. Jean LILENSTEN	Charged of Research, LPG	Supervisor

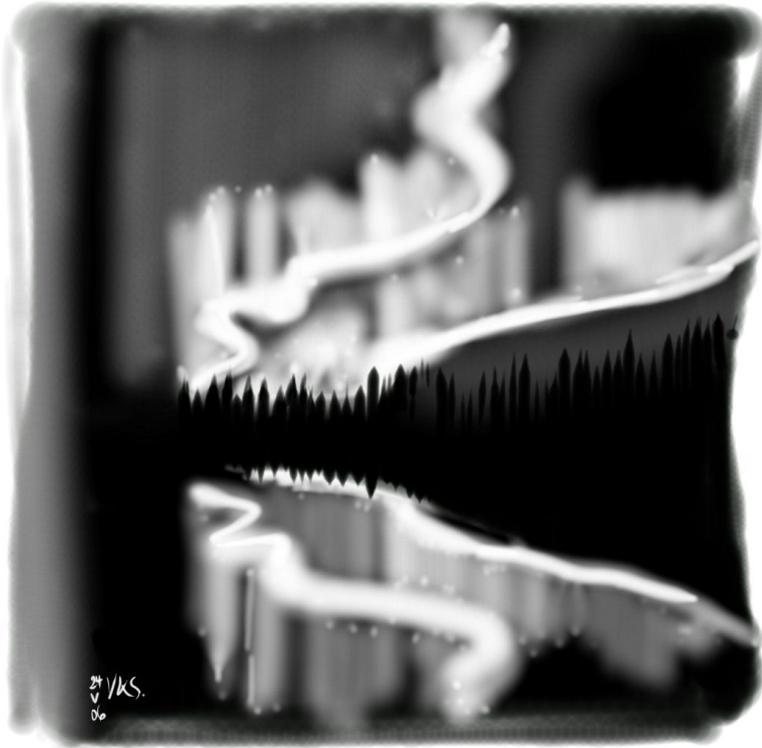
Illustrations et dessins : Véronique K. Simon

Photographies : Cyril Simon

À mon clan,

Had I the heavens' embroidered cloths,
Enwrought with golden and silver light,
The blue and the dim and the dark cloths
Of night and light and the half light,
I would spread the cloths under your feet:
But I, being poor, have only my dreams;
I have spread my dreams under your feet;
Tread softly because you tread on my dreams.

W.B. Yeats, *He Wishes For the Cloths of Heaven*



Nordlyset pulserer over meg

Nordlyset
Pulserer over meg
Jeg kan ingenting gjøre
Og kan du høre
Min lengsel etter iskald natt?
Det fiolete og hvite
Kaster seg rundt meg
Og tar med meg
Inn i evighet
Og over glemte fjell.

Det kaller på meg
Der ute etsted
Et sus som alltid vil forbli
En kryptisk og glemt melodi
Over hustak og vann
Noe i meg dør
Og jeg faller tilbake
Til barndom og stille natt –
Alt bra jeg har forlatt
I min søken etter vind.

Håvard J. Nilsen, 'Betelgeuse'.

Sommaire

Bilan de recherche - Résumé	v
Research summary	vii
L'invitation au voyage - Remerciements	ix
Préambule.....	15
Organisation du texte	21

Acte I Les ions doublement chargés.....25

Chapitre 1 Comment modéliser les ions doublement chargés ?27

1.1 Retour aux sources	28
1.2 Modèle de photoproduction des ions N_2^{++}, O_2^{++} et O^{++}	30
1.2.1 Paramètres géométriques de caractérisation de l'atmosphère ...	31
1.2.2 Production des ions	32
1.3 Calcul des productions secondaires grâce au modèle TRANSCAR.....	36
1.3.1 Formulation du transport cinétique.....	36
1.3.2 Production secondaire	41
1.3.3 Détail de la modélisation	41
1.4 Sections efficaces d'ionisation	47
1.4.1 Calcul des sections efficaces sur les boîtes d'énergie du flux	47
1.4.2 Détermination des sections efficaces.....	48
1.4.3 Sections efficaces de photoionisation pour N_2 , O_2 et O	51
1.4.4 Sections efficaces d'ionisation double par impact électronique ..	54

Chapitre 2 Validation, comparaison et résultats. De la Terre à Titan

57

2.1 Productions primaires	58
2.1.1 Paramètres de modélisation et modifications attendues	58
2.1.2 Analyse de la production primaire d'ions et d'électrons.....	59
2.1.3 Sensibilité aux conditions d'activité solaire et à la latitude	61
2.2 Étude comparée des productions primaires et secondaires....	74
2.2.1 Caractéristiques générales	74
2.2.2 Forme générale des productions électroniques.....	74
2.2.3 Sensibilité aux paramètres géophysiques.....	77
2.3 Récapitulons (I)	85
2.3.1 Productions primaires.....	85
2.3.2 Productions secondaires.....	85
2.3.3 Productions totales.....	86

2.4	Modèle photochimique et concentrations	87
2.4.1	Réactions chimiques.....	87
2.4.2	Calcul des concentrations ioniques entre 100 et 500 km.....	90
2.4.3	Validation du modèle.....	91
2.4.4	Conclusion préliminaire : validation et limites du modèle.....	96
2.4.5	Sensibilité des concentrations aux paramètres géophysiques....	97
2.5	Récapitulons (II)	104
2.6	Résultats sur Titan	106
2.6.1	Présentation générale.....	106
2.6.2	L'atmosphère de Titan et application aux ions N_2^{++}	108
2.6.3	Description du modèle photochimique diurne.....	110
2.6.4	Résultats.....	111
2.6.5	Conclusions.....	112
Chapitre 3 Conclusions et perspectives de l'Acte I		113
3.1	Détection d'ions doublement chargés dans les ionosphères planétaires	114
3.1.1	Spectrométrie de masse.....	114
3.1.2	Spectroscopie optique des dications.....	114
3.1.3	Fluorescence.....	115
3.2	Conclusion de l'acte I	117
<u>Acte II Modélisation couplée des protons et des électrons dans l'ionosphère terrestre</u>		121
Chapitre 4 Description of Trans4 and building of a coupled electron-proton code		127
4.1	On the importance of proton precipitation: a brief history ...128	
4.1.1	Ground-based and rocket observations of hydrogen lines.....	128
4.1.2	A bit of theory: the proton transport modelling issue.....	130
4.2	The birth of TRANS4: coupling Protons and Electrons, a multi-coupled ionospheric model	133
4.2.1	Boltzmann's dissipative equation.....	133
4.2.2	Principles for an analytical solution (Galand <i>et al.</i> , 1997).....	138
4.2.3	The magnetic mirroring effect and collisional angular redistributions.....	140
4.2.4	Coupling electrons with protons.....	145
4.2.5	Computing the hydrogen emission line zenith profiles.....	147
Chapitre 5 Acceleration and physical validation of Trans4		151
5.1	Acceleration of the code	152
5.1.1	Temporization of the protons.....	153
5.1.2	Convergence criteria for the solving scheme.....	154
5.1.3	Update of the mathematical routines.....	155

5.2	Validation.....	157
5.2.1	Energy conservation for the proton part.....	158
5.2.2	Energy conservation for the electron kinetic part.....	159
5.2.3	Energy loss per electron-ion pair.....	161
Chapitre 6 Study of the event 22-01-2004: a coordinated ground-based/satellite comparison		165
6.1	Geophysical description of the event and data processing ...	166
6.1.1	Geographic overview	166
6.1.2	Solar and geophysical conditions.....	167
6.1.3	Coordinations: a geomagnetic and physical point of view.....	168
6.1.4	The ESR run	170
6.1.5	The DMSP F13 pass over Svalbard: a description of the particle fluxes	176
6.1.6	The Ebert-Fastie spectrometer data: the H_{α} and H_{β} lines	179
6.2	Comparison between measurements and computations.....	186
6.2.1	Optical data: modelled parameterization of the impact of protons	187
6.2.2	Comparison to radar data and validation of the approach	201
6.2.3	A refined description of the ionosphere.....	209
Chapitre 7 Conclusions and perspectives for Act II		215
7.1	What the TRANS4 model is	216
7.1.1	A brief summary of TRANS4	216
7.1.2	What TRANS4 brings	217
7.1.3	What can be done in the future	218
7.2	Before concluding.....	219
<u>Acte III Épilogue : où le voile se lève Synthèse.....</u>		<u>223</u>
<u>Acte IV Papers and Invited Conference</u>		<u>233</u>
Paper 1	Prediction and modelling of doubly-charged ions in the Earth's ionosphere.....	235
Paper 2	Prediction of a N_2^{++} layer in the upper atmosphere of Titan .	253
Paper 3	A fast computation of the diurnal secondary ion production in the ionosphere of Titan	259
Paper 4	Considering the polarization of the oxygen thermospheric red line for Space Weather studies.....	265
Paper 5	<i>Invited Talk and article</i> TRANS4: A new kinetic/fluid ionospheric code including protons and electrons	281
<u>Références scéniques</u>		<u>295</u>

Bilan de recherche - Résumé

Ce travail se propose de modéliser les ionosphères planétaires comme celles de la Terre et de Titan à travers notamment les processus de transport cinétique des électrons et des protons.

Du côté jour, la principale source d'énergie est la photoionisation de la thermosphère par le flux solaire extrême ultraviolet et le transport des électrons secondaires produits. Ces processus ont été modélisés pour la première fois dans le cas des ions doublement chargés N_2^{++} , O_2^{++} et O^{++} . Les résultats de la simulation sont comparés avec succès aux seules données disponibles sur Terre pour O^{++} . De cette validation expérimentale, nous prédisons ainsi la présence d'ions moléculaires doublement chargés dans l'ionosphère de la Terre et de Titan. Nous présentons ensuite une étude de sensibilité des concentrations ioniques aux paramètres géophysiques qui permettra dans le futur la recherche systématique de ces ions dans les atmosphères denses de planètes et de satellites.

La deuxième source d'énergie est la précipitation directe des électrons et des protons au sommet de l'ionosphère. Nous détaillons la genèse du modèle d'ionosphère TRANS4, à travers le couplage et l'optimisation de différents codes de transport cinétique et fluide capables de prendre en compte simultanément les précipitations d'électrons et de protons. Ce modèle constitue un outil unique et cohérent de diagnostic de l'impact combiné des protons et des électrons sur l'ionosphère en permettant notamment le calcul des profils de raies Balmer de l'hydrogène. Afin de valider et de tester le modèle en conditions réelles, nous étudions ensuite un événement sol/satellite coordonné, le 22 janvier 2004. Cet événement a permis une approche quantitative du comportement de l'ionosphère soumis à un événement actif proton-électrons, sous le triple angle des données radar, satellite et optique. Les perspectives sont nombreuses et le portage du code dans d'autres ionosphères telles Titan, Mars ou Vénus est une voie de recherche privilégiée, qui coïncide avec les mesures en direct des sondes Cassini (NASA/ESA), Mars Express et Vénus Express (ESA).

Une collaboration étroite avec le Laboratoire de Chimie Physique (LCP, Orsay) ainsi qu'avec les universités d'Oslo et de Svalbard (UNIS) a été menée tout au long de ce travail.

Mots-clefs : *Ionosphères planétaires – Planétologie comparée – Modélisation numérique – Ions doublement chargés N_2^{++} , O_2^{++} et O^{++} – Transport cinétique des protons et des électrons – Terre – Titan – Coordinations sol/satellite – radars EISCAT.*

Research summary

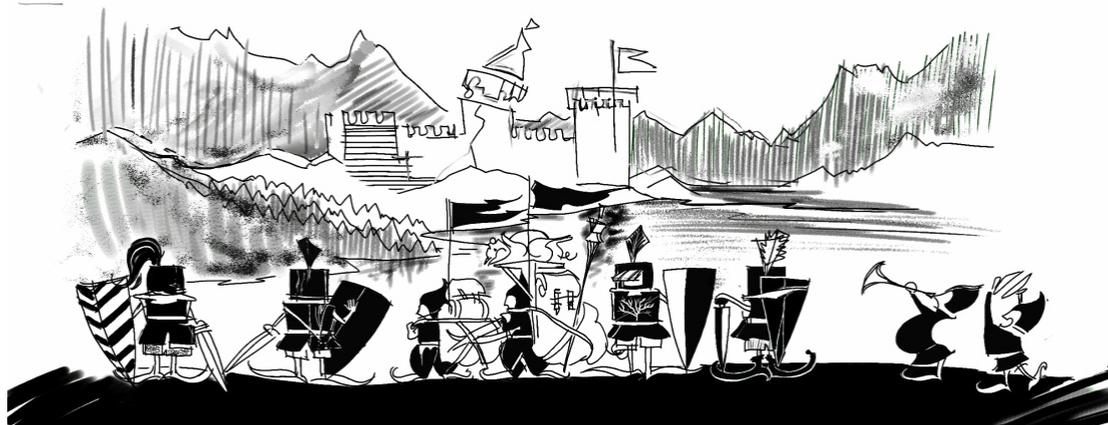
This PhD project consists in the modelling of planetary ionospheres such as those of the Earth and Titan through high-energy transport processes occurring on the dayside and on the nightside at auroral latitudes.

On the day side, a main source of interaction is the photoionisation of the atmosphere by the EUV solar flux and the transport of the secondary electron then produced. This process has been modelled for the first time in the case of the doubly-charged ions N_2^{++} , O_2^{++} and O^{++} . The results are successfully compared to the few atmospheric O^{++} data available on Earth, for which a very good agreement is found. This validation of our theoretical approach leads to the first prediction of molecular dications in the Earth's and Titan's ionospheres. A pioneer sensitivity study to geophysical conditions has then been performed, which allows to search systematically for multiply-charged ions in other dense planetary atmospheres (Venus and Mars).

The second source of ionisation is the direct precipitation of solar-wind electrons and protons at the top of the ionosphere. As a dynamical coupling and an updating of different kinetic codes, a consistent kinetic/fluid proto-electron numerical model called TRANS4 has been built during my research, which makes it a unique tool to get a precise diagnostics of combined proton and electron impacts in the ionosphere. To validate and test the model, I have studied several coordinated ground-based/satellite events, for which I give a precise description of the ionosphere from the optical, radar and satellite points of view. Perspectives are numerous, and one privileged track is to port the whole model to other planetary atmospheres, such as Mars, Venus or Titan, a will that coincides with the exciting success of Mars Express, Venus Express (ESA) and Cassini-Huygens (NASA/ESA) planetary missions.

A fruitful collaboration with the Physico-Chemistry Laboratory (LCP, Orsay, France) as well as with the University of Oslo and the University Centre in Svalbard (UNIS, Norway) was successfully led throughout the building of this work.

Keywords: *Planetary ionospheres – Comparative planetology – Numerical modelling – Doubly-charged ions N_2^{++} , O_2^{++} and O^{++} – Kinetic transport of protons and electrons – Earth – Titan – Coordinated satellite and ground-based instruments – EISCAT radars.*



L'invitation au voyage - Remerciements



*On ne voit bien qu'avec le cœur.
L'essentiel est invisible pour les yeux.
Antoine de Saint-Exupéry, Le Petit Prince.*

Dans tout manuscrit de thèse, ce paragraphe est un passage obligé. Mon inquiétude, c'est qu'il y en a du monde à remercier ! Je pourrais me contenter d'un joyeux « Merci » vu l'ampleur de la tâche. Mais voilà, comme vous le remarquerez dans l'exposé de ce travail, je suis parfois quelque peu volubile...

Cela fait donc deux ans et demi que « je sers la science » (certains diront que c'est ma joie), trois années universitaires organisées autour de ce long séjour central en Norvège. Il y a donc eu un avant et un après Norvège, et c'est pourquoi je ferai le récit de ces rencontres successives, comme un petit carnet de route.

Avant toute chose, j'aimerais remercier mon directeur de thèse, Jean Lilensten, pour sa patience et son impatience, sa curiosité de tous les instants et sa volonté indéfectible de porter ses étudiants, en leur insufflant courage et détermination. J'ai profité avec bonheur à la fois de ses conseils et de sa culture tant littéraire que scientifique. Ce furent trois années intenses, séparées parfois par la distance et les océans, mais trois années inoubliables, où le doute et les épreuves n'ont jamais entamé notre confiance en l'avenir. Jean, cela fait plusieurs années maintenant que

l'on se connaît, et avec le recul, je ne pouvais choisir meilleur directeur de thèse. M'offrir le jour de ma thèse des copies des premiers articles de Boltzmann, notre maître à tous, a été une grande émotion. La découverte de Kuruma, Saramago, García Márquez restera indissociable de ces petits moments partagés à Svalbard, dans la tempête de neige, lors de la campagne française d'observations radars. De l'amitié et de la confiance entre nous, il en fallait pour tenir et continuer à avancer à plus de 2000 km de distance ! En un mot : Merci !

Mes remerciements vont aussi à Monsieur Wlodek Kofman, directeur du Laboratoire de Planétologie de Grenoble, pour m'avoir accueilli et encouragé dans ma volonté de faire une thèse au LPG, pour ses conseils, parfois critiques mais toujours constructifs, et notamment lors de la rédaction du manuscrit de thèse. Je le remercie également d'avoir accepté de faire partie de mon jury de thèse.

Jeg vil takke Professor Jøran Moen på Universitetet i Oslo for hans vennlighet og effektivitet. Han var min andre veileder mens jeg var i Norge. Hans entusiasme og veiledning gjennom modelleringen og tolkningen koordinerte målinger var helt avgjørende. Han var villig til å være en del av juryen som

ix





REMERCIEMENTS - ACKNOWLEDGEMENTS

bedømte min doktorgradsavhandling, og for dette er jeg veldig takknemlig. Takk Jøran! Det var så fint å bli kjent med din familie. Jeg vil gjerne snart komme tilbake til Norge.

J'aimerais également remercier mon jury de thèse. Madame Odile Dutuit tout d'abord qui a toujours cru en mon travail et qui, avec gentillesse et pédagogie, m'a fait connaître un domaine, la physico-chimie, qui m'était inconnu. Lors de notre collaboration pendant cette première année de thèse, j'ai compris l'importance de créer des ponts entre disciplines et l'enthousiasme de chacun a été tellement communicatif ! J'aimerais remercier aussi l'équipe du Laboratoire de Chimie Physique d'Orsay, dont Roland Thissen, pour son efficacité diabolique à trouver des sections efficaces introuvables, et Christian Alcaraz pour ses explications pleines de pédagogie. L'EGU 2005 en votre compagnie a été un véritable bonheur ! Odile, Roland, Christian, merci pour votre confiance et votre gentillesse de tous les instants !

My warm thanks go to Prof. Hermann Opgenoorth as well, who has followed my evolution along four intense years, since we met in Uppsala for my Master's degree. From Uppsala to Grenoble, his advices and wonder in front of any particular aspect of physics, and his thorough review of the present manuscript have helped me to grow up!

Monsieur François Forme, ensuite, que j'aimerais remercier chaleureusement pour sa disponibilité et sa façon de relativiser quelques jours avant le grand oral. Notre rencontre à Kiruna fut très enrichissante. Merci François pour ton amitié, ta gentillesse, ta faculté de t'émerveiller, j'espère bien continuer à travailler avec toi !

Je voudrais remercier aussi Monsieur Gilles Henri, professeur à l'UJF, qui m'a fait la gentillesse d'accepter de présider mon jury de thèse. Depuis le DEA d'Astrophysique, que de chemin parcouru !

Enfin, j'aimerais également remercier un ancien thésard de Jean, Mathieu Barthélemy, maître de conférences à l'Université Joseph

Fourier, pour sa gentillesse, ses conseils et ses encouragements de tous les instants. Le camping sur la crête du Col d'Èze, la semaine de l'EGU à Nice, restera un moment d'anthologie, entre pluie diluvienne, vent à décorner les rennes et pitonnage au beau milieu de la nuit. J'attends avec impatience les prochains colloques avec toi Mathieu !

Merci aussi à Chantal Lathuillère, qui m'a souvent conforté dans mes choix, et qui s'est toujours intéressée à mon travail par une lecture critique et attentive.

Ces remerciements ne seraient pas complets sans évoquer, année après année, les rencontres et les personnes hors du commun avec qui j'ai partagé les expériences parfois les plus inattendues.

An I. Grenoble. Je salue les anciens doctorants du LPG, Jean-François Nouvel et Frédéric Culot, pour leur soutien sans faille et les discussions que nous avons eues sur tous les sujets. Je suis redevable aussi à Fabrice Madec dit « Bonne nouvelle de nos amis d'Outre Quévrin amateurs de batavia », mon ancien co-bureau et (néanmoins) ami, avec qui j'ai partagé un an de galère, bercé au gré de la musique de *M* et de *U2*. Fabrice, après ma conversion à Debian, ma trahison Ubuntu (*cf.* plus bas 'nouveau co-bureau') te reste en travers du gosier, je fais amende honorable et tu resteras un maître pour moi. Je remercie également Vanessa Langevin, notre ancienne joyeuse secrétaire, pour les fous rires et son efficacité à son poste... et tous les stagiaires de passage, maintenant thésards ou en entreprise, avec qui je garde des liens d'amitié : Aurélien Robert, Andrea Chiavassa, Lilia Solovieva et Sergey Anouhkine, Bénédicte Lemieux, et Mathieu Lonjaret.

An II. Svalbard. A un jet de pierre du pôle Nord, j'ai eu la chance de vivre au sein de la communauté de Svalbard, dans l'ambiance si particulière des grands espaces noirs et blancs, où la rudesse des éléments pousse à créer des liens, à « s'approprier » plus vite que partout ailleurs. Quatre mois de nuit polaire, une expérience emprunte de poésie et de beauté...





REMERCIEMENTS - ACKNOWLEDGEMENTS

I wish to thank warmly Fred Sigernes, Dag Lorentzen for making me discover the auroral observations at the auroral station, and and Jeff Holmes, our beloved station manager, for the neverending conversations we had, a glass of whatever liquid in the hand, around the grate in the main hall of UNIS. My stay at Svalbard was more than productive thanks to you three guys!

Mention spéciale à François Huppert, de l'Observatoire de Haute Provence et manie-tout de l'interféromètre EPIS dans la station aurorale, pour ses explications patientes et les conversations agréables que nous avons eues autour d'une table à Huset.

The EISCAT Svalbard team up 'Gruve 7' has been as always incredible. Halvard Boholm and Halvor Horn have always been here to help me on the experiments. I won't forget our mountain climbing (or crawling?) under the hardest snow storm recorded in ten years with Paul Gallop, Chris Davis (RAL) and Halvor Horn in early December 2004, not forgetting Yasunobu Ogawa, my Japanese friend who tried in vain to explain me the basics of Japanese during the following 48-hour of non-stop observations, while green aurora were dancing under the solar-wind breeze.



I will neither forget the shovelling snow sessions which took place at the end of the winter season in March, under -35°C : Anja Strømme, from UNIS and the University of Tromsø, who has always so kindly followed my steps for my first radar observations, with pedagogy and patience, Tony van Eycken, Lord of EISCAT and director of EISCAT who has always showed me interest in my work, and

Tom Grydeland, from the University of Tromsø. It took us 7 days to remove the 40 tons of snow out of this damned French 42-m antenna. When is the next shovelling session? I am in for this one as well!



I would like to mention also my friends and fellow students at UNIS with whom I have shared unique moments during our numerous trips, Maria Kvalevåg, Marc de Dinechin, Benoît "Killer Surprise" Bizet (qui m'a initié aux sons norvégiens du groupe Madrugada), Nicolas Serre, Kim Senger (the Northernmost Czech in the World), Mats Björkman, Magnus Andersson, Lasse Clausen, Sigrid and Pål Elvenes and Elisabeth Cooper. To witness the coming back of the sun under -30°C was a magical moment touched by grace.

Back to Oslo. Jeg ville igjen takke Gruppen for Plasma- og Romfysikk ved Universitetet i Oslo. Her finnes briljante mennesker som bestandig vil være mine venner, blant andre Ellen Osmundsen og Gaute Birkeli, Andreas 'bra man' Nielsen, Sevim Müller og Njål Gulbrandsen, Yvonne Rinne, Jon "Xu Cong" Qiu and Espen Trondsen. Jeg vil også takke Kjellmar Oksavik (Johns Hopkins, USA), Anette Borg, Björn Lybekk, Alv Egeland, Lars Lyngdal, Karl Måseide, Patrick Guio and Jan Kenneth Bekkeng for deres entusiasme og hjelp med mitt arbeid. Mon séjour norvégien a été également fantastique grâce à la famille Andersen, nos amis franco-norvégiens, Rosette et Erik, qui nous ont chouchoté à Hurum-la-campagne. Merci à tous deux et à leurs enfants sensationnels !





REMERCIEMENTS - ACKNOWLEDGEMENTS

Mitt opphold i Oslo ville så avgjort ha vært mindre givende uten Kjersti, Håvard og Nilsen familien, som ønsket meg og min søster velkommen til deres flotte hjem i Nordland, "The Land Of The Sleeping Stone Giants", which comes alive to the sound of Coldplay and Gåte. Takk for oss, dere er velkomme til Frankrike! Det å lære og fiske samt å gå på Svartisen har gitt meg noen av de flotteste erfaringene i år! Vårt vennskap vil bestå.

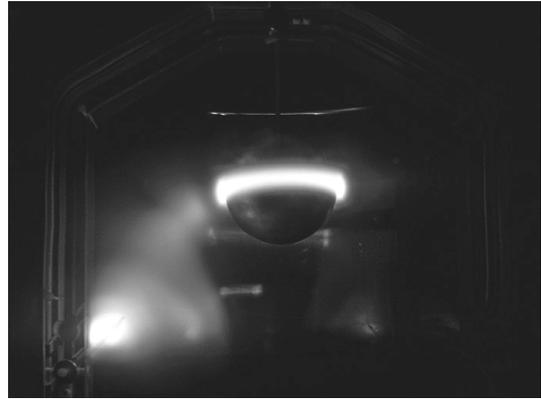
Kiruna. I won't forget the friends I have made in Kiruna, from poor students like me as Erdal 'Sprechen Sie English' Yigit, Karim 'table tennis' Kuyeng Ruis, Csilla Szasz and Johan Kero, Mirela Voiculescu, Lisa Rosenqvist, Alan 'Monochromatic friend' Wood, Joanna Sullivan, to the more experienced researchers Raj Kumar Choudhary (Western Ontario, Canada), Mike Rietveld and Cesar La Hoz (EISCAT Tromsø).



An III. Trieste. I would like also to thank Mauro Messerotti for my dreams becoming true after the success of the Terrella experiments we mounted for the first time at Trieste for the International Geophysics School in May 2006. Our emotion was so powerful! Building one Terrella per school in the world would represent the ultimate tribute to Birkeland's pioneer work. My first visit to Slovenia with Jean was enriching. And to Mario Damasso: my friend, we will publish one day a French/English/Italian version of de Mairan's book!

Grenoble, le retour. Je salue mes amis et jeunes compagnons du LPG, Lydie Bonal, Antoine Pommerol (mon nouveau et cher co-bureau qui m'a fait tomber dans Ubuntu, cf. plus haut), Jérémie Mouginot et Céline,

Frédéric Schmidt, Donia Baklouti, Pierre 'I'm a gift' Volcke et Nicolas Fray (P.I. de nombreuses



manips anti-personnelles), pour qui j'ai une amitié particulière, après toutes ces moments passés à leur côté. Chacun a une part importante dans la (bonne) rédaction de cette longue monographie, je ne saurais trop les en remercier. Les liens qu'on établit pendant sa thèse sont paraît-il éternels... Bonne chance à tous les gars !

J'adresse mes plus vifs remerciements aux différentes équipes du LPG. Il y a d'abord l'équipe *Comètes, satellites et planètes glacées, Grains interstellaires* sous la houlette du Grand Maître Bernard Schmitt, avec dans le rôle du souffre-douleur Eric 'Méchant Thésard' Quirico, avec également Jean-Michel Bernard, Sylvain Doute et Etienne Deforas (qui ont souffert de mes assauts photographiques), et Olivier Brissaud, notre responsable adulé des manips au laboratoire. Je remercie également l'équipe *Missions Spatiales* et ses membres Alain Hérique, Alain Roux et Laurent Reiffsteck pour les nombreuses discussions amicales que nous avons eues. Aux commandes de la gestion informatique, je n'oublie pas Béatrice Pibaret, sa bonne humeur et son efficacité de tous les instants (sans elle, que ferait-on ?), et à celles du secrétariat Syhem Perriot et Daniel Finazzo. Je vous remercie tous pour votre gentillesse et votre indulgence vis-à-vis du thésard le plus sonore depuis plusieurs années. À bientôt et merci !

Je suis également reconnaissant à Frédéric Pitout (désormais au LPG) et Olivier Witasse (ESTEC), qui avec amitié et soutien,





REMERCIEMENTS - ACKNOWLEDGEMENTS

ont toujours été là pour me conseiller et m'aider dans mes réflexions. Travailler avec vous deux a toujours été un bonheur !

I wish to send my friendly regards as well to Betty Lanchester (Southampton, UK), Herbert C. Carlson and William B. Denig (AFRL, USA), James Wild and Mike Kosch (Lancaster), Vikki Howells and Ian McCrea (RAL, UK) for their support and the interesting discussions we had together.

Messieurs Henri Rème (CESR, Toulouse) et Benoît Lavraud (Los Alamos, USA) sont aussi indissociables de ce travail, tant dans la recherche d'événement coordonnés Cluster/ESR que dans l'interprétation initiale des données satellite. Mes remerciements vont aussi à Pierre-Louis Blelly (LPCE, Orléans), qui m'a aidé avec patience dans la compréhension des rouages de la partie fluide de Transcar. Qu'ils aient ici tous trois ma gratitude !

Soutenance de thèse. Je suis reconnaissant à M. et Mme Soutif, Fabien Vignes-Tourneret, Catherine Nozières, Guillaume Gronoff, Vincent Peyaud et Cédric Fourmy (entre Oslo et Grenoble) et à tous ceux (dont mes oncles et tantes) qui m'ont fait l'amitié d'assister à ma soutenance de thèse, un moment qui restera marquant dans ma vie de vieil étudiant... ou de jeune chercheur...

Je dédie avec tendresse cette thèse à mon clan, fou de Norvège, mes parents, ma sœur et ma grand-mère adorée de 97 ans, sans qui je ne serais pas là. Le tourbillon de mes inquiétudes, de mes tristesses, de mes joies et de mes succès

nous a parfois fait douter, mais nous avons toujours gardé le cap avec détermination :

« Pour l'enfant, amoureux de cartes et d'estampes,
L'univers est égal à son vaste appétit.
Ah! que le monde est grand à la clarté des lampes!
Aux yeux du souvenir que le monde est petit!

Un matin nous partons, le cerveau plein de flamme,
Le coeur gros de rancune et de désirs amers,
Et nous allons, suivant le rythme de la lame,
Berçant notre infini sur le fini des mers »

Baudelaire, *Le voyage*.

Je pense aussi à mon grand-père horticulteur qui nous a quittés trop tôt et qui nous a communiqué à ma sœur et à moi l'amour du paysage.

Je garde, comme ultime paragraphe de ces longs carnets de route, une pensée pour ces mineurs de la ville russophone de Barentsburg, à Svalbard, qui m'ont accueilli un soir de février 2005, un soir en clair-obscur à la lumière de petites chandelles à l'intensité vacillante, dans un intérieur chaud et dépouillé où les icônes de la Vierge côtoyaient les images de pin-ups américaines. Ils m'ont appris que le désert arctique, comme le désert de Saint-Exupéry, rapproche les hommes, malgré l'obstacle de la langue, de la culture, de la distance. Un petit théâtre du bout du monde, les ombres de nos gestes s'étirant sous la fébrilité de l'éclairage, qui m'a fait sentir le prix de l'amitié et du partage.

Takk for meg mine kjære venner ! Fram!



Préambule

« Il est certain, comme on le démontrera d'après un grand nombre d'observations qui ne sont pas équivoques, que l'Atmosphère du Soleil [...] atteint quelquefois jusqu'à l'Orbite Terrestre. C'est alors que la matière qui compose cette Atmosphère venant à rencontrer les parties supérieures de notre air, en deçà des limites où la Pesanteur universelle, quelle qu'en soit la cause, commence à agir avec plus de force vers le centre de la Terre que vers le Soleil, tombe dans l'Atmosphère Terrestre à plus ou moins de profondeur, selon que la pesanteur spécifique est plus ou moins grande, eu égard aux couches d'air qu'elle traverse, ou qu'elle surnage. »

Jean-Jacques Dortous de Mairan, *Traité historique et physique de l'aurore boréale.*

De Mairan avait vu juste. Lorsqu'en 1733, alors membre de l'Académie des Sciences et physicien reconnu, il parle intuitivement de relation entre le Soleil et la Terre, le principal mécanisme d'échange d'énergie dans la haute atmosphère terrestre est posé. Il faudra encore l'ajout d'un champ magnétique comme ingrédient indispensable de la physique des aurores boréales (une relation découverte accidentellement par l'astronome suédois Anders Celsius et son assistant Olof Hiorter en 1747), et comme point d'orgue les expériences du physicien norvégien Kristian Birkeland, plus d'un siècle et demi plus tard (Birkeland, 1896), pour enfin comprendre et simuler la formation des aurores polaires.

Cette thèse est comme un écho à ces premiers pas qui ont mené à la naissance de la Géophysique moderne, les anglo-saxons parlant eux de *Space Physics*, un terme qui a l'avantage d'englober toutes les planètes du système solaire en une seule expression. Avec le recul, les écrits de de Mairan préfigurent les concepts phares de la géophysique. « L'Atmosphère Solaire » de de Mairan, c'est le *vent solaire*, ce flux continu de particules très énergétiques, ions, protons et électrons

essentiellement, éjectées en permanence de la couronne solaire. La matière qui la compose et « tombe dans l'Atmosphère Terrestre », ce sont les *précipitations d'électrons et de protons*, qui, en fonction de leur énergie initiale, se déposent à plus ou moins haute altitude dans l'ionosphère.

Au cours de cette thèse, ma préoccupation a été l'étude des processus d'entrée d'énergie dans la haute atmosphère sous l'angle de la modélisation du transport cinétique des particules énergétiques, électrons et protons. La région d'étude se situe typiquement entre 90 et 800 *km* d'altitude sur Terre, une région où particules neutres – constituant *la thermosphère* – et ions –formant *l'ionosphère* – se mêlent intimement et qui est soumise à la fois au vent solaire et à l'environnement magnétique de la Terre. Cette thèse s'inscrit dans un cadre plus général, la météorologie de l'espace, et concrétise la volonté de la communauté de construire des modèles d'ionosphère cohérents et les plus complets possibles. Deux processus complémentaires impliquant des énergies très suprathermiques sont exposés dans ce manuscrit, la double photoionisation d'une part, l'ionisation par impact du flux (H^+, H) d'autre part.

Chacun de ces processus fait appel au formalisme cinétique et statistique de Boltzmann, développé mathématiquement il y a plus d'un siècle, formalisme qui constituera la clef de voute de ce travail. À travers l'utilisation du code d'ionosphère TRANSCAR, acronyme de TRANSport au CARré et développé au LPG, et la construction d'un code couplé proton-électron pour rendre compte des précipitations combinées (H^+, e^-), nous verrons la puissance de ce formalisme et sa capacité à rendre compte de la structure fine des ionosphères planétaires.

Deux constats préliminaires s'imposent. Jusqu'à maintenant, seuls les ions simplement chargés ont été considérés dans l'atmosphère de la Terre, l'influence des ions multiplement chargés étant toujours négligée. De surcroît, les dernières mesures en laboratoire ont pu montrer que les sections efficaces de création de tels ions peuvent représenter une part significative de l'ionisation totale. Il est donc clair que, pour affiner notre description des ionosphères denses planétaires, nous devons envisager la présence des ions multiplement chargés et à plus forte raison celle des ions doublement chargés ou *dications*.

Sur Terre, seulement quelques mesures fiables existent et il manque une statistique poussée en fonction des paramètres géophysiques¹ que sont l'activité solaire (représentée par exemple par l'indice de flux solaire radio mesuré à 10,7 *cm* de longueur d'onde ou $f_{10.7}$), l'activité magnétique (indice A_p) ou l'angle solaire zénithal (noté χ). L'ambition est donc de modéliser pour la première fois, grâce au transport, les concentrations des ions N_2^{++} , O_2^{++} et O^{++} sur Terre, une idée qui fait suite aux études simplifiées menées à la fin des années 1970 sur l'ion O^{++} (Breig *et*

¹ Pour une description des indices géophysiques, *cf.* Mayaud (1980).

al., 1977 ; Avakyan, 1978a). Ainsi, productions primaires par photoionisation directe des composants neutres, productions secondaires via ionisation par les photoélectrons primaires créés et enfin pertes dues aux réactions chimiques avec le gaz neutre, sont à expliciter avant de pouvoir calculer les concentrations des ions. Cette modélisation a été incluse dans le code d'ionosphère TRANSCAR. L'apport d'un électron supplémentaire par ionisation aura, nous le verrons, un effet important en fonction de l'altitude, mais aussi de l'activité solaire et de l'heure du jour.

La première partie de cette thèse (Acte I) se propose donc d'étudier les ions doublement chargés dans l'atmosphère de la Terre ; après validation grâce aux quelques mesures disponibles, cette approche sera par la suite étendue à Titan. Nous verrons également que le modèle, en plus de permettre l'étude statistique des dications, donne des prédictions sur certaines constantes de vitesse difficiles à mesurer en laboratoire.

Pour compléter le tableau des entrées d'énergie dans l'ionosphère, il manque la compréhension des précipitations de particules, protons et électrons. Le transport des électrons suprathermiques est bien compris et modélisé, et ce depuis de nombreuses années. Il n'en est pas de même pour le transport des protons : l'un des écueils de ce mécanisme est qu'il est resté presque totalement décorrélé des études sur les électrons. On étudie en général ou les électrons ou les protons, rarement les deux. Or il est évident que cette dichotomie est réductrice vis-à-vis de la réalité physique puisque, le plus souvent, on observe des précipitations simultanées d'électrons et de protons. Les aurores à protons (*proton aurorae*) sont en général contaminées par les précipitations électroniques. Il existe déjà des modèles cinétiques séparés tels que TRANSCAR ou le code de transport cinétique hydrogène/protons développé par Galand & Lilensten (1996). L'idée est donc de coupler dynamiquement ces deux modèles afin d'obtenir une information sur l'impact relatif des protons et des électrons sur un événement donné : la partie fluide de TRANSCAR va nous permettre alors d'accéder directement aux concentrations ioniques, températures et taux d'ionisation dus aux protons pour un faisceau originel combiné.

L'Acte II de cette thèse se propose ainsi de construire un modèle couplé protons-électrons capable de rendre compte de l'apport d'énergie observé lors des événements les plus complexes enregistrés par les instruments, qu'ils soient embarqués sur satellite ou au sol. Nous verrons ainsi la genèse de TRANS4, le couplage dynamique effectué, sa validation physique et son optimisation numérique. Le calcul des profils de raies Doppler ainsi que celui des redistributions angulaires est également présenté et a fait l'objet d'une réécriture des codes originaux. Il sera temps ensuite de confronter notre modèle tout neuf avec un événement géophysique particulièrement intense en terme de précipitations de protons et d'électrons, et qui

bénéficie d'une large couverture instrumentale (radars, spectrophotomètres, satellite).

Ce travail de thèse est aussi l'histoire d'une collaboration internationale pluridisciplinaire que nous avons pu mettre en place ces dernières années au Laboratoire de Planétologie de Grenoble (LPG). Pour tout ce qui concerne la chimie, l'obtention des sections efficaces d'interaction prises en entrée de nos modèles d'ionosphères, nous nous sommes appuyés sur l'expérience en la matière du Laboratoire de Chimie Physique (LCP), situé à Orsay, où nous avons pu bénéficier des dernières mesures en laboratoire de l'équipe *Physico-Chimie des Ions en Phase Gazeuse* dirigée par Odile Dutuit et composée notamment de Roland Thissen et Christian Alcaraz. Par ailleurs, ma deuxième année de thèse s'est déroulée en Norvège, dans l'archipel de Svalbard (situé dans le cornet polaire) pour la campagne d'observations de l'hiver 2004-2005 sous la houlette de Fred Sigernes, Dag Lorentzen (UNIS – University Centre in Svalbard) et Anja Strømme (EISCAT ESR), puis à Oslo sous la direction de Jøran Moen (Gruppen for Plasma- og Romfysikk, Université d'Oslo) pour la partie interprétation et couplage des codes d'ionosphère. Une aventure scientifique autant qu'humaine.

Comme je l'ai mentionné, le point de départ de la modélisation repose sur le modèle d'ionosphère TRANSCAR (Lilensten et Blelly, 2002). Développé conjointement au LPG et au CESR², ce modèle est composé au départ de deux descriptions physiques couplées basées sur le formalisme de Boltzmann (Fig. *i*). Les entrées de TRANSCAR sont les profils verticaux des constituants neutres de l'atmosphère donnés par le modèle MSIS-90³ (Hedin, 1991), le flux solaire EUV (Tobiska, 1991, 1993), les sections efficaces de photoionisation et les constantes de réaction (Rees, 1989 ; LCP).

La première description résout l'équation cinétique de transport dissipative de Boltzmann qui donne l'évolution du flux stationnaire des électrons suprathermiques depuis le sommet de l'ionosphère jusqu'à sa base, et à laquelle on applique l'hypothèse de stationnarité : pertes et sources d'électrons s'équilibrent à tout instant. En sortie, on obtient les productions d'excitation et d'ionisation des constituants neutres, ainsi que le chauffage des électrons thermiques.

La deuxième description concerne le transport fluide macroscopique : grâce aux productions d'ionisation produites par la partie cinétique, on résout les quatre premiers moments de la fonction de distribution pour les ions et les électrons thermiques. Chaque espèce i est alors décrite par sa concentration n_i (ordre 0), sa vitesse \mathbf{u}_i (ordre 1), sa température T_i (ordre 2) et son flux de chaleur \mathbf{q}_i (ordre 3). On

² Centre d'Étude Spatiale des Rayonnements, situé à Toulouse.

³ Le modèle *Mass Spectrometer and Incoherent Scatter* ou MSIS est construit à partir de nombreuses mesures (radars, fusées).

appelle cette approximation l'*approximation 8-moments*, car les 4 paramètres n_i , u_i , E_i et q_i sont respectivement un scalaire (dimension $d_1 = 1$), un vecteur ($d_2 = 3$), un scalaire ($d_3 = 1$) et un vecteur ($d_4 = 3$), soit en tout 8 « moments » (Schunk, 1977). La relation de fermeture des équations porte sur une condition sur la forme de la fonction de distribution qui permet d'explicitier les moments de plus haut ordre comme une fonction des moments de plus bas ordre.

Une troisième approche est incluse dans TRANSCAR qui ajoute une composante horizontale à la dynamique de l'ionosphère due à la présence de champs électriques de convection. Des cartes de potentiel, données par exemple par les radars à diffusion cohérente SuperDARN⁴ situés dans les régions polaires, sont alors nécessaires pour décrire l'évolution d'un tube de flux sous l'action d'un champ électrique.

En plus des productions d'ionisation et des concentrations, températures et flux de chaleur, des sorties annexes de TRANSCAR sont le calcul des émissions lumineuses aurorales dont les plus intenses sont la raie rouge à 630 nm et la raie verte à 557,7 nm (Culot *et al.*, 2004) ainsi que le TEC (*Total Electron Content* ou *Contenu en Électrons Total*), utilisé comme traceur de l'ionosphère.

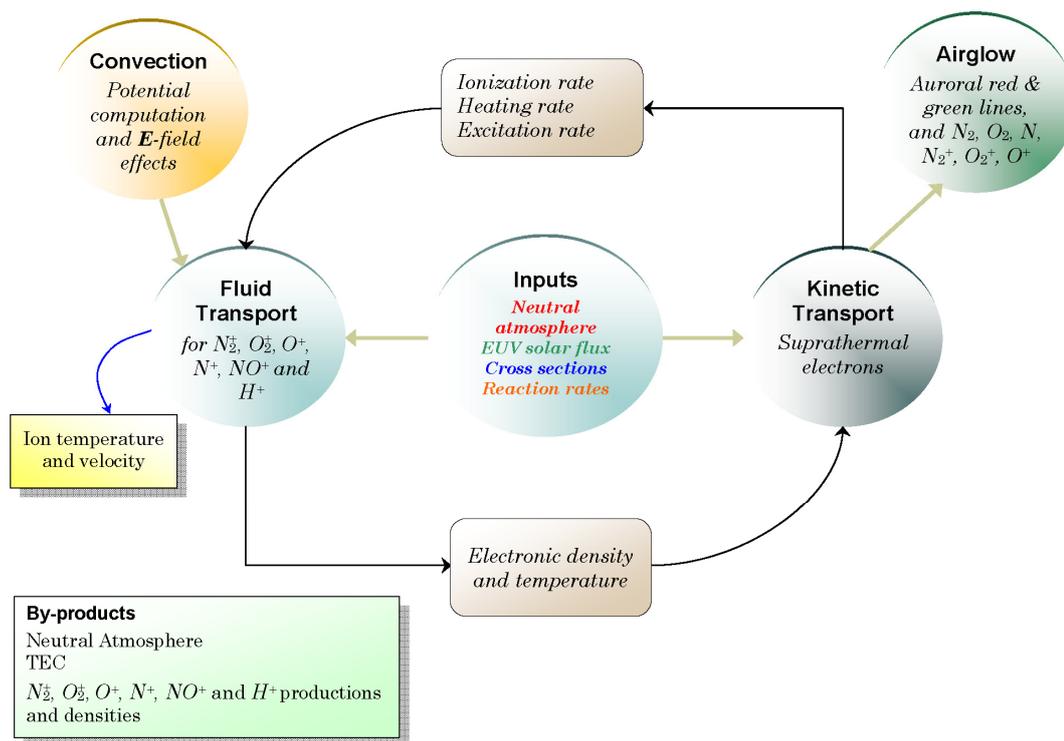


Fig. i – Modèle d'ionosphère TRANSCAR : couplage du transport cinétique avec le transport fluide.

⁴ Le Super Dual Auroral Radar Network est un réseau composé de 10 radars dans l'hémisphère auroral nord et 7 dans l'hémisphère sud dédiés notamment à l'étude de la convection ionosphérique.

PRÉAMBULE

Gardons en mémoire la Fig. *i* : elle témoignera à la fin de ce manuscrit de l'évolution du code pendant ces deux ans et demi.

Organisation du texte

*All the world's a stage
And all the men and women merely players
They have their exits and entrances
And one man in his time plays many parts
His acts being seven ages.*

William Shakespeare, *As You Like It*.

Ce manuscrit de thèse s'organise en deux principaux actes, qui constituent la trame de mon travail de doctorant au Laboratoire de Planétologie de Grenoble, au long de ces deux années et demi d'échange et de collaborations en Norvège et en France.

Les deux actes correspondent à un thème principal qui donne le titre principal à ce travail, à savoir la modélisation des processus à haute énergie dans l'ionosphère de la Terre et de Titan, avec la prise en compte pour la première fois de la double photoionisation d'une part et des précipitations de protons d'autre part. Chaque thème correspond à une partie, l'une en français (ions doublement chargés), l'autre en anglais (impact des protons).

Le premier acte porte donc sur la modélisation et la prédiction des ions doublement chargés, moléculaires et atomiques, dans les atmosphères de la Terre et de Titan, faisant suite au travail effectué sur Mars par Witasse *et al.* (2002), et qui a été faite en collaboration avec le Laboratoire de Chimie Physique d'Orsay (LCP) et la division recherche de l'ESA, l'ESTEC. Le deuxième acte traite quant à lui de la modélisation des précipitations combinées de protons et d'électrons et la mise en place d'un code de transport de proto-électrons couplé dynamiquement, que nous avons appelé TRANS4. Celui-ci correspond à une évolution importante du code d'ionosphère TRANSCAR, développé au LPG, avec la prise en compte du transport de (H , H^+). Ce deuxième acte s'est déroulé pour partie en Norvège, pour partie en France.

Comme un écho à Shakespeare, sept chapitres constituent le manuscrit, que je vais ici détailler un à un :

❶ Le premier chapitre, après un bref rappel du contexte historique dans lequel cette étude se place, s'attache à expliquer physiquement la démarche de modélisation adoptée dans le cas de nos trois ions N_2^{++} , O_2^{++} et O^{++} avec la description mathématique des productions primaires et secondaires et des sections efficaces de photoionisation et par impact électronique prises en entrée du code numérique. Cette partie, au tout début de ma thèse, a été faite en collaboration étroite avec le LCP.

❷ Le deuxième chapitre est de loin le plus imposant en terme de pages : y sont présentés les résultats des productions primaires et secondaires (§ 2.1–2.3) ainsi que la validation avec les données satellite sur les concentrations de O^{++} dans l'atmosphère terrestre. Je présente ensuite une étude de sensibilité aux conditions géophysiques des concentrations (§ 2.4). Le modèle est enfin porté sur Titan et ceci constitue le paragraphe 2.5.

❸ Le chapitre 3 est quant à lui dédié à la détection des ions doublement chargés et permet de tracer les perspectives de ce travail.

Les chapitres suivants sont rédigés en anglais.

❹ Le chapitre 4 décrit la genèse du code TRANS4 et la construction du modèle de transport couplé proton-électron. J'y précise l'interfaçage et le calcul des profils de raie Doppler des raies Balmer H_α et H_β .

❺ Le cinquième chapitre a pour sujet l'accélération du code et sa validation physico-numérique, qui prépare la comparaison aux données.

❻ Le chapitre 6 correspond à l'étude d'un événement géophysique particulier où les précipitations combinées protons/électrons étaient particulièrement intenses. L'événement coordonné a fait l'objet de 9 mois de travail effectué en Norvège à Svalbard puis à Oslo sur l'analyse et l'interprétation des données optiques (spectres Doppler), radar (le radar EISCAT ESR⁵) et satellite (DMSP). Après la description détaillée de l'événement (le 22-01-2004 au-dessus de l'archipel de Svalbard), l'analyse et le traitement des données, j'ai pu confronter TRANS4 aux données mesurées.

⁵ Le radar à diffusion incohérente ESR, ou EISCAT Svalbard Radar, est situé à 78° de latitude Nord dans l'ovale auroral sur l'archipel de Svalbard (Norvège).

⑦ Enfin, le chapitre 7 constitue une conclusion préliminaire à l'acte III pour la partie sur les protons. Les perspectives et évolutions souhaitables du modèle sont exposées.

L'acte III se veut une conclusion générale du manuscrit, où je replace mon travail dans la perspective d'une recherche plus axée sur la planétologie comparée (Mars, Titan notamment) et dont mon étude sur Titan constitue un marche-pied.

Il est temps maintenant d'ouvrir le rideau de cette pièce de théâtre qu'est la thèse. Place à l'acte I, ou comment les ions doublement chargés peuvent jouer un rôle dans les ionosphères planétaires.





Acte I
Les ions doublement chargés

Il n'y a que le désert qui guérisse le désespoir : on peut y pleurer sans crainte de faire déborder un fleuve.

Ahmadou Kourouma,
En attendant le vote des bêtes sauvages.

Chapitre 1

Comment modéliser les ions doublement chargés ?

Sommaire

1.1	Retour aux sources	28
1.2	Modèle de photoproduction des ions N_2^{++}, O_2^{++} et O^{++}	30
1.2.1	Paramètres géométriques de caractérisation de l'atmosphère	31
1.2.2	Production des ions	32
1.3	Calcul des productions secondaires grâce au modèle TRANSCAR	36
1.3.1	Formulation du transport cinétique	36
1.3.2	Production secondaire	41
1.3.3	Détail de la modélisation	41
1.4	Sections efficaces d'ionisation	47
1.4.1	Calcul des sections efficaces sur les boîtes d'énergie du flux	47
1.4.2	Détermination des sections efficaces	48
1.4.3	Sections efficaces de photoionisation pour N_2 , O_2 et O	51
1.4.4	Sections efficaces d'ionisation double par impact électronique	54

Les photons solaires dans l'extrême-ultraviolet, que l'on notera EUV dans la suite, de longueur d'onde inférieure à environ 120 nm, sont source d'excitation, de dissociation, de chauffage et d'ionisation de la haute atmosphère terrestre, créant ainsi l'ionosphère, siège de processus physiques complexes. Aux collisions élastiques et inélastiques se superposent des mécanismes de diffusion et de transport d'énergie, le tout immergé dans le champ magnétique de la Terre. Les photoélectrons primaires créés peuvent être plus chauds que les électrons ambiants thermalisés et ioniser à leur tour l'atmosphère, dans un processus secondaire régi par les équations

cinétiques de Boltzmann sur le flux électronique suprathermique. Le code de modélisation de l'ionosphère TRANSCAR brièvement présenté en préambule permet de décrire finement ces phénomènes, et sera expliqué en détail tout au long de ce travail. Une des sorties du modèle est alors, via le calcul des productions de chaque ion, les profils de concentrations des six principaux ions présents dans l'ionosphère, à savoir N_2^+ , O_2^+ , O^+ , N^+ , H^+ et NO^+ .

Depuis peu, la présence d'ions doublement chargés dans les ionosphères planétaires connaît un engouement croissant à la fois dans la communauté des physico-chimistes, qui y voient l'intérêt d'étudier la stabilité de ces ions dans des conditions hors-laboratoire, et dans celle des ionosphériciens, qui jusqu'alors négligeaient toute contribution des ions multiples chargés.

Profitant du contexte dynamique de l'exploration martienne, Witasse *et al.* (2002) ont ainsi pu modéliser pour la première fois grâce à TRANSCAR la contribution des dications CO_2^{++} dans l'atmosphère de Mars, prédisant leur existence vers 145 km d'altitude. Cette étude a permis de pointer la nécessité de reconsidérer la contribution des ions créés par ionisation multiple... De Mars à la Terre, il n'y avait qu'un pas que cette thèse se propose de franchir. Qu'en est-il donc des ions doublement chargés sur Terre ?

1.1 Retour aux sources

Pour comprendre le contexte historique et scientifique dans lequel je me suis plongé en ces années de thèse, nous devons dérouler le fil du temps depuis les premières découvertes en laboratoire jusqu'aux efforts contemporains de modélisation.

L'histoire de la découverte des ions multiples chargés commence en 1920, alors que les échos de la Première Guerre Mondiale commencent tout juste à se dissiper. Aston (1920) observe pour la première fois des ions moléculaires doublement chargés à l'état stable, une expérience très vite confirmée par Thomson (1921). Celui-ci attribue encore de manière imprécise l'espèce incriminée à la molécule de CO ou bien à celle de N_2 .

Il faut attendre près d'un demi-siècle pour que les aéronomes se penchent enfin sur le sujet. Les premières découvertes viennent, comme c'est le cas lors des débuts de l'aéronomie, par l'observation optique. Meinel (1951) cite ainsi la contribution du physicien norvégien Lars Vegard, une figure que nous retrouverons plus tard dans ce manuscrit à propos des raies Balmer de l'hydrogène. Vegard annonce à la fin des années 1940 l'identification de la raie de OIII ($\lambda 500,8 \text{ nm}$) dans le spectre auroral à l'emplacement d'un ensemble de raies intenses situé à $500,04 \text{ nm}$. Pourtant, cette identification est très vite mise en doute, car l'émission de O^{++} est constituée d'un doublet qui se révèle impossible à identifier dans le spectre. Faute de doublet

clairement identifié, l'hypothèse doit être abandonnée. A la piste photométrique qui se referme, succèdent les mesures in-situ par satellites qui se révèlent, au tournant des années 1960, plus fructueuses.

En 1967, grâce au spectromètre de masse embarqué sur le satellite Explorer 31, Hoffman (1967) peut ainsi détecter in-situ l'ion O^{++} dans l'ionosphère terrestre.

Rapidement suivent des tentatives théoriques pour rendre compte de l'effet de ces ions dans l'atmosphère de la Terre. Ainsi Nakada & Singer (1968) puis Walker (1970) étudient la diffusion thermique des ions O^{++} dans le système ionosphère-magnétosphère. Prasad & Furman (1975), prenant comme point de départ les mécanismes de double photoionisation et plus encore Avakyan sur l'effet Auger (1978a, 1978b), montrent la nécessité également de prendre en compte dans les modèles les ions moléculaires N_2^{++} et O_2^{++} supposés jusqu'alors instables à cause de la répulsion coulombienne.

A cause des grandes incertitudes de mesure concernant la création, la stabilité et la réactivité des dications moléculaires, tous les efforts de modélisation se cantonnent par la suite à l'espèce O^{++} , dont les concentrations sont mesurées pour la première fois de manière précise en 1974 par le satellite américain *Atmosphere Explorer C*⁶. Breig *et al.* (1977) publient ces mesures et les comparent à un modèle *ad hoc* très simplifié où les constantes de vitesses liées à O^{++} correspondent à des ajustements. Dès l'année suivante, Avakyan (1978a, 1980) puis Victor & Constantinides (1979) mentionnent la double photoionisation de l'atome d'oxygène et expliquent que ce processus peut devenir prépondérant à basse altitude sur l'ionisation de O^+ . Breig *et al.* (1982) remettent donc l'ouvrage sur le métier et incluent ce mécanisme supplémentaire, en comparant leur modèle aux mêmes données de *Atmosphere Explorer*, dont le traitement a entre-temps été optimisé. Ils déduisent une nouvelle constante de vitesse $k = 6.6 \times 10^{-11} \text{ cm}^3 \text{ s}^{-1}$ pour la réaction encore mal connue $O^{++} + O$.

Plusieurs études appliquées aux autres planètes permettent d'affiner ou de contredire cette prédiction sur les constantes de vitesse. Grâce aux données de la sonde Pioneer (Taylor *et al.*, 1979), Fox & Victor (1981) ajustent ainsi une constante de vitesse différente d'un facteur 2 pour la même réaction dans l'ionosphère de Vénus soit $k = 1.5 \times 10^{-10} \text{ cm}^3 \text{ s}^{-1}$. Ils montrent en outre qu'on peut discriminer les processus de production de O^{++} en fonction de l'altitude : à basse altitude, la double photoionisation domine, alors qu'au dessus de 250 km sur Vénus, c'est l'ionisation de O^+ qui devient prépondérante. Brown *et al.* (1983) étudient quant à eux le tore de plasma du satellite jovien Io et donnent un taux de $2.0 \times 10^{-10} \text{ cm}^3 \text{ s}^{-1}$, en accord avec Fox & Victor (1981).

⁶ C'est le spectromètre de masse MIMS (Hoffman *et al.*, 1973) qui est ici responsable des mesures. Celles-ci seront présentées au § 2.4.3 dans le cadre de la comparaison de notre modèle avec les données mesurées.

Depuis, peu d'études ont été menées sur la présence, toujours à confirmer, d'ions moléculaires dans les atmosphères planétaires ou sur la modélisation proprement dite des dications. Une étude isolée, consacrée à l'ion O^{++} sur Vénus, a ainsi vu le jour en 1995 (Ghosh *et al.*, 1995).

Ce n'est que très récemment que l'étude expérimentale en laboratoire des dications a connu un renouveau significatif (Mrázek *et al.*, 2000), une période qui coïncide avec l'avancée des techniques d'observation et à la résolution de problèmes expérimentaux dus à la difficulté d'observer ces ions et leur structure moléculaire à l'état stable. Les expériences montrent que les sections efficaces correspondant à la création de dications peuvent représenter jusqu'à 20 % de la totalité des mécanismes d'ionisation, ce qui nous amène à repenser totalement l'influence des dications atomiques et moléculaires en aéronomie.

A partir des années 2000, les outils théoriques comme TRANSCAR couplés aux expérimentations en laboratoire (expérience CERISES⁷) sont donc prêts à en découdre avec ces ions exotiques. Fruit de cette dynamique, le premier article couplant expériences et modélisation ionosphérique est publié en 2002 sur Mars (Witasse *et al.*, 2002, 2003) et inaugure une série d'études sur Titan et la Terre que les prochains chapitres détailleront sous toutes les coutures et qui ont fait l'objet de plusieurs publications reproduites en annexe (Simon *et al.*, 2005 ; Lilensten *et al.*, 2005a et 2005b).

Avant d'aborder dans le prochain chapitre la validation et les résultats de la modélisation, revenons au formalisme mathématique développé dans cette thèse et appliqué aux ions doublement chargés. Pour produire ces ions, deux étapes sont nécessaires : la création d'ions par photoionisation à l'origine des *productions primaires* (§ I.2) d'une part et le transport des photoélectrons suprathermiques responsables des productions ioniques secondaires (§ I.3) d'autre part. Il s'agira par la suite d'explicitier les sections efficaces d'ionisation relatives à ces deux mécanismes (§ I.4), un travail pionnier en la matière, effectué grâce à notre collaboration avec le Laboratoire de Chimie Physique d'Orsay (LCP).

1.2 Modèle de photoproduction des ions N_2^{++} , O_2^{++} et O^{++}

La modélisation de la photoproduction des ions doublement chargés fait appel à un formalisme assez simple dans son écriture. La difficulté réside cependant dans l'expression de la profondeur optique, dépendant à la fois du profil de concentration

⁷ Collisions Et Réactions d'Ions Sélectionnés par des Électrons de Seuil, expérience menée au LURE (Dutuit *et al.*, 1996).

des différentes espèces présentes et des sections efficaces d'absorption pour un spectre de longueur d'onde donné.

1.2.1 Paramètres géométriques de caractérisation de l'atmosphère

- **Hauteur d'échelle et angle solaire zénithal**

Le premier paramètre à expliciter est l'angle d'incidence d'un rayon lumineux par rapport à la verticale locale, lors de sa propagation dans l'atmosphère. Cet angle, noté χ , est également appelé *angle solaire zénithal*. Il vaut $\pi/2$ lorsque le soleil est rasant, 0 lorsque le soleil est au zénith (Fig. 1-1).

On peut écrire la relation différentielle entre l'altitude du point considéré dz_1 et le chemin infinitésimal ds parcouru dans l'atmosphère par le photon incident :

$$dz_1 = \cos\chi_1 ds \quad (1)$$

D'autre part, on peut établir la relation entre l'altitude z d'un point de la trajectoire et χ :

$$(R_T + z) \sin\chi = \text{cste} = (R_T + z_1) \sin\chi_1 \quad (2)$$

avec R_T le rayon terrestre, soit finalement :

$$ds = \frac{dz_1}{\sqrt{1 - \left(\frac{R_T + z}{R_T + z_1}\right)^2 \sin^2\chi}} = \sec\chi(z_1) dz_1 \quad (3)$$

Dans la limite $z = z_1$, on a simplement : $\sec\chi(z_1) = \frac{1}{\cos\chi}$.

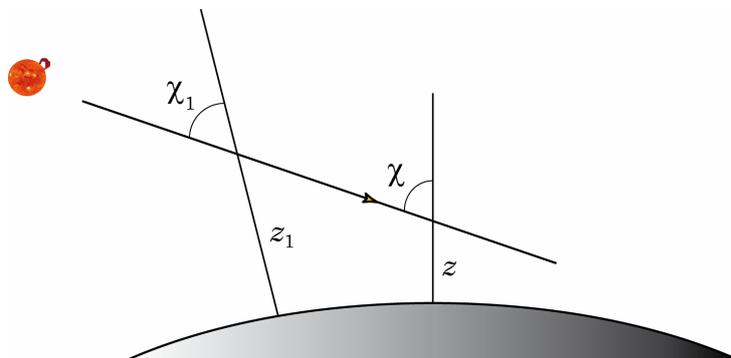


Fig. 1-1 – Propagation d'un rayon lumineux dans une atmosphère concentrique. χ varie en fonction des coordonnées géographiques et évolue au cours de la propagation.

Nous pouvons introduire une deuxième grandeur très utilisée dans la physique et la caractérisation des atmosphères planétaires : l'épaisseur équivalente d'atmosphère ou hauteur d'échelle H_n d'un constituant neutre n . En combinant l'équation des gaz parfaits à celle de l'équilibre hydrostatique, on obtient la loi barométrique de décroissance exponentielle de la concentration d'un constituant donné, $n_n(z_1) = n_n(z_0) \exp\left(-\frac{z_1 - z_0}{H_n}\right)$, avec pour échelle caractéristique :

$$H_n = \frac{k_b T}{M_n g(z)} \quad (4)$$

où k_b est la constante de Boltzmann, T la température neutre, M_n la masse du constituant n et $g(z)$ le champ de gravité projeté sur l'axe vertical. H_n mesure donc, pour un gaz donné, l'importance de l'énergie thermique du gaz par rapport à l'énergie gravitationnelle.

- **La fonction de Chapman**

A partir des grandeurs introduites au paragraphe précédent, on peut expliciter une fonction dite *fonction de Chapman* (Chapman, 1931) qui permet de déterminer la hauteur équivalente de la colonne d'atmosphère rencontrée par le rayon lumineux. Elle s'écrit comme une fonction de l'altitude, de l'angle solaire zénithal et de la hauteur d'échelle :

$$Chap(z, \chi, H_n) = \int_z^\infty \sec \chi(z_1) e^{-\frac{z_1 - z_0}{H_n}} dz_1 \quad (5)$$

Elle est utile notamment dans l'expression de la profondeur optique d'un milieu atmosphérique et donc dans la compréhension de l'atténuation de l'intensité lumineuse due à l'absorption atmosphérique par le gaz ambiant.

1.2.2 Production des ions

- **Rappels sur les mécanismes d'ionisation**

Pour ioniser un atome ou une molécule, il faut lui fournir une énergie d'ionisation, énergie caractéristique de cet élément. Seules les radiations dont la longueur d'onde est inférieure à un certain seuil seront ainsi capables d'ionisation, rôle joué comme on l'a vu par le rayonnement EUV dans le cas d'atmosphères planétaires. Pour une radiation supérieure à ce seuil (ou *potentiel d'ionisation*), l'excès d'énergie du photon est transmis sous forme d'énergie cinétique à l'électron libéré ou sous forme d'excitation au nouvel ion créé. Dans le domaine d'énergie considéré dans ce travail, seule l'ionisation de valence nous intéresse, car l'ionisation

en couche interne (effet Auger) fait intervenir des énergies beaucoup plus grandes, de l'ordre de quelques centaines d'électron-volts.

Les principaux composants atmosphériques, c'est-à-dire N_2 , O_2 , O sont ainsi susceptibles d'être ionisés une ou plusieurs fois (Tableau 1). Jusqu'à présent, les modèles de photoionisation de l'atmosphère ne considéraient que la contribution des ions simplement chargés N_2^+ , O_2^+ , et O^+ . Nous allons nous intéresser dans le paragraphe suivant aux mécanismes de double ionisation par photoionisation de N_2 , O_2 et O et de simple photoionisation de O^+ .

Pour caractériser intrinsèquement le processus d'ionisation, il faut connaître la probabilité pour un photon (ou un électron) d'ioniser une espèce donnée. C'est ce que contient physiquement la section efficace d'ionisation, notée dans la suite σ_i . Elle est exprimée en cm^2 et sa valeur typique pour les composants du gaz atmosphérique est $10^{-18} cm^2$ (soit $10^6 barn$).

Tableau 1 – Potentiels d'ionisation des principales espèces atmosphériques dans leur état fondamental en eV. Ont été inclus les seuils correspondant à l'ionisation dissociative de N_2 et O_2 .

Espèces	Seuil d'ionisation simple (eV)	Seuil de double ionisation (eV)
N_2	15,58	43,00 (Ahmad, 2002)
O_2	12,08	36,13 (Hall <i>et al.</i> , 1992)
O	13,61	48,74 (He <i>et al.</i> , 1995)
H	13,60	
He	24,58	
N_2	24,31 ($N^+ + N$)	
O_2	18,73 ($O^+ + O$)	
O^+	35,13 (O^{++})	

• Photoionisation

Loi de Beer-Lambert sur le flux

Soit l'intensité $\mathfrak{I}(\lambda, z)$ (exprimée en $photons\ cm^{-2}\ s^{-1}\ nm^{-1}$) d'un rayon lumineux. Dans le modèle de Chapman pour un seul constituant, on peut écrire la loi de Beer-Lambert exprimant l'absorption de l'intensité lumineuse qui, de manière générique, s'écrit :

$$d\mathfrak{I}(\lambda, z) = -\mathfrak{I}(\lambda, z) \sigma_a n(z) Chap(z, \chi, H_n) dz \quad (6)$$

avec σ_a la section efficace d'absorption du constituant $n(z)$ sur un trajet dz .

On suppose que l'atmosphère possède $k = 1, \dots, N$ constituants de concentrations respectives n_k . La loi sur l'absorption du flux s'écrit alors comme la somme des contributions des N constituants :

$$\frac{d\mathfrak{I}(\lambda, z)}{dz} = -\sum_k \mathfrak{I}(\lambda, z) \sigma_a^k(\lambda) n_k(z) \text{Chap}(z, \chi, H_n) \quad (7)$$

Cette équation s'intègre sous la forme :

$$\mathfrak{I}(\lambda, z) = \mathfrak{I}_\infty(\lambda) \exp\left(-\sum_k \sigma_a^k(\lambda) \int_z^\infty n_k(z') \text{Chap}(z', \chi, H_n) dz'\right) \quad (8)$$

En introduisant la profondeur optique, notée τ :

$$\tau = \sum_k \sigma_a^k(\lambda) \int_z^\infty n_k(z') \text{Chap}(z', \chi, H_n) dz' \quad (9)$$

on obtient :
$$\mathfrak{I}(\lambda, z) = \mathfrak{I}_\infty(\lambda) e^{-\tau} \quad (10)$$

$\mathfrak{I}_\infty(\lambda)$ est le flux EUV solaire à l'infini responsable de l'ionisation de l'atmosphère, donné par le modèle EUV91 de Tobiska (1991, 1993), et réparti sur 37 boîtes d'énergie. Plus la section efficace est grande, *i.e.* plus l'absorption est probable, plus la décroissance de l'intensité est rapide. De même, plus la couche d'atmosphère traversée est dense, plus l'intensité diminue.

Photoproduction primaire

Plusieurs processus résultant de l'absorption d'un photon doivent être pris en compte : *excitation, ionisation, ionisation dissociative*.

On peut alors calculer le taux d'absorption (*photons m⁻³ s⁻¹ nm⁻¹*) de la longueur d'onde λ à l'altitude z , par l'espèce neutre k et le processus p :

$$P_a^{k,p}(\lambda, z) = n_k(z) \sigma_a^{k,p}(\lambda) \mathfrak{I}(\lambda, z) \quad (11)$$

où $\sigma_a^{k,p}(\lambda)$ est la section efficace d'absorption par le processus p à la longueur d'onde λ de l'espèce k . Le taux d'absorption total des photons est alors donné par l'intégrale sur toutes les longueurs d'onde. Lorsque l'on veut la contribution de l'ionisation, cette intégrale correspond à la photoproduction primaire d'une paire (k^+ , e^-) ou (k^{++} , e^-) notée P_{prim} , fonction de l'énergie E du ou des électrons éjectés⁸ :

⁸ E est ici donnée par : $E = \frac{hc}{\lambda} - W_{ii}^e(0)$, où W_{ii}^e correspond au seuil d'ionisation de l'état ee par rapport à l'état au repos.

$$P_{prim}(E, z) = \sum_k \int_0^\infty P_{ion}^k(\lambda, z) d\lambda \quad (12)$$

Ici l'intégration en énergie se fait sur tout le spectre solaire, même si l'ionisation n'intervient que pour sa partie EUV et X.

Appelons b_k le rapport de branchement pour chaque état excité ee et injectons l'équation (11) dans l'expression précédente. Le profil en altitude de la photoproduction primaire peut enfin s'écrire :

$$P_{prim}(z) = \sum_{ee} \sum_k b_k(ee) \int_0^{\lambda_E} n_k(z) \sigma_k^k(\lambda) \mathfrak{I}(\lambda, z) d\lambda \quad (13)$$

σ_k^k est la section efficace de photoionisation de l'espèce k . On voit ici toute l'importance de connaître les sections efficaces de photoionisation simple et double des molécules ou atomes de l'atmosphère en vue de modéliser la contribution des ions positifs créés par absorption du flux solaire.

- **Effet Auger**

Dans le cas des ions doublement chargés, l'effet Auger, consécutif à la photoionisation des couches internes K et L, a été évoqué dans leur mécanisme de formation à basse altitude à la suite d'une éruption solaire (Avakyan, 1998). L'effet Auger correspond à la relaxation d'une lacune en couche interne : la lacune interne créée par photoionisation est comblée par un électron d'une couche externe, l'énergie libérée dans la transition électronique étant cédée à un autre électron périphérique qui peut alors s'échapper. Les électrons éjectés — les électrons Auger — ont des énergies discrètes, caractéristiques de l'atome ou de la molécule. Les énergies mises en jeu pour l'ionisation des couches internes sont très grandes, de l'ordre de plusieurs centaines d'eV. Les gammes d'énergie que nous considérons sont beaucoup plus faibles : ainsi, seule l'ionisation de valence sera prise en compte dans la suite.

Nous avons obtenu l'expression des productions ioniques primaires. Les électrons primaires créés par photoionisation directe des constituants neutres sous l'action du flux solaire EUV, diffusés principalement vers l'avant (*forward scattering*), peuvent se révéler suffisamment énergétiques pour ioniser à leur tour l'atmosphère neutre, créant ainsi des électrons dits *secondaires*. Ces électrons se redistribuent en énergie et en angle dans toutes les directions (Opal *et al.*, 1972). Les productions secondaires peuvent dans certains cas (basse altitude, activité solaire) dépasser les productions primaires, ce que nous verrons au § 2.1.1. Pour avoir accès à cette nouvelle donnée, il devient alors indispensable de décrire le transport cinétique de ces électrons suprathermiques, d'énergie supérieure à l'électronvolt, ainsi que leur dégradation énergétique et leur redistribution angulaire dans l'atmosphère. Intéressons-nous donc maintenant aux mécanismes de production

secondaire des ions, sous-tendus par le formalisme du transport cinétique de Boltzmann.

1.3 Calcul des productions secondaires grâce au modèle TRANSCAR

1.3.1 Formulation du transport cinétique

Au contraire des photons EUV qui sont totalement absorbés lors de leur trajet dans l'atmosphère (c'est ce que décrit la loi de Beer-Lambert), les photoélectrons et les électrons précipités subissent des collisions et sont diffusés par les atomes, molécules et ions, de manière élastique (déflexion angulaire seule) ou inélastique (changement de direction *et* d'énergie). Au travers de ces différents processus, les électrons incidents deviennent finalement indistincts du fond d'électrons ambiants déjà thermalisé.

Afin de tenir compte de ce phénomène dans la modélisation, on utilise le formalisme de Boltzmann sur le transport cinétique d'une espèce donnée, dont l'équation a été formulée dès 1872 (Boltzmann, 1872, 1892). Selon les propres mots de Boltzmann (cité par D. Flamm, 1983) :

« [...] We must remember that for explaining apparently continuous bodies, we must presuppose a very large number of all kinds of atoms or other general mechanical individuals to be in the most varied initial positions. In order to treat this assumption mathematically a special science was invented, whose task is not to find the motions of one individual system but the properties of a complex of very many mechanical systems starting from the most varied initial conditions. »

Supposant que les particules sont indépendantes les unes des autres, Boltzmann postule ainsi que toute la physique macroscopique est contenue dans la fonction locale de distribution f dans l'espace des phases (position \mathbf{r} et vitesse \mathbf{v}) : celle-ci, microscopique et à caractère statistique, est exprimée en $cm^{-6} s^3$. Elle est reliée au nombre macroscopique de particules présentes dans l'espace des phases (\mathbf{r}, \mathbf{v}) , noté N_s par :

$$N_s = \int_{-\infty}^{+\infty} f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) d^3\mathbf{r} d^3\mathbf{v}. \quad (14)$$

$f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)$ correspond à une densité numérique de particules dans l'espace des phases. Les densités de particules sont alors calculées par unité de volume

mésoscopique⁹ défini tel que $\mathcal{V} = \delta^3 L \gg \lambda_B^3$, où $\lambda_B = \sqrt{2\pi} \hbar/p$ est la longueur d'onde de de Broglie, avec p l'impulsion thermique du système de particules et \hbar la constante de Planck réduite. Ce volume assure que le nombre de particules dans le volume considéré est suffisant pour que le caractère individuel de chaque particule soit négligé au profit de l'approche statistique globale : il y a beaucoup plus d'états disponibles (\mathbf{r}, \mathbf{v}) que de particules. C'est l'hypothèse du milieu dilué et le nombre moyen d'occupation est alors :

$$\bar{N} = h^3 f \ll 1 \quad (15)$$

Son évolution se calcule en écrivant que la variation temporelle de f est égale à l'opérateur de collision $\mathcal{C}(f)$:

$$\frac{df(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)}{dt} = \left(\frac{\delta f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)}{\delta t} \right)_{\text{collisions}} = \mathcal{C}(f) \quad (16)$$

Le signe δ dans l'opérateur de collisions signifie que les collisions ne sont pas des processus continus, puisqu'il faut un échange discret d'énergie pour une collision, en plus du seuil d'excitation correspondant. L'étape suivante est d'interpréter cette dérivée totale comme une dérivée lagrangienne, composition de la dérivée eulérienne, qui décrit l'évolution temporelle de la fonction de distribution en un point immobile de l'espace (notée $\partial/\partial t$), et de la dérivée convective associée au mouvement du fluide particulaire. On peut alors exprimer classiquement la dérivée totale par rapport au temps sous la forme :

$$\frac{d}{dt} = \left(\frac{\partial}{\partial t} + \sum_n \dot{\mathbf{c}}_i \cdot \nabla_{\mathbf{c}_i} \right) \quad (17)$$

où $\dot{\mathbf{c}}_i$ est la dérivée temporelle de la grandeur en mouvement \mathbf{c}_i . La dérivée lagrangienne, comme complément de la dérivée eulérienne¹⁰, est ainsi interprétée comme une '*dérivée en suivant le mouvement*' de la cellule mésoscopique initiale dans l'espace des phases (\mathbf{r}, \mathbf{v}) . Suivant le formalisme de Hamilton, elle s'écrit :

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + \frac{d\mathbf{r}}{dt} \cdot \nabla_{\mathbf{r}} + \frac{d\mathbf{v}}{dt} \cdot \nabla_{\mathbf{v}} \right).$$

Dans le cas de l'équation de Boltzmann non collisionnelle non dissipative, $\mathcal{C}(f) = 0$ et l'équation devient :

⁹ C'est-à-dire de volume intermédiaire entre l'échelle microscopique (de Broglie) et l'échelle macroscopique de volume L^3 , de là toute la puissance de l'approche statistique de Boltzmann...

¹⁰ Comme un écho à ces deux interprétations complémentaires du mouvement, Euler (1707-1783) et Lagrange (1736-1813) occupèrent à tour de rôle la direction des Mathématiques de l'Académie des Sciences de Berlin. Ils échangèrent toute leur vie une correspondance soutenue.

$$\frac{\partial f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla_{\mathbf{r}} f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) + \frac{\mathbf{F}}{m} \cdot \nabla_{\mathbf{v}} f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) = 0. \quad (18)$$

Si la force en présence est la force électromagnétique de Lorentz $\mathbf{F} = q(\mathbf{E} + \mathbf{v} \times \mathbf{B})$, comme c'est le cas dans les plasmas non collisionnels (chauds), cette équation se met sous la forme dite de Klimontovich-Vlasov :

$$\frac{\partial f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla_{\mathbf{r}} f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) + \frac{q(\mathbf{E} + \mathbf{v} \times \mathbf{B})}{m} \cdot \nabla_{\mathbf{v}} f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) = 0. \quad (19)$$

Dans l'atmosphère néanmoins, les forces sont essentiellement dissipatives et les frictions, tel le chauffage des électrons thermiques, nous conduisent à réintroduire l'opérateur de collisions et à prendre en compte le changement de volume de l'espace des phases dû à l'apport supplémentaire d'énergie. La démonstration générale, beaucoup plus difficile que pour le cas non dissipatif, fait intervenir l'opérateur Jacobien pour décrire ce changement de volume. Le résultat final est néanmoins simple et l'équation dissipative de Boltzmann s'écrit :

$$\frac{\partial f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla_{\mathbf{r}} f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) + \nabla_{\mathbf{v}} \left(\frac{\mathbf{F}}{m} f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) \right) = \mathcal{C}(f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)) \quad (20)$$

C'est cette équation qui est résolue dans TRANSCAR en la mettant sous la forme d'une équation de transfert radiatif pour laquelle il existe des techniques adéquates de résolution, élaborées depuis de nombreuses années (Chandrasekhar, 1960).

- **Hypothèses générales du modèle**

Dans le modèle, plusieurs hypothèses permettent de simplifier grandement l'écriture de cette équation et de la mettre sous la forme voulue. Ainsi, nous considérons en premier lieu que l'atmosphère est stratifiée perpendiculairement au champ magnétique, une hypothèse vérifiée à moyennes et hautes latitudes. Les électrons suprathermiques, plus précisément leur centre de giration, se déplacent préférentiellement le long des lignes de champ magnétique. On néglige en outre l'effet des forces externes comme le champ électrique macroscopique horizontal \mathbf{E}_M dû à la polarisation du plasma ou la pesanteur. On suppose également l'état stationnaire pour les flux décrits par le transport cinétique : la principale raison vient du fait que l'absorption du flux suprathermique se fait de manière beaucoup plus rapide que le changement dans les sources de ces mêmes particules. Les fréquences de collision sont typiquement de l'ordre de la seconde, alors que les précipitations d'électrons suprathermiques se font sur des échelles beaucoup plus importantes : de quelques secondes à quelques heures. Ainsi à chaque particule absorbée, une particule identique en termes d'angle d'attaque et d'énergie est créée.

La dernière hypothèse sous-jacente de TRANSCAR est l'approximation de pertes continues ou *continuous slowing-down approximation* (CSDA) qui introduit une fonction de perte continue $L(E)$ pour rendre compte des forces dissipatives, c'est-à-dire du processus de chauffage dissipatif des thermiques (friction entre les électrons thermalisés supposés immobiles et les électrons suprathermiques précipitant à grande vitesse). La force associée à cette friction, notée \mathbf{F}_{CSD} est dirigée selon le mouvement des électrons suprathermiques de vecteur unitaire $\bar{\mathbf{u}}$ et de densité n_e . Elle s'écrit alors :

$$\mathbf{F}_{\text{CSD}} = - n_e L(E) \bar{\mathbf{u}} \quad (21)$$

En développant ce terme dans l'équation (20), on obtient :

$$\frac{\partial f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla_{\mathbf{r}} f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) - \nabla_{\mathbf{v}} \cdot \left(\frac{n_e}{m_e} L(E) \bar{\mathbf{u}} f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) \right) = \left. \frac{\delta f}{\delta t} \right|_{\text{coll}} + q_{h\nu}(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) \quad (22)$$

Le terme de collision a ici été séparé en deux termes, l'un spécifiquement dû aux collisions, l'autre relié aux sources directes qu'est le flux de photoélectrons primaires noté $q_{h\nu}(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)$.

Le changement de variable qui permet de nous faire passer de la fonction de distribution $f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)$ à la grandeur mesurable qu'est le flux suprathermique d'électrons $\Phi_e(z, E, \mu)$ exprimé en $\text{cm}^{-2} \text{s}^{-1} \text{eV}^{-1} \text{sr}^{-1}$ est explicité dans Stamnes & Rees (1983) :

$$f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) = \frac{m_e}{v^2} \Phi_e(z, E, \mu) \quad (23)$$

Grâce à ce changement de variable et en invoquant l'hypothèse de stationnarité, l'équation de Boltzmann se simplifie considérablement :

$$\mu \frac{\partial}{\partial z} \Phi_e(z, E, \mu) - n_e \frac{\partial}{\partial E} (L(E) \Phi_e(z, E, \mu)) = \frac{1}{v} \mathcal{Q}(z, E, \mu) \quad (24)$$

$$\text{où } \mathcal{Q}(z, E, \mu) = \left. \frac{v^2}{m_e} \frac{\delta f}{\delta t} \right|_{\text{coll}} + \frac{v}{m_e} q_{h\nu}(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t).$$

On introduit ensuite la profondeur de collision $\tau_e(z, E)$, paramètre sans dimension défini par :

$$d\tau_e(z, E) = \sum_k \sigma_k^T(E) n_k(z) dz, \quad (25)$$

qui représente la distance moyenne parcourue par une particule (ici notre électron) dans un milieu de concentration n_k sans rencontrer de collisions. Cet effet est contenu dans le terme de section efficace totale de collision $\sigma_k^T(E)$, somme des

sections efficaces élastiques et inélastiques de l'espèce neutre k (ionisation, collisions élastiques et excitation).

On peut finalement réécrire l'équation de transport pour les électrons suprathermiques sous la forme :

$$\begin{aligned} \mu \frac{\partial \Phi_e(\tau_e, E, \mu)}{\partial \tau_e(z, E)} = & -\Phi_e(\tau_e, E, \mu) + \frac{n_e(z)}{\sum_k n_k(z) \sigma_k^T(E)} \frac{\partial (L(E) \Phi_e(\tau_e, E, \mu))}{\partial E} + sf(\tau_e, E, \mu) \\ & + \sum_l \left\{ \frac{n_l(z) \sigma_l^T(E)}{\sum_k n_k(z) \sigma_k^T(E)} \int_{-1}^1 d\mu' \int_E^\infty dE' R^l(E', \mu' \rightarrow E, \mu) \Phi_e(\tau_e, E', \mu') \right\} \end{aligned} \quad (26)$$

où $\Phi_e(\tau_e, E, \mu)$ est le flux électronique stationnaire ($cm^{-2} s^{-1} eV^{-1} sr^{-1}$), E et E' les énergies des électrons diffusés et incidents (eV), μ et μ' les cosinus des angles d'attaque des électrons diffusés et incidents, n_k la concentration de l'espèce k , n_e la concentration électronique, R^l la fonction de distribution décrivant la dégradation en énergie de l'état (E', μ') vers l'état (E, μ) pour l'espèce neutre l . Pour tout processus de collision p , R^l s'écrit sous la forme d'un rapport de sections efficaces différentielles :

$$R^l(E', \mu' \rightarrow E, \mu) = \frac{\sum_p \sigma_p^l(E', \mu' \rightarrow E, \mu)}{\sigma_p^T(E)} \quad (27)$$

La fonction source $sf(\tau_e, E, \mu)$ tient compte de l'effet des précipitations ainsi que de celui du flux de photoélectrons primaires créés par le rayonnement EUV solaire. Elle s'exprime pour le flux de photoionisation primaire par :

$$sf(\tau_e, E, \mu) = \frac{q_i^k(z, W)}{4\pi \sum_k n_k(z) \sigma_k^T(E)} \quad (28)$$

où q_i^k est la photoproduction primaire de suprathermiques ($cm^{-3} s^{-1} eV^{-1}$) et $W = E - U_{k,j}$ avec $U_{k,j}$ le seuil de photoionisation de l'espèce k pour l'état d'excitation j . Le facteur 4π , *i.e.* l'angle solide d'une sphère unité en stéradians, répartit le flux selon toutes les directions de la sphère.

L'effet des précipitations peut être pris en compte dans TRANSCAR, même en l'absence de mesures. Les électrons précipités sont supposés de distribution maxwellienne avec pour paramètres le flux d'énergie et l'énergie moyenne (discrétisés sur une grille d'énergie commençant à $50 eV$) donnés dans le modèle de Hardy *et al.* (1985, 1987), lui-même construit à partir de mesures satellites. Il est bien entendu possible d'inclure directement les données de flux mesurés par les satellites pour un événement donné.

L'équation (26) contient tous les termes de sources (en d'autres termes les gains) et de pertes relatifs à la variation du flux stationnaire des électrons secondaires

exprimée dans le membre de gauche. Le premier terme du membre de droite représente les pertes par collisions élastiques et inélastiques. Le second terme fait intervenir les pertes dues au chauffage des thermiques exprimées à travers la fonction de perte continue $L(E)$ ¹¹ qui s'écrit (Swartz *et al.*, 1972) :

$$L(E) = \frac{3,37 \times 10^{-12}}{E^{0.94} n_e^{0.03}} \left(\frac{E - E_{th}}{E - 0,53 E_{th}} \right)^{2.36} \quad (29)$$

où E_{th} exprimée en eV est l'énergie thermique définie telle que $E_{th} = k_B T_e$ où T_e est la température électronique en degrés Kelvin (K).

Les deux derniers termes sont des termes de gain, précédés donc du signe '+' dans l'équation. Le troisième fragment, appelé comme nous l'avons vu *fonction source* $sf(\tau_e, E, \mu)$, prend en compte les gains dus à la photoionisation et à tous les mécanismes de précipitation électronique ou proto-électronique (voir § 4.2.4 pour cette dernière source). Enfin le dernier terme du membre de droite décrit la production électronique due à la dégradation du flux de plus haute énergie via les collisions électrons-neutres. Il contient donc le flux d'électrons suprathermiques Φ_e .

1.3.2 Production secondaire

La production secondaire de l'espèce ionique k s'écrit alors simplement :

$$P_{sec}^k(z) = 2\pi n_k(z) \int_{-1}^1 d\mu \int_0^\infty \sigma_i^k(E) \Phi_e(\tau_e, E, \mu) dE \quad (30)$$

où μ est le cosinus de l'angle d'attaque de l'électron incident par rapport au champ magnétique, $n_k(z)$ la concentration de l'espèce neutre k , $\sigma_i^k(E)$ la section efficace d'ionisation par impact électronique du constituant k .

On en déduit immédiatement l'expression de la production totale d'électrons secondaires, qui est la somme des différentes contributions ioniques pondérées par le nombre d'électrons β_e^k produits par l'ionisation ($2 e^-$ pour les dications) :

$$P_{sec}(z) = \sum_k \beta_e^k P_{sec}^k(z) \quad (31)$$

1.3.3 Détail de la modélisation

Dans l'atmosphère terrestre, les photoélectrons primaires ou précipités se déplacent le long des lignes de champ magnétique. Comme on l'a vu, la modélisation des productions secondaires d'ionisation du neutre k par impact des électrons

¹¹ Appelée aussi dans la littérature '*electron stopping cross section*' exprimée en $eV cm^{-2}$.

suprathermiques fait appel à la résolution de l'équation de transport cinétique pour les électrons suprathermiques qui nous livre le flux électronique stationnaire $\Phi_e(\tau_e, E, \mu)$ et décrit les redistributions angulaires et en énergie des électrons depuis le sommet de l'ionosphère jusqu'à la basse région E .

La résolution de l'équation de transport se fait en deux étapes : dégradation en énergie, puis résolution du transport et redistribution angulaire.

- **Dégradation en énergie**

Processus d'excitation

Le problème est ici de répartir le flux de photoélectrons primaires sur une grille *discrète* d'énergie tout en conservant l'énergie du système et le nombre de particules. Comment est dégradé le photoélectron primaire ? Le fait que nous considérons une interaction inélastique et continue par paliers (à cause du seuil d'excitation-ionisation) complexifie d'autant l'algorithme informatique nécessairement discret. Idéalement, les résultats à une précision donnée peuvent être atteints en utilisant des cellules d'énergie suffisamment petites au détriment du temps de calcul. En pratique, étendre les calculs aux énergies les plus hautes requiert des temps de calcul excessifs et ne garantit pas toujours la conservation de l'énergie ni celle du nombre total d'électrons primaires : une partie de l'énergie initiale peut être perdue dans le processus et ce, quelle que soit la largeur des boîtes d'énergie par rapport à l'énergie d'excitation (Fig. 1-2 *a* et *b*).

Swartz (1985) propose une solution numérique simple à ce problème satisfaisant les deux contraintes de conservation, en conseillant de remplacer la section efficace d'excitation originelle σ^{exc} par une section efficace « effective » σ_{eff}^{exc} .

Dans le cas de l'excitation, on a donc :

$$\sigma_{eff}^{exc}(E_i) = \sigma^{exc}(E_i) \frac{T}{E_i - E_k} \quad (32)$$

T est le seuil d'excitation du neutre considéré (en fait l'énergie perdue effectivement dans une collision), E_i l'énergie du photoélectron incident et E_k celle de l'électron dégradé final, qui correspond à la cellule la plus proche de $E_i - T$. On a alors la condition stricte $E_k < E_i$.

Cette formule revient à compter combien de fois on a le seuil entre l'énergie incidente et E_k , afin de corriger la probabilité d'interaction, autrement dit la section efficace, et prendre en compte les écarts continus d'énergie : on force l'énergie initiale que l'on veut dégrader à tomber précisément sur la boîte d'énergie la plus proche de $E_i - T_{in}$ (« renormalisation »).

Dans la Fig. 1-2 (*a*) par exemple, trois collisions sont nécessaires pour dégrader un électron depuis l'énergie E_i de la cellule supérieure vers l'énergie de la cellule

inférieure la plus proche, *i.e.* $E_{i-1} = E_i - 3T$. La section efficace est alors réduite d'un facteur 3 afin que cette dégradation totale soit moins probable d'un facteur $\sqrt[3]{3}$.

Dans le cas où la taille des cellules est plus petite que l'énergie d'excitation T , un algorithme discret dégraderait tous les électrons de la cellule E_i dans la cellule E_k , ce qu'illustre la Fig. 1-3 (a). Étant donnée la largeur finie de la cellule de départ E_i , ceux étant proche de la limite inférieure de E_i devraient être dégradés normalement dans la cellule E_{k-1} alors que ceux situés près de sa limite supérieure devraient aller dans la cellule E_{k+1} comme nous le montre la Fig. 1-3 (b). Si tous les électrons sont dégradés dans la cellule E_k , la distribution en E_k est alors artificiellement « gonflée » relativement aux cellules adjacentes. Swartz (1985) préconise dans ce cas d'utiliser une grille d'énergie dotée de cellules de largeur rapidement croissante avec l'énergie (par exemple selon les puissances croissantes de 2 d'après Lummerzheim, 1987) et de répartir les électrons de la cellule E_i d'origine sur un groupe de cellules plus petites de même largeur totale, et ce tant que l'énergie d'excitation est plus grande que la taille des cellules. Le critère (32) est alors appliqué à l'énergie moyenne du groupe de cellules plutôt qu'une cellule en particulier (*i.e.* E_k doit être l'énergie moyenne du groupe de cellules).

Il faut donc choisir une grille dont les cellules sont petites à basse énergie où les sections efficaces changent rapidement. L'effet de la taille des cellules à haute énergie est quant à lui complètement négligeable.

Ionisation

Pour un processus d'ionisation, et pour connaître l'énergie dégradée de l'électron primaire, on doit avoir accès à deux nouvelles prémisses du problème. La fonction de distribution des électrons secondaires supra-thermiques doit être dans un premier temps déterminée : celle-ci est donnée expérimentalement par Opal *et al.* (1972), et ce sont ces mesures que nous utilisons dans le modèle. Théoriquement, dès la fin des années 1960, Rees *et al.* (1969) avaient dérivé, à partir de la formule de Bethe, la fonction de distribution des électrons secondaires : celle-ci reste d'ailleurs en très bon accord avec les mesures.

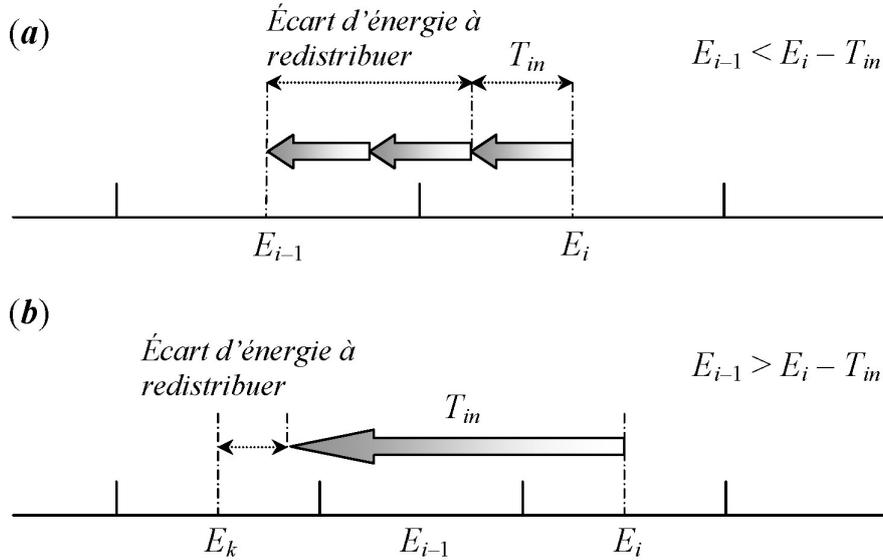


Fig. 1-2 – Incompatibilité entre grille finie d'énergie et pertes discrètes. En (a), les boîtes d'énergie sont plus larges que l'énergie perdue en une seule collision (dans cet exemple, il en faut trois pour qu'une boîte perde de l'énergie). En (b), l'énergie d'une collision est plus grande que la largeur d'une boîte occasionnant une perte d'information de l'ordre de $\frac{1}{2} \Delta E$ (d'après Swartz, 1985).

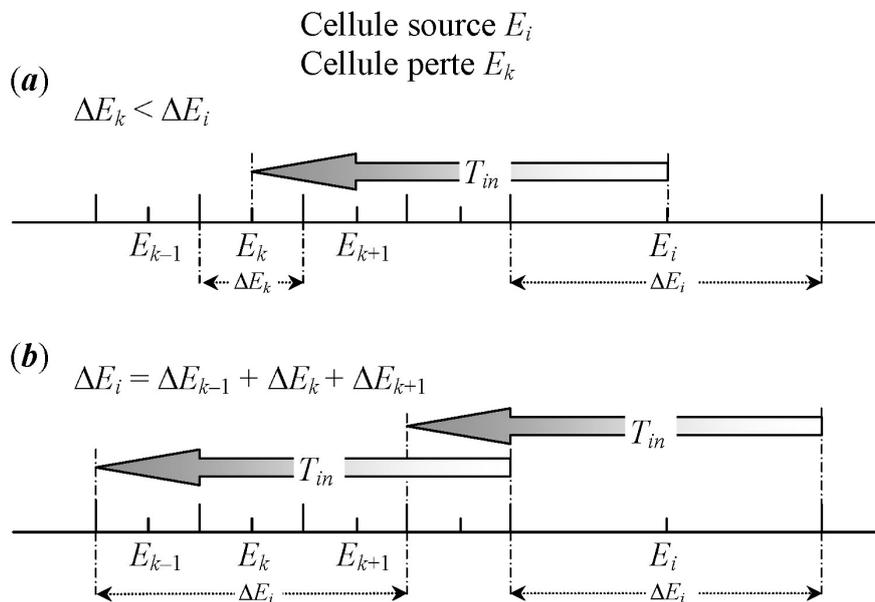


Fig. 1-3 – Dégradation complète de grandes cellules d'énergie ΔE_i dans une seule petite cellule (a), et dans plusieurs petites cellules (b) de largeur finale ΔE_k (d'après Swartz, 1985).

Pour un seuil d'ionisation T^i , une énergie E_i de l'électron primaire incident et une énergie E_s de l'électron secondaire, elle s'exprime sous la forme :

$$\sigma_{sec}(E_i \rightarrow E_s) = \frac{\sigma_{ion}(E_i)}{N} \frac{1}{T^i + E_s} \exp \left[-\frac{T^i + E_s}{31,5} - 339 \exp \left(-\frac{T^i + E_s}{2,49} \right) \right] \times \ln \left(\frac{\sqrt{E_i} + \sqrt{E_i - (T^i + E_i)}}{\sqrt{E_i} - \sqrt{E_i - (T^i + E_i)}} \right) \quad (33)$$

où N est un facteur de normalisation choisi tel que :

$$\int \sigma_{sec}(E_i \rightarrow E_s) dE_s = \sigma_{ion}(E_i) \quad (34)$$

c'est-à-dire la section efficace totale d'ionisation en fonction de l'énergie incidente E_i .

Comme les électrons primaires perdent l'énergie $\Delta E = E_s + T^i$ au cours de ce même processus, la production de l'électron primaire dégradé à l'énergie $E_p = E_i - E_s - T$ peut être décrite par la même section efficace, soit rigoureusement :

$$\sigma_{deg}(E_i \rightarrow E_p) = \sigma_{sec}(E_i \rightarrow E_s) \quad (35)$$

Si l'on fait coïncider l'énergie E_s à un point de la grille d'énergie, aucun ajustement pour $\sigma_{sec}(E_i \rightarrow E_s)$ n'est nécessaire. Dans ce cas-ci néanmoins, nous avons un problème avec l'électron primaire dégradé à l'énergie E_p , qui n'est alors plus située en un point donné de la grille, nécessitant un réajustement similaire à l'équation (32).

En effet, l'énergie finale dégradée du photoélectron primaire est maintenant : $E_p = E_i - T^i - E_s$ comme on l'a vu. Pour calculer les taux auxquels les électrons primaires sont déposés dans la cellule la plus proche de E_p , la fonction de redistribution incluse dans la modification de la section efficace partielle d'ionisation doit alors s'écrire selon (Swartz, 1985) :

$$\sigma_{eff}^i(E_k) = \sigma^i(E_s) \frac{T^i + E_s}{E_i - E_k} \quad (36)$$

où $\sigma^i(E_s)$ désigne la section efficace partielle d'ionisation originelle pour l'énergie du secondaire E_s .

Cependant, s'il conserve l'énergie, cet ajustement ne conserve pas le nombre d'électrons et il devient dans ce cas précis plus avantageux d'abandonner la formule (36) et d'imposer directement, puisque les collisions des électrons entre eux ne modifient pas le transport (ils sont trop rapides pour avoir une interaction significative entre eux) :

$$\int_0^{E_i} \sigma_{deg}(E_i \rightarrow E_p) dE_p = \int_0^{E_i} \sigma_{sec}(E_i \rightarrow E_s) dE_s \quad (37)$$

Il résulte de tout ceci que σ_{deg} et σ_{sec} doivent être calculées indépendamment. Pour le calcul de σ_{deg} pour l'électron primaire, il suffit, sans aucune autre modification, de substituer $E_i - T^i - E_s$ par E_s dans les équations (33) et (34).

En conclusion de ces développements, Swartz (1985), complété par Lummerzheim (1987), préconise une grille de 34 énergies au moins pour une dégradation satisfaisante de l'énergie du primaire. Les tests sur les conservations de l'énergie et du nombre de particules montrent qu'il faut 40 boîtes d'énergie pour les photoélectrons (d'énergie ≈ 350 eV) espacées selon une loi exponentielle telle que $I \propto \exp[-\sigma(E)]$ (grille serrée aux basses énergies, plus lâche aux énergies élevées).

• Transport et redistribution angulaire

Lorsque son terme source est connu, l'équation de transport de Boltzmann devient similaire à une équation de transfert radiatif, que l'on résout grâce à la technique numérique des ordonnées discrètes (routine DISORT dans TRANSCAR), mise au point notamment par Stamnes *et al.* (1988). Cette technique, initiée par Chandrasekhar (1960) puis appliquée au domaine de la neutronique par Carlson & Lathrop (1968), se décompose en deux étapes successives : la discrétisation angulaire tout d'abord, pour laquelle on choisit un certain nombre de directions (typiquement 8 ou 12) affectées de poids ω_i choisis selon la méthode de Gauss. Le terme intégral dans l'équation de transfert radiatif et dans les conditions aux limites est remplacé par une somme quadratique des luminances selon ces directions grâce au schéma d'intégration exact :

$$\int f(\mu) d\mu = \sum_i \omega_i f(\mu_i) \quad (38)$$

où μ représente comme précédemment le cosinus de l'angle d'attaque de l'électron incident par rapport au champ magnétique.

L'équation de transfert s'exprime alors sous la forme d'un système d'équations aux dérivées partielles.

La deuxième étape correspond à une discrétisation spatiale nécessaire à la résolution de ce système d'équations. La grille d'altitude choisie peut comporter de 50 à 100 cellules comprises entre 90 et 800 km, de taille croissante déterminée de manière à ce que la hauteur d'une cellule h ne soit pas plus grande que la hauteur d'échelle locale :

$$h \leq \frac{k_b T}{mg} \quad (39)$$

1.4 Sections efficaces d'ionisation

1.4.1 Calcul des sections efficaces sur les boîtes d'énergie du flux

Mon travail s'est dans un premier temps focalisé sur la recherche des sections efficaces de photoionisation et d'ionisation par impact électronique de N_2 , O_2 , O pour donner les ions doublement chargés N_2^{++} , O_2^{++} , et O^{++} , données indispensables au calcul de la production des photoélectrons et des électrons secondaires.

Dans un deuxième temps, nous pouvons inclure un mécanisme supplémentaire de production d'ions, suivant en cela les études précédentes (notamment Prasad & Furman, 1977 ; Avakyan, 1978 ; Geiss & Young, 1981 ; Breig *et al.*, 1982) : la contribution $O^+ + h\nu \rightarrow O^{++} + e^-$ est ainsi, comme on le verra dans le paragraphe sur les productions, la contribution prédominante à haute altitude. Les sections efficaces utilisées sont celles de Kjeldsen *et al.* (2002) pour la photoionisation de O^+ et de Aitken & Harrison (1971) pour l'ionisation par impact électronique.

Une autre source de dications moléculaires est également l'ionisation simple de N_2^+ et O_2^+ : cela implique de prendre en considération à la fois les sections efficaces d'ionisation (de l'ordre de 10^{17} cm^2 pour N_2^+ selon Bahati *et al.*, 2001) et surtout les concentrations en ions N_2^+/O_2^+ dans l'atmosphère supérieure. Ces dernières étant plus petites d'un facteur 10^6 en moyenne que les concentrations typiques des espèces neutres, la contribution de ce mécanisme à la production de N_2^{++} et O_2^{++} est négligeable dans la plage d'altitudes considérée au regard de la double photoionisation.

Enfin, les contributions des sections efficaces d'ionisation dissociative sont négligeables d'un facteur 100 par rapport à celles de double ionisation directe (*i.e.* $O_2 \rightarrow O^{++} + O + 2e^-$ à comparer à $O \rightarrow O^{++} + 2e^-$) : elles n'apparaissent donc pas ici.

Toutes les sections efficaces trouvées ont dû ensuite être moyennées sur les 39 boîtes d'énergie du flux solaire utilisées comme base de discrétisation, puis extrapolées linéairement sur les longueurs d'onde dans le cas des raies des principaux éléments apparaissant dans le flux EUV. La moyenne est en fait une moyenne pondérée de la forme :

$$\langle \sigma_i^{++}(\lambda) \rangle = \frac{\int_{\lambda}^{\lambda+\Delta\lambda} \sigma_i^{++}(\lambda) d\lambda}{\Delta\lambda} \quad (40)$$

où $\langle \sigma_i^{++} \rangle$ est la section efficace moyenne d'ionisation donnant l'espèce doublement chargée X^{++} sur une gamme de longueurs d'onde de largeur $\Delta\lambda$.

Le Tableau 2 résume les différentes sections efficaces de photoionisation et par impact électronique disponibles dans la littérature.

1.4.2 Détermination des sections efficaces

- **Première tentative (Samson, 1990)**

Le Tableau 2 possède de nombreuses lacunes : pourtant nous pouvons essayer dans une première approche de le compléter, et notamment obtenir les données manquantes pour $N_2 \rightarrow N_2^{2+} + 2e^-$, en considérant que la double photoionisation présente une analogie avec l'ionisation par impact électronique d'un ion simple, suivant en cela les recommandations de Samson (1990).

La double photoionisation d'un atome y est décrite en terme d'un processus à deux étapes où le photon initial absorbé produit un photoélectron (issu d'une couche externe de l'atome) qui interagit ensuite avec les $(N - 1)$ électrons restant. On obtient au final deux électrons (Fig. 1-4).

A partir d'observations et de comparaisons de sections efficaces de double photoionisation, Samson (1990) remarque dans son étude une forte similarité entre les courbes de sections efficaces relatives (normalisées à la section totale σ_t^{abs}) et la photoionisation. Dans le cas d'une photoionisation, la section efficace d'absorption est toujours définie par la loi de Beer-Lambert explicitée au paragraphe précédent :

$$\Delta I \sim I_0 n \sigma_t^{abs} \ell \quad (41)$$

où I_0 est le nombre de photons incidents interagissant avec le gaz ambiant de concentration n , parcourant un chemin ℓ dans l'atmosphère.

Le nombre de dications, noté \mathcal{N}_y^{2+} , est donné grâce à la section efficace de double photoionisation par :

$$\mathcal{N}_y^{2+} = I_0 n \sigma_i^{++} \ell \quad (42)$$

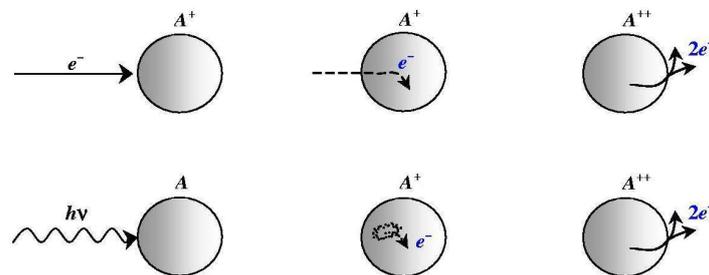


Fig. 1-4 – Comparaison pour la production de A^{++} par ionisation par impact électronique d'un ion A^+ (haut) et par double photoionisation d'un neutre A (bas) (d'après Samson, 1990).

De manière symétrique, la section efficace partielle pour l'ionisation simple par impact électronique d'un ion est définie par :

$$\mathcal{N}_{e^{2+}} = N_e n_i \sigma_e^+ \ell \quad (43)$$

où N_e est le nombre d'électrons entrant en collision avec un faisceau d'ions de concentration n_i .

On peut aussi caractériser ces deux mécanismes en supposant que l'électron interne créé après impact de l'électron ou du photon parcourt un chemin effectif l et l' respectivement à travers une concentration en électrons restants $(N-1)/\mathcal{V}$, où \mathcal{V} est le volume de la zone d'interaction. Dans cette hypothèse, on obtient le nombre d'ions bi-chargés dans le cas de la photoionisation :

$$\mathcal{N}_\gamma^{2+} = \Delta I (N-1) \frac{l}{\mathcal{V}} \sigma_{e_{int}}^+ \quad (44)$$

Et pour l'ionisation par impact électronique :

$$\mathcal{N}_{e^{2+}} = N_e n_i \sigma_e^{abs} \ell (N-1) \frac{l'}{\mathcal{V}} \sigma_{e_{int}}^+ \quad (45)$$

où σ_e^{abs} est la section efficace d'absorption d'un électron par un ion.

En combinant les équations (41) à (45), on obtient le rapport de proportionnalité souhaité entre les deux mécanismes :

$$\frac{\sigma_i^{++}}{\sigma_e^{abs}} = \frac{l}{l'} \frac{\sigma_e^+}{\sigma_e^{abs}} \quad (46)$$

L'étude de l'article porte sur plusieurs atomes : N , O , Ne , Ar et He et pour chacun, une loi de proportionnalité est bien vérifiée par les résultats expérimentaux. La meilleure correspondance est trouvée pour l'argon ($18 e^-$) avec un facteur de proportionnalité de $0,133 \times 10^{16} \text{ cm}^{-2}$ sur une très grande gamme d'énergie ($0 - 100 \text{ eV}$). Samson insiste aussi sur le fait que ces coefficients doivent être proportionnels au nombre d'électrons des espèces cibles.

Deux limitations à ce modèle dans le cas des ions doublement chargés atmosphériques sont à noter. D'abord, il ne concerne que les atomes, et a priori, le raisonnement n'est pas transposable à des molécules comme N_2 ou O_2 . Les résultats pour O ($0,292 \times 10^{16} \text{ cm}^{-2}$) ne permettent ensuite pas d'étendre la proportionnalité sur toutes les gammes d'énergie : elle n'est vérifiée que sur les premiers 50 eV au-dessus du seuil de photoionisation. Pour le flux solaire, le nombre de photons a tendance à diminuer avec l'énergie. Les écarts à cette proportionnalité à haute énergie ne modifieront donc pas significativement les résultats de la modélisation.

Tableau 2 – Références donnant les sections efficaces d'ionisation pour la formation d'ions doublement chargés. Les données de $N_2 \rightarrow N_2^{3+} + 2e^-$ (astérisque) sont accessibles grâce aux résultats de Bahati *et al.* sur la simple ionisation de N_2^+ par impact électronique (voir texte).

Espèces concernées	Sections efficaces de photoionisation	Sections efficaces d'ionisation par impact e^-
$N_2 \rightarrow N_2^{3+} + 2e^-$	—*	Halas and Adamczyk (1972) Märk (1975) Krishnakumar & Srivastava (1990) Straub <i>et al.</i> (1996)
$N_2 \rightarrow N_2^{2+} + e^-$	—	Bahati <i>et al.</i> (2001)
$O_2 \rightarrow O_2^{3+} + 2e^-$	—	Märk (1975) Krishnakumar & Srivastava (1992) Straub <i>et al.</i> (1996)
$O_2 \rightarrow O_2^{2+} + e^-$	—	—
$O \rightarrow O^{3+} + 2e^-$	Angel & Samson (1988), Fennelly & Torr (1992)	Ziegler <i>et al.</i> (1982) Zipf (1985) Itikawa & Ichimura (1990)
$O^+ \rightarrow O^{3+} + e^-$	Breig <i>et al.</i> (1977), Kjeldsen <i>et al.</i> (2002), Aguilar <i>et al.</i> (2003)	Aitken & Harrison (1971), Yamada <i>et al.</i> (1988)

Dans le cas de la molécule de diazote N_2 (14 e^-), et en attendant des mesures expérimentales de double photoionisation, nous pourrions faire l'hypothèse d'utiliser les résultats donnés pour l'argon Ar dans Samson (1990) : N_2 peut en effet être considérée comme une molécule à couche fermée, équivalente à un gaz rare, et comme son nombre d'électrons est proche de celui de Ar , le coefficient de proportionnalité recherché est supposé du même ordre de grandeur, *i.e.* $0,133 \times 10^{16} \text{ cm}^{-2}$.

En appliquant ce coefficient aux données de Bahati *et al.* (2001) pour σ_e^+ , au préalable moyennées sur les 39 boîtes d'énergie, la section efficace de double photoionisation pour N_2^{3+} peut être calculée grâce à la formule :

$$\sigma_i^{3+} = 0,133 \times 10^{16} \sigma_i^{abs} \sigma_e^+ \quad (47)$$

où on a pris les données de Fennelly & Torr (1992) pour la section efficace d'absorption σ_i^{abs} .

Pourtant, cette approche, sujette à de nombreuses suppositions, est contestable et de nombreux physico-chimistes, qui ont étudié en détail le mécanisme de double

ionisation d'un atome, ne trouvent aucune justification physique dans les conclusions de Samson. Cette explication par dichotomie du processus est en effet sujette à de fortes suspicions dans la communauté et nous sommes donc obligés de trouver une autre solution plus consensuelle (O. Dutuit, communication personnelle).

- **Deuxième tentative : vers une deuxième approche (LCP)**

Pour obtenir les sections efficaces de double photoionisation $\sigma_{h\nu}^{++}(N_2)$ et $\sigma_{h\nu}^{++}(O_2)$, nous utilisons dans le modèle final l'approximation :

$$\frac{\sigma_{h\nu}^{++}(N_2)}{\sigma_{h\nu}^+(N_2)} = \frac{\sigma_e^{++}(N_2)}{\sigma_e^+(N_2)} \quad \text{et} \quad \frac{\sigma_{h\nu}^{++}(O_2)}{\sigma_{h\nu}^+(O_2)} = \frac{\sigma_e^{++}(O_2)}{\sigma_e^+(O_2)} \quad (48)$$

où $\sigma_{h\nu}^+(i)$ représente la section efficace de photoionisation simple de l'espèce i , et $\sigma_e^+(j)$ la section efficace d'ionisation simple par impact électronique de l'espèce j . Cette approximation est le fruit de discussions avec les physico-chimistes du LCP en attendant des mesures en laboratoire. Les rapports sont calculés constants sur une très grande gamme énergétique, correspondant à des pourcentages égaux à 1,5% pour N_2^+ et à 0,5% pour O_2^+ . La section efficace obtenue est plus petite d'un facteur 4 que celle calculée via la méthode de Samson (1990) du paragraphe précédent. En l'absence totale de données, cette approche trouve sa justification dans la similarité des processus physiques sous-jacents (on compare pour la même espèce les rapports de photoionisation et d'ionisation par impact électronique), au contraire de la dichotomie de Samson qui ne repose pas sur une réalité physique établie. C'est cette approximation qui sera utilisée dans la suite de ce travail.

1.4.3 Sections efficaces de photoionisation pour N_2 , O_2 et O

- $N_2 \xrightarrow{h\nu} N_2^{++} + 2e^-$

La section efficace de double ionisation calculée par la deuxième méthode exposée (pourcentage de 1.5%) possède un maximum à $0,159 \times 10^{-18} \text{ cm}^2$ situé dans la gamme 250-300 Å comme nous le montre la Fig. 1-5.

Bien entendu, les autres sections efficaces prises en compte dans la modélisation des ions (N^+ , N_2^+) doivent être modifiées pour tenir compte de l'ajout de l'espèce N_2^{++} : ainsi, la contribution de N_2^{++} a été soustraite à celle de l'ion N_2^+ qui est la seule valeur non tabulée du modèle.

Les sections efficaces de photoabsorption sont par ailleurs connues à $\pm 3\%$ près selon Samson *et al.* (1987)¹². L'incertitude sur la section efficace de double

¹² Les résultats de Samson *et al.* (1987) pour N_2 ont servi de base d'interpolation à la compilation de Fennelly & Torr (1992).

photoionisation peut donc être estimée à $\pm 50\%$ en moyenne sur la plage d'énergies considérées.



Les seules données dans le cas de O_2 sont celles de double ionisation par impact électronique. La solution retenue ici est une approximation en attendant des mesures en laboratoire. Deux approches peuvent nous fournir une approximation des valeurs de section efficace.

La première fait appel au rapport explicité au § 1.4.2 : la section efficace de double ionisation de O_2 correspond à 0,5% de la section efficace d'ionisation simple de la molécule.

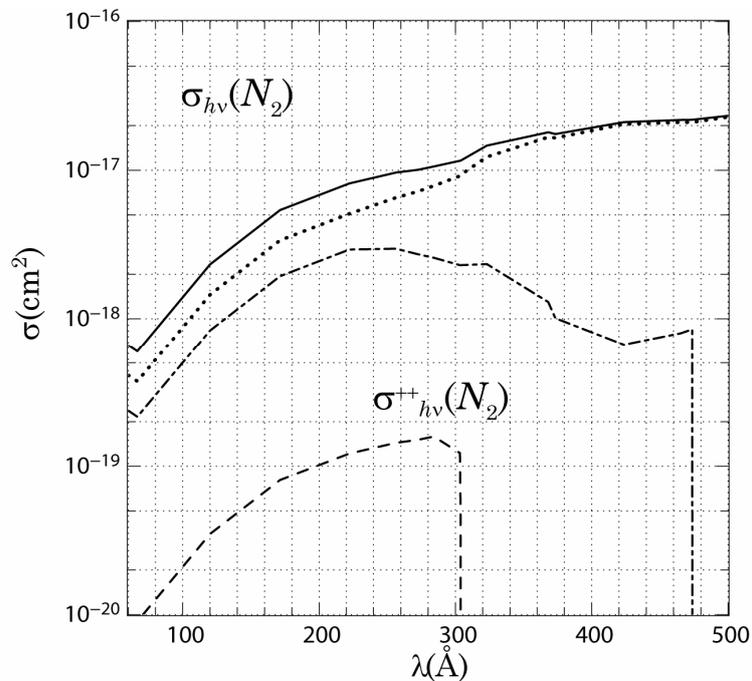


Fig. 1-5 – Sections efficaces de double photoionisation (tirets, calculée) et d'absorption (trait plein, mesurée, d'après les données de Fennelly & Torr, 1992) de la molécule d'azote N_2 . La courbe en pointillés représente pour comparaison la section efficace de photoionisation simple pour $N_2 \rightarrow N_2^+ + e^-$. La courbe en tirets-points représente la section efficace d'ionisation dissociative pour $N_2 \rightarrow N^{++} + N^+ + 2e^-$.

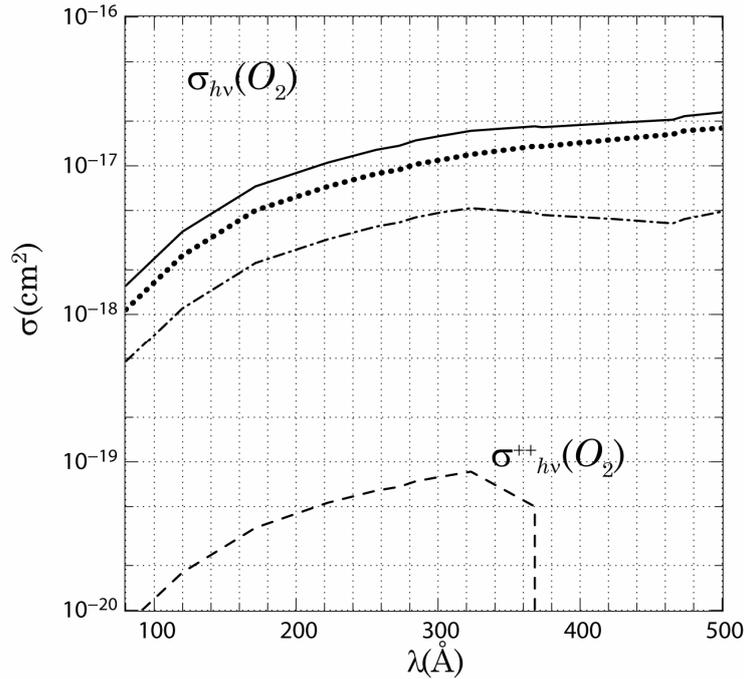


Fig. 1-6 – Sections efficaces de photoionisation de O_2 (Rees, 1989). Sont tracées les sections efficaces de photoionisation totale (trait plein), $O_2 \rightarrow O_2^+ + e^-$ (pointillés), $O_2 \rightarrow O^+ + O^+ + e^-$ (tirets-points) et $O_2 \rightarrow O_2^+ + 2e^-$ (tirets, calculée).

Un deuxième raisonnement nous permet d'étayer cette hypothèse en supposant que le rapport *double photoionisation–double ionisation par impact électronique* reste relativement constant sur les plages d'énergie lorsque l'on passe de O_2 à N_2 . En effet, l'ionisation d'une molécule (par impact électronique ou par un photon) est modulée par la spectroscopie de l'ion associé et notamment par la présence d'états ou non. Dans une première approximation, on peut écrire que¹³ :

$$\sigma_e^{++} \propto \int \sigma_{h\nu}^{++} dE \quad (49)$$

et le rapport $\sigma_{h\nu}^{++}/\sigma_e^{++}$ devrait donc représenter cette relation.

Ce rapport devrait être constant d'une molécule à l'autre, même si les états, et donc les valeurs absolues des sections efficaces, changent.

En appliquant le rapport trouvé pour N_2 aux sections efficaces de $O_2 \rightleftharpoons O_2^{++} + 2e^-$ données par Straub *et al.* (1996), moyennées sur les boîtes du flux, on obtient une valeur satisfaisante des sections efficaces de double photoionisation de O_2 (Fig. 1-6) qui vérifie les résultats trouvés précédemment à moins de 10%, c'est-à-dire bien en

¹³ Dans le cas de la photoionisation, on peut dire que le processus est « binaire » pour l'énergie transférée au système, puisque soit le photon traverse le milieu sans interagir, soit il interagit et toute son énergie est utilisée pour ioniser la molécule. Dans le cas de l'ionisation par impact électronique, l'électron perd plus ou moins d'énergie dans la collision ; l'ionisation s'apparente à un processus analogue.

deçà des incertitudes globales de nos estimations, évaluées à au moins $\pm 50\%$ en moyenne.

La section efficace de double photoionisation de O_2 passe par un maximum à $8,6 \times 10^{-20} \text{ cm}^2$ dans la gamme 300–350 Å atteignant donc 0,5% de la section efficace totale d'ionisation comme présenté sur la Fig. 1-6.

- $O \xrightarrow{h\nu} O^{++} + 2e^-$

Depuis plusieurs décennies, plusieurs auteurs se sont intéressés à l'oxygène atomique et aux sections efficaces de photoionisation correspondantes. Nous avons choisi les données de Fennelly & Torr (1992) dérivées de celles d'Angel & Samson (1988). Elles sont données avec une excellente discrétisation, permettant d'obtenir des résultats fiables après avoir fait la moyenne sur chacune des boîtes d'énergie.

Comme on le voit sur la Fig. 1-7, cette section efficace est concentrée à haute énergie (gamme 100–200 Å), et malgré sa valeur faible (moins de 10% de la section totale d'ionisation), on peut s'attendre à une contribution importante pour la production d'ions O^{++} . D'après Angel & Samson (1988), les incertitudes sur les mesures s'élèvent à $\Delta\sigma = \pm 9\%$.

- $O^+ \xrightarrow{h\nu} O^{++} + e^-$

Nous choisissons ici les données extrêmement bien documentées de Kjeldsen *et al.* (2002) que l'on a tracées sur la Fig. 1-7 (rouge) et dont les mesures sont les plus récentes et les mieux discrétisées à ce jour.

1.4.4 Sections efficaces d'ionisation double par impact électronique

Les sections efficaces de double ionisation par impact électronique de N_2 , O_2 , O sont disponibles dans la littérature (Märk, 1975 et Zipf, 1985). Pour introduire simplement ces données dans les entrées de TRANSCAR, nous faisons appel à un rapport de branchement $\alpha = \sigma_i(E)/\sigma_{tot}(E)$. Ce rapport est constant à 30% près sur la plage d'énergie 50-150 eV, et ce pour chacune des espèces.

Les pourcentages valent respectivement $\alpha(N_2^+) = 1,5\%$, $\alpha(O_2^+) = 0,5\%$ et $\alpha(O^{++}) = 3,5\%$ dans la modélisation, en sachant qu'ici encore, c'est l'ordre de grandeur qui compte. Compte tenu de cette approximation, les incertitudes s'élèvent à environ 40% entre 70 et 170 Å, à plus de 100% au-delà.

Nous avons tracé sur la Fig. 1-8 (gauche) les sections efficaces d'ionisation double par impact électronique pour les trois espèces considérées calculées par le code. A droite, les sections efficaces d'ionisation de O^+ par impact électronique sont représentées.

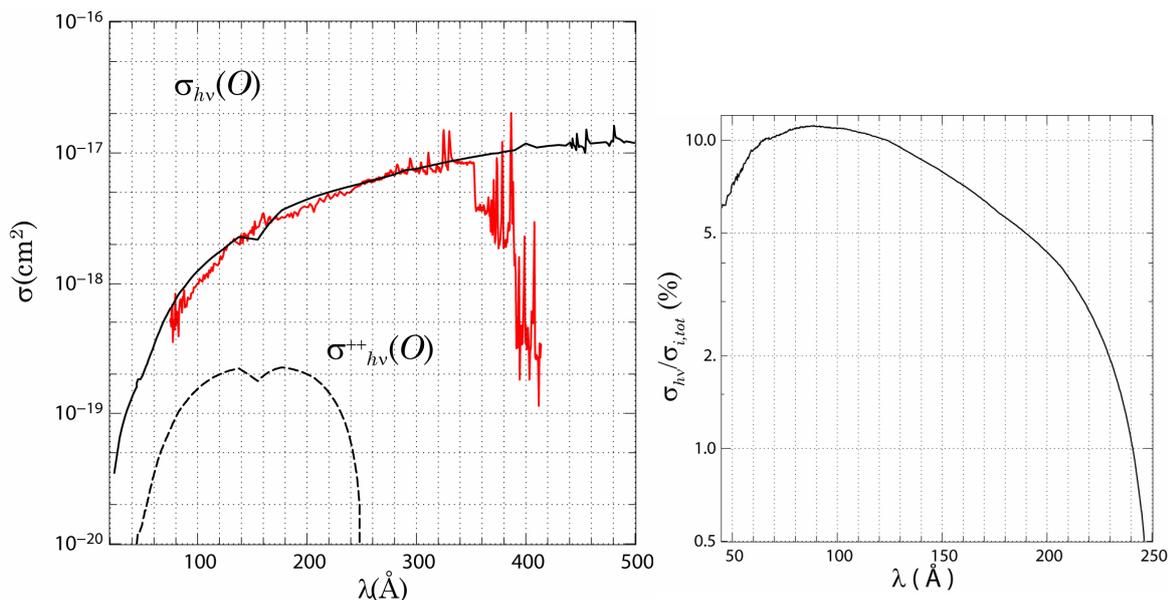


Fig. 1-7 – Section efficace totale de photoionisation (trait plein) et de double photoionisation (tirets) de O, d'après Fennelly & Torr (1992). En rouge est tracée la section efficace de photoionisation de O⁺ mesurée par Kjeldsen et al. (2002). La double photoionisation atteint 11% de la section efficace d'ionisation totale entre 75 et 110 Å (droite).

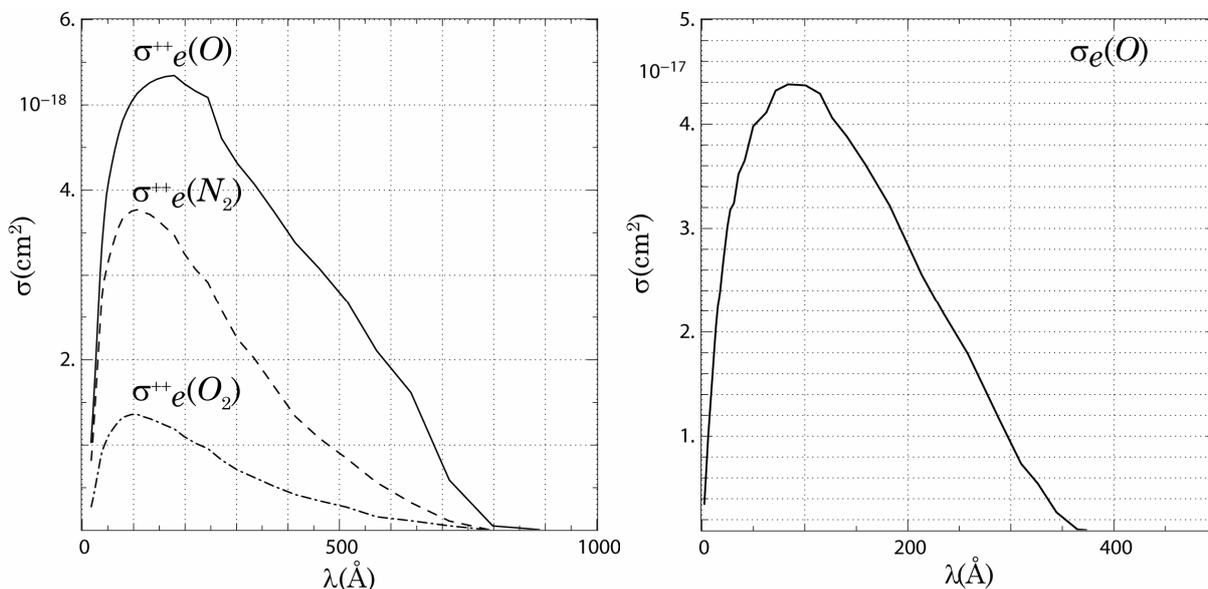


Fig. 1-8 – Sections efficaces d'ionisation double par impact électronique calculées par TRANSCAR en fonction de la longueur d'onde définie t.q. $E = hc/\lambda$ à partir d'une moyenne sur les données de Märk (1975) pour les ions moléculaires (N₂⁺ : tirets, O₂⁺ : tirets-points) et de Zipf (1985) pour O⁺⁺ (trait plein, gauche). Droite : section efficace d'ionisation de O⁺ par impact électronique, d'après Aitken & Harrison (1971).

On remarque que les sections efficaces pour la collision $O_2 + e^- \rightarrow O_{\frac{1}{2}^+} + 3e^-$ sont beaucoup plus petites que pour les autres espèces ($1,36 \times 10^{-18} \text{ cm}^2$, soit un facteur 4 comparé à la formation de $N_{\frac{1}{2}^+}$), ce qui, par rapport au flux solaire incident, va induire une diminution notable (en proportion) de la part des électrons secondaires produits par ionisation de O_2 dans la formation de cette espèce. Les pics se situent respectivement pour $N_{\frac{1}{2}^+}$, $O_{\frac{1}{2}^+}$ et O^{++} , à 180 \AA (70 eV), 110 \AA (110 eV) et 100 \AA (125 eV). L'ionisation simple de O^+ possède quant à elle un pic très étroit de section efficace à $4,4 \times 10^{-17} \text{ cm}^2$ vers 90 \AA : au-delà de 400 \AA , la section efficace diminue rapidement. Elle est en moyenne à haute énergie (gamme de longueur d'onde $0 - 500 \text{ \AA}$) 10 fois plus importante que celle de double ionisation de O correspondante, ce qui aura un impact très important sur la répartition en altitude des productions secondaires, que l'on explicitera par la suite.

Chapitre 2

Validation, comparaison et résultats.

De la Terre à Titan

Sommaire

2.1	Productions primaires	58
2.1.1	Paramètres de modélisation et modifications attendues	58
2.1.2	Analyse de la production primaire d'ions et d'électrons	59
2.1.3	Sensibilité aux conditions d'activité solaire et à la latitude.....	61
2.2	Étude comparée des productions primaires et secondaires	74
2.2.1	Caractéristiques générales	74
2.2.2	Forme générale des productions électroniques	74
2.2.3	Sensibilité aux paramètres géophysiques	77
2.3	Récapitulons (I)	85
2.3.1	Productions primaires.....	85
2.3.2	Productions secondaires	85
2.3.3	Productions totales.....	86
2.4	Modèle photochimique et concentrations	87
2.4.1	Réactions chimiques.....	87
2.4.2	Calcul des concentrations ioniques entre 100 et 500 km	90
2.4.3	Validation du modèle	91
2.4.4	Conclusion préliminaire : validation et limites du modèle.....	96
2.4.5	Sensibilité des concentrations aux paramètres géophysiques	97
2.5	Récapitulons (II).....	104
2.6	Résultats sur Titan.....	106
2.6.1	Présentation générale	106
2.6.2	L'atmosphère de Titan et application aux ions N_2^{++}	108
2.6.3	Description du modèle photochimique diurne.....	110
2.6.4	Résultats	111
2.6.5	Conclusions	112

Ce chapitre s'attache aux résultats de la modélisation des ions N_2^+ , O_2^+ et O^{++} sur Terre et leur extension à Titan, satellite de Saturne. Comme nous l'avons vu, notre cheminement s'articule en plusieurs étapes explicitées d'une manière théorique au chapitre Chapitre 1 : productions primaires, productions secondaires et modèle photochimique des concentrations qui constituent chacun un pan du présent chapitre. Dans le deuxième paragraphe, il m'a semblé plus judicieux de faire une étude comparative des productions primaires et secondaires en mettant l'accent sur la contribution de chacun des processus à l'ionisation totale. Un paragraphe de récapitulation, fait suite et prépare le calcul des concentrations des trois ions doublement chargés, but suprême de la modélisation (§ II.4). L'application de notre modèle à l'ionosphère de Titan pour l'ion N_2^{++} conclut finalement le chapitre.

2.1 Productions primaires

2.1.1 Paramètres de modélisation et modifications attendues

Les profils de photoproductions des principaux ions ont été calculés à des latitudes distinctes pour différents angles solaires zénithaux, et deux conditions d'activité solaire, tout cela à un indice magnétique A_p fixé. Rappelons que l'angle solaire zénithal, noté χ , vaut 0° lorsque le soleil est au zénith, et 90° pour un soleil rasant. Ici, on a choisi 3 angles : près du zénith, intermédiaire et enfin rasant. A_p est pris petit pour que les perturbations d'origine magnétique et les événements transitoires du soleil (éruptions, orages magnétiques) ne viennent pas interférer avec les variations dues uniquement à la latitude et à l'angle solaire zénithal. La latitude de Tromsø (Norvège), et Grenoble ont été choisies, l'une car elle est située dans l'ovale auroral¹⁴ (elle est donc plus sensible aux conditions d'activité solaire), l'autre car elle est représentative des moyennes latitudes¹⁵. Les conditions thermosphériques initiales correspondent à un jour de printemps (120^e jour). Ces paramètres sont résumés dans le Tableau 3.

Le premier effet de l'ajout des contributions des dications est la modification du nombre total de photoélectrons par cm^3 et par seconde par rapport à la modélisation des ions simples seuls. Puisque nous introduisons un électron supplémentaire par espèce rajoutée¹⁶, il faut s'attendre à une augmentation du nombre de

¹⁴ Tromsø est une ville du nord de la Norvège accueillant par ailleurs deux antennes radars UHF et VHF de l'association EISCAT destinées à sonder l'ionosphère aurorale. Les résultats de la modélisation pourront donc être directement comparés aux mesures faites par EISCAT.

¹⁵ En dehors du fait que ce soit aussi l'emplacement du LPG ...

¹⁶ Deux électrons sont produits pour la photoionisation double, mais un des deux était déjà pris en compte dans la production de N_2^+ et O^+ avant l'introduction des ions doublement chargés. Les sections efficaces d'ionisation de N_2^+ et de O^+ ont été ensuite modifiées dans la modélisation pour

photoélectrons. Elle vaut environ 10 photoélectrons ($^{20}_2$) pour $N\frac{1}{2}^+$ (soit 20 *photoélectrons cm⁻³ s⁻¹* calculés au pic vers 140 km), 3 photoélectrons pour $O\frac{1}{2}^+$ et 5 photoélectrons pour O^{++} . Conformément à l'équation (13), les courbes de photoproduction primaire suivent linéairement les profils de concentration des espèces neutres associées, modulées par les sections efficaces partielles d'ionisation et par le flux solaire EUV.

Tableau 3 – *Jeux de paramètres géophysiques utilisés lors des « runs » TRANSCAR pour calculer les productions ioniques.*

Paramètres	
Latitude	$\left\{ \begin{array}{l} \text{Tromsø } 69.66^\circ, 18.95^\circ \\ \text{Grenoble } 45.11^\circ, 5.43^\circ \end{array} \right.$
Angle solaire zénithal χ	$\left\{ \begin{array}{l} \chi = 30,47^\circ \\ \chi = 63,51^\circ \\ \chi = 90^\circ \end{array} \right.$
Activité solaire $f_{10.7}$	$\left\{ \begin{array}{l} f_{10.7} = 68 \\ f_{10.7} = 243 \end{array} \right.$
Indice magnétique Ap	$Ap = 3$

Une étude de sensibilité du modèle de photoproduction primaire aux paramètres du Tableau 3 est présentée dans la suite.

2.1.2 Analyse de la production primaire d'ions et d'électrons

- **Description**

La Fig. 2-1 (haut) représente les profils typiques de productions données par le modèle TRANSCAR (*ici*, à Grenoble, $f_{10.7} = 68$, $\chi = 63,51^\circ$). La production électronique totale est tracée en noir et correspond à la somme de toutes les autres contributions ioniques pondérées par le nombre d'électrons produits. Nous voyons que par photoionisation de l'atmosphère, le flux EUV est responsable d'une composante ionisée à deux maxima. Le premier se situe à 110 km ($1,46 \times 10^3 \text{ cm}^{-3} \text{ s}^{-1}$) et est dû principalement au pic de production¹⁷ de $O\frac{1}{2}$. L'ionisation à la fois de N_2 (bleu) et O (rouge) provoque un second maximum vers 165 km ($1,52 \times 10^3 \text{ cm}^{-3} \text{ s}^{-1}$).

tenir compte de $N\frac{1}{2}^+$ et $O\frac{1}{2}^+$, rajoutant donc la contribution d'un seul électron par espèce dans la modélisation finale.

¹⁷ Lui-même dû au pic de concentration du dioxygène O_2 .

Au-dessus de typiquement 250 km , la source majoritaire de photoélectrons ionosphériques est la production de O^+ à partir de l'oxygène atomique. Les maxima principaux de toutes les espèces ioniques se situent par ailleurs entre 150 et 200 km d'altitude, O_2^+ excepté (pic à 110 km).

De manière générale, les ions doublement chargés contribuent à la production totale à hauteur d'un facteur 10 (basse altitude) à 100 fois plus petit en moyenne que leurs espèces correspondantes simplement chargées. Leurs maxima se situent tous vers 145 km d'altitude mais sont toutefois bien individualisés.

A partir de 500 km , la production de O^{++} (tirets rouges) devient comparable à celle de N_2^+ (bleu) et atteint $10^{-2}\text{ cm}^{-3}\text{ s}^{-1}$: c'est la troisième contribution à la production totale de photoélectrons primaires. La dépendance en $[O^+]$ est bien visible à plus haute altitude et la décroissance du profil en altitude se fait beaucoup plus lente.

• Incertitudes

La méthode de résolution possède une incertitude intrinsèque qu'il est en général difficile d'estimer. Des tests sur la conservation de l'énergie et du nombre de particules montre que celles-ci sont vérifiées en moyenne à mieux que 5% (Lummerzheim & Lilensten, 1994).

Avant d'estimer les incertitudes sur les productions systématisées par l'équation (13), on peut estimer celles sur les sections efficaces d'ionisation, celles sur le flux EUV et enfin celles sur les concentrations calculées par le modèle MSIS (Hedin, 1991). Les barres d'erreur pour la concentration de O sont égales à $\pm 100\%$ dans l'ovale auroral (haute latitude, *e.g.* Tromsø) et à 30% environ aux plus basses latitudes (Grenoble).

Pour O_2 et N_2 , l'incertitude s'élève à $10\text{--}20\%$ de la concentration totale. Le flux EUV étant très difficile à modéliser, on peut estimer la précision à 30% à basse énergie, et à 100% à haute énergie. Pour la production de N_2^+ , O_2^+ , et O^{++} , les erreurs peuvent donc être évaluées à plus de 100% .

Cependant, les comparaisons faites entre le modèle TRANSCAR et des mesures géophysiques (Blelly *et al.*, 1996) ont montré qu'il faut s'attendre à des incertitudes généralement inférieures à 30% sur les densités neutres et inférieures à 5% sur les productions des ions simplement chargés. Cela peut être interprété comme une bonne estimation des paramètres d'entrée (flux, atmosphère neutre, sections efficaces). On peut également l'interpréter comme une compensation heuristique des erreurs et une certaine robustesse du schéma numérique. Des mesures supplémentaires, notamment sur les sections efficaces et sur les concentrations des espèces chargées en vue de les comparer avec le modèle, sont par conséquent nécessaires pour affiner les calculs.

- **Détail des mécanismes de production primaire d'ions O^{++}**

Nous détaillons ici les deux contributions à l'origine de la production totale primaire de O^{++} . Comme on le voit sur la Fig. 2-2, le processus $O^+ + h\nu$ est la contribution prépondérante à partir de 500 km d'altitude (voir également Heelis *et al.*, 1973), alors que la partie inférieure du profil de production de O^{++} est induite par la double photoionisation de O . Aux alentours de 400 km d'altitude, les deux mécanismes contribuent de manière équilibrée à la production ionique. Le changement de dépendance de la photoproduction totale de O^{++} vient ici principalement de la forme des profils de concentrations des espèces pré-ionisées à l'origine de la production de O^{++} , un effet auquel se superpose la modulation des sections efficaces respectives, du double point de vue de leur intensité et de leur répartition énergétique. Les espèces neutres possèdent ainsi une décroissance avec l'altitude beaucoup plus rapide que leurs homologues ionisées.

A ceci s'ajoute, dans un deuxième temps, le fait que la section efficace d'ionisation de O^+ soit plus élevée d'un facteur 10 en moyenne et qu'elle soit localisée à plus basse énergie – donc leur effet est sensible à plus haute altitude – que les sections efficaces de double photoionisation, un ensemble de facteurs qui conduisent logiquement au profil final de la Fig. 2-2.

La sensibilité du modèle aux conditions d'activité solaire, à la latitude et à l'angle solaire zénithal a été testée dans les paragraphes suivants.

2.1.3 Sensibilité aux conditions d'activité solaire et à la latitude

- **Conditions solaires**

Les conditions d'activité solaire modifient sensiblement les résultats du modèle. La Fig. 2-1 présente les données de productions ioniques à la latitude de Grenoble et à un angle solaire zénithal moyen de $63,51^\circ$ pour des conditions d'activité solaire extrêmes ($f_{10.7} = 68$, gauche et $f_{10.7} = 243$, droite).

Le flux solaire étant plus intense, la probabilité d'ioniser voire de dissocier les molécules et les atomes constitutifs de la thermosphère devient beaucoup plus grande. Les concentrations des neutres augmentant avec l'activité solaire¹⁸ (variation avec $f_{10.7}$ dues par exemple aux effets de marée thermique¹⁹), on peut s'attendre à ce que les productions intermédiaires et donc la production totale de photoélectrons soient plus importantes.

¹⁸ Sauf H et dans une moindre mesure O_2 (Hedin, 1987).

¹⁹ L'absorption par l'ozone et la vapeur d'eau du rayonnement solaire dans la basse atmosphère provoque en effet un chauffage et une dilatation du gaz côté jour, créant un système de vents et d'ondes qui tendent à réduire les gradients côté nuit et qui se propagent dans la thermosphère.

Grenoble, $f_{10.7} = 68$ et $f_{10.7} = 243$, $\chi = 63,51^\circ$

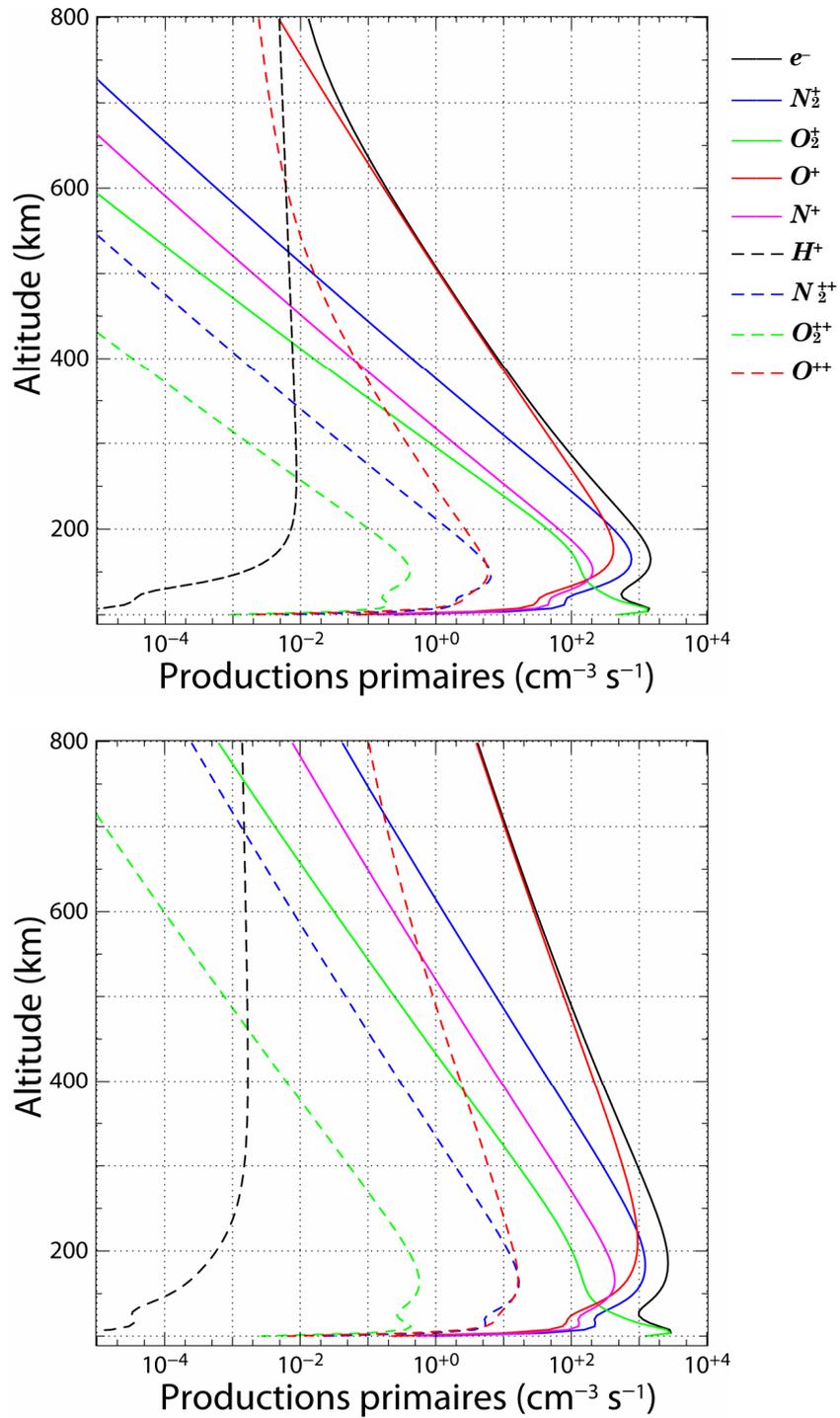


Fig. 2-1 – Taux de productions primaires ioniques à la latitude de Grenoble et pour $\chi = 63,51^\circ$. On a tracé les courbes dans le cas d'un soleil calme ($f_{10.7} = 68$, haut), et dans le cas d'un soleil actif ($f_{10.7} = 243$, bas). La courbe noire est la production électronique totale. Les productions partielles sont N_2^+ (bleu), O_2^+ (vert), O^+ (rouge), N^+ (magenta), H^+ (jaune), N_2^{++} (tirets bleus), O_2^{++} (tirets verts), O^{++} (tirets rouges).

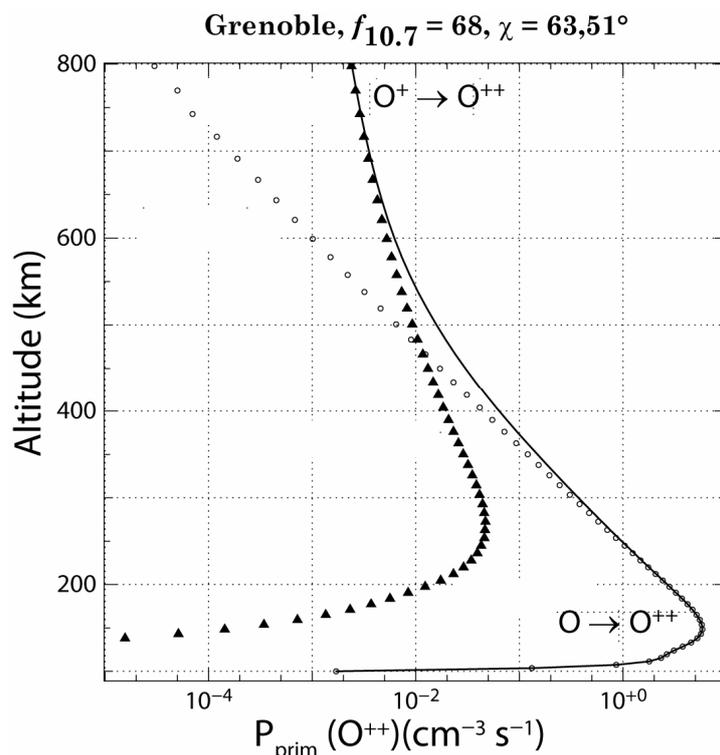


Fig. 2-2 – Détail des contributions des deux sources de production primaire de O^{++} . La simple ionisation de O^+ est schématisée par des triangles noirs, la double ionisation de O par des cercles évidés. La production primaire totale de O^{++} est représentée en trait plein : c'est la somme de ces deux contributions.

On remarque bien ici que les productions d'ionisation décroissent beaucoup plus lentement avec l'altitude lorsque l'activité solaire est à son maximum (la pente moyenne devient plus grande), excepté pour l'ion²⁰ H^+ dont la production diminue presque d'un ordre de grandeur par rapport à sa valeur pour $f_{10.7} = 68$. Cette caractéristique est due à la concentration de H , qui est anticorrélée à la température exosphérique²¹ et au flux $f_{10.7}$ (Hedin, 1987 ; Breig *et al.* 1985).

Comme la concentration de N_2 , O_2 , O croît beaucoup, la diffusion des atomes H sur les espèces présentes vers les couches les plus basses est moins efficace, et on a donc une concentration moindre. A très haute altitude en revanche ($> 800 \text{ km}$), la concentration en H et la production en H^+ sont inchangées, ce que l'on peut deviner sur la Fig. 2-1.

La position des pics de production varie peu sauf pour O^+ dont le maximum passe de 180 km ($f_{10.7} = 68$) à 210 km ($f_{10.7} = 243$). Le nombre d'ions O^+ par cm^3 et par seconde atteint ainsi pour le pic à 110 km sa valeur maximale de l'ordre de $3 \times 10^3 \text{ cm}^{-3} \text{ s}^{-1}$.

²⁰ L'ion H^+ est créé —et détruit— majoritairement par échange de charge avec O^+ .

²¹ En effet, la concentration décroît comme $\exp(-1/H_{\text{H}})$ où $H_{\text{H}} \sim k_{\text{B}} T$ pour l'hydrogène.

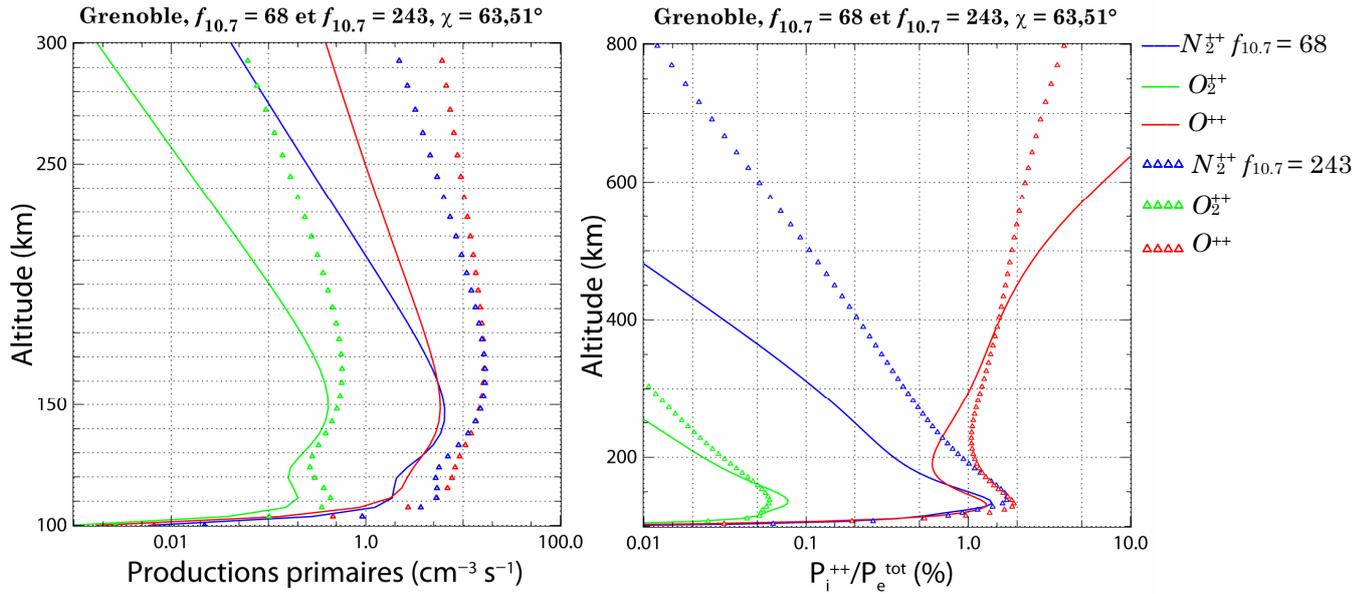


Fig. 2-3 – à gauche, productions entre 100 et 300 km des ions $N_{\frac{1}{2}}^{++}$ (bleu), $O_{\frac{1}{2}}^{++}$ (vert) et O^{++} (rouge) pour deux activités solaires : $f_{10.7} = 68$ (traits pleins) et $f_{10.7} = 243$ (triangles). À droite, rapport exprimé en % des productions de ces ions à la production totale électronique en fonction de l'altitude en km. La contribution de O^{++} devient dominante et atteint 1 % à 5 % de la photoproduction électronique totale au-delà de 300 km.

Remarquons également que la forme et le comportement des courbes de double ionisation suivent ceux des productions correspondantes pour les ions simplement chargés sauf à plus basse altitude (< 200 km) : quand la quantité d'ions $O_{\frac{1}{2}}^{++}$ produits continue de grandir jusqu'à atteindre un pic conformément à la concentration en O_2 , la production d'ions $O_{\frac{1}{2}}^{++}$ baisse de manière marquée (2 ordres de grandeur entre 100 et 110 km, Fig. 2-3).

Cet écart à basse altitude est dû à la plus grande absorption du flux solaire à ces altitudes, puisque la concentration en espèces absorbantes (notamment O_2) devient plus grande. La majeure partie du flux EUV restant passe dans l'ionisation simple, la dissociation et l'excitation du gaz ambiant au détriment de l'ionisation double. De manière générale pour les ions concernés, les seuils de double photoionisation, qui s'élèvent à plusieurs dizaines d'électronvolts comme on l'a vu, sont statistiquement moins franchis qu'à plus haute altitude.

La production en ions doublement chargés décroît ainsi fortement et passe typiquement de $P_i = 10 \text{ cm}^{-3} \text{ s}^{-1}$ à 120 km à $P_i = 10^{-2} \text{ cm}^{-3} \text{ s}^{-1}$ à 100 km.

Sur la Fig. 2-3 (gauche), qui présente les productions individuelles des trois ions $N_{\frac{1}{2}}^{++}$, $O_{\frac{1}{2}}^{++}$ et O^{++} pour les deux flux solaires choisis, on voit que cette décroissance est d'autant plus drastique et rapide que l'activité solaire est importante et donc que le flux est élevé.

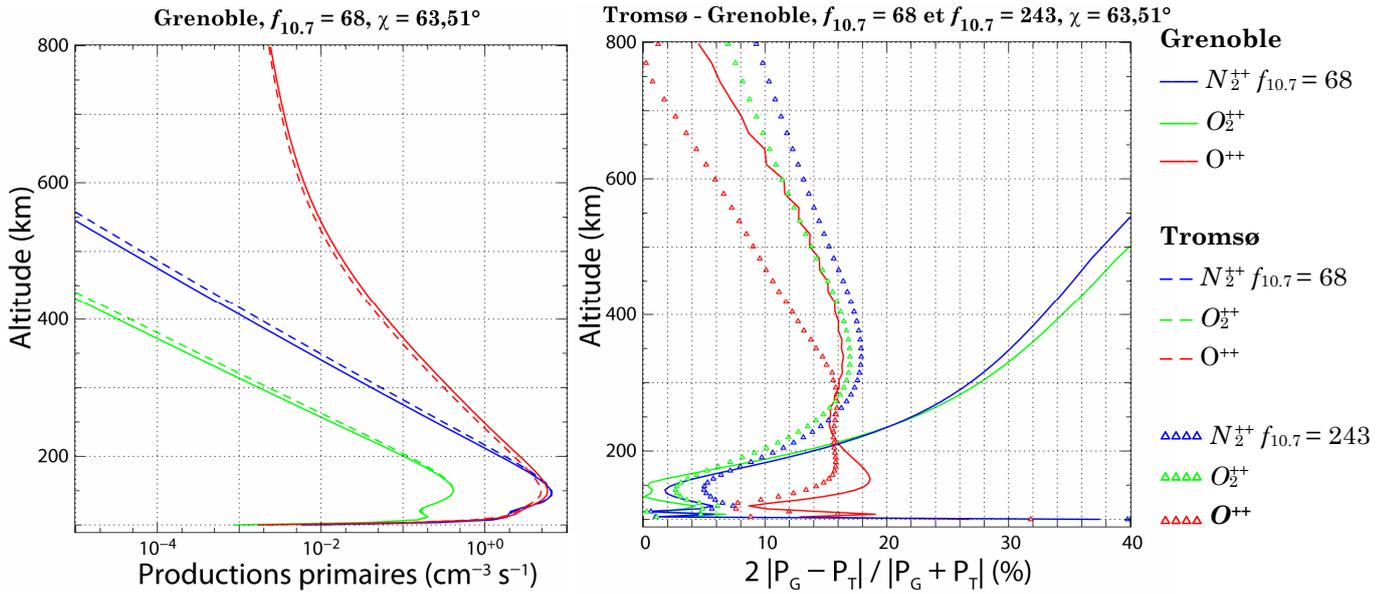


Fig. 2-4 – Comparaison des productions des ions N_2^+ (bleu), O_2^+ (vert) et O^{++} (rouge) au-dessus de Grenoble (traits pleins) et de Tromsø (tirets). La figure de droite représente le rapport relatif des écarts de production de ces trois ions entre Grenoble et Tromsø pour $f_{10.7} = 68$ (lignes) et $f_{10.7} = 243$ (triangles).

En période de grande activité, les pics de N_2^+ , O_2^+ et O^{++} se situent respectivement vers 160 km, 170 km et 155 km, et remontent en moyenne de 15 km par rapport à leur valeur en période d'activité calme.

La Fig. 2-3, à droite, représente le rapport de productions entre les ions doublement chargés et les photoélectrons pour les deux flux solaires, *i.e.* la part que prend chaque ion doublement chargé dans la création des photoélectrons. N_2^+ contribue le plus à basse altitude avec en moyenne 2,4 % du nombre d'électrons créés²² à 150 km. Pour la courbe correspondant à O^{++} , on observe un maximum à basse altitude vers 150 km (de 1,6 % en période calme à 4,8 % en période active). Plus haut en altitude vers 800 km, la contribution de O^{++} à la production électronique primaire peut atteindre 10% : les ions O^{++} contribuent alors plus à la production électronique en période calme qu'en période d'activité intense du soleil, ce qui est dû essentiellement à la prise en compte du mécanisme $O^+ \rightarrow O^{++} + e^-$.

L'un des points les plus remarquables de cette analyse est l'importance de la contribution de O^{++} à haute altitude (> 500 km) (voir également Fig. 2-4). A ces altitudes, atteignant des valeurs de l'ordre de $10^{-2} \text{ cm}^{-3} \text{ s}^{-1}$, elle participe à plus de 2 % de la production totale de photoélectrons, alors que les contributions des ions N_2^+ et O_2^+ y sont négligeables (10^{-5} et $10^{-7} \text{ cm}^{-3} \text{ s}^{-1}$ respectivement).

²² On a tracé sur la Fig. 2-3 le rapport P_i / P_e . Pour un ion chargé deux fois, deux électrons sont produits et donc la contribution à la production électronique est : $1,2 \% \times 2 = 2,4 \%$.

A partir de 700 *km*, même si sa contribution diminue, elle est responsable avec H^+ du ralentissement de la décroissance de la production électronique. Notons que quelle que soit l'activité solaire, la part que prend O^{++} dans la création de photoélectrons tend à augmenter à partir de 300 *km* d'altitude.

- **Sensibilité aux coordonnées géographiques**

Ce paragraphe se focalise sur l'influence de la latitude d'observation sur les productions des dications. Nous nous plaçons donc pour un χ fixé à $63,51^\circ$, à la latitude géographique de Tromsø et nous comparons ces données à celles discutées au paragraphe précédent.

Au changement de coordonnées géographiques correspond uniquement un changement de concentrations des espèces neutres —qui dictent donc le comportement des courbes de production—, le flux EUV restant bien entendu le même compte tenu de l'orientation fixe du soleil par rapport à l'horizon (représentée par l'angle solaire zénithal). À la latitude de Tromsø, les concentrations en N_2 et O_2 sont plus élevées qu'à Grenoble en moyenne de 5 %, alors que la concentration en O reste sensiblement identique pour les deux latitudes sauf à basse altitude (100–200 *km*).

Les résultats à la latitude de Tromsø (au-dessus du cercle polaire arctique) pour chaque condition de flux sont similaires en intensité et en forme à ceux présentés pour Grenoble, comme le montre la Fig. 2-4. La position des maxima de productions est inchangée et les écarts entre les deux courbes ne sont surtout marqués qu'à partir de 300 *km* pour N_2^+ et O_2^+ où ils atteignent en moyenne 25%. Pour O^{++} en revanche, l'écart maximal est situé au pic de production vers 150 *km* : le nombre d'ions O^{++} est alors plus bas à Tromsø qu'à Grenoble. Ces courbes sont donc parfaitement en accord avec les variations des concentrations des espèces neutres.

Une analyse plus fine, présentée sur la Fig. 2-4 (droite), montre que le comportement comparé des productions ioniques entre Grenoble et Tromsø est similaire pour les deux espèces moléculaires N_2^+ et O_2^+ . Les différences peuvent monter dans leur cas jusqu'à 50 % pour une activité solaire faible à très haute altitude (> 400 *km*), ou descendre à seulement 1 % à 150 *km*. Pour $f_{10.7} = 243$, les écarts, relativement constants sur une très grande plage d'altitudes (300–800 *km*), plafonnent à 18 % vers 350 *km*.

Le comportement s'inverse dans le cas de O^{++} : pour une activité faible, on observe deux pics successifs, l'un de 28 % à 100 *km*, l'autre de 20 % à 150 *km*, puis une décroissance constante entre 200 et 750 *km*, jusqu'à ce que les contributions soient identiques pour chaque latitude. Dans le cas d'un flux élevé ($f_{10.7} = 243$), les écarts s'homogénéisent autour de 16 % sur la plage 150–300 *km* puis diminuent régulièrement jusqu'à 800 *km*.

- **Sensibilité à l'angle solaire zénithal**

Etude générale

Les résultats sont beaucoup plus sensibles à la variation de l'angle solaire zénithal —autrement dit de l'épaisseur d'atmosphère traversée par le rayonnement solaire— qu'aux deux paramètres étudiés plus haut. Nous choisissons ici les données obtenues pour Grenoble, avec $\chi = 90^\circ$, c'est-à-dire une incidence rasante du flux solaire, et $\chi = 30,47^\circ$, à la latitude de Grenoble. Le paramètre modifié intervient dans l'expression de l'absorption du flux solaire caractérisée par la fonction de Chapman (*cf.* § 1.2.1) et, secondairement, dans les concentrations des espèces neutres (variations diurnes).

Plus l'angle solaire zénithal est élevé, plus l'absorption du flux solaire l'est aussi (on traverse plus de couches d'atmosphère), ce qui implique une production moindre à une altitude donnée et un déplacement des pics vers de plus hautes altitudes : le flux pénètre moins l'atmosphère, et on a donc une diminution de la quantité d'ions à basse altitude (100 km).

Ces remarques sont bien vérifiées sur la Fig. 2-5, sauf dans le cas de H^+ , et on note essentiellement une sensibilité plus importante du modèle aux altitudes les plus basses. A partir de 400 km, les productions tendent à devenir identiques en forme et en magnitude d'un angle solaire sur l'autre.

Pour les ions H^+ (jaune), on note bien un déplacement du pic vers le haut (de 200 à 350 km d'altitude), mais l'intensité globale, elle, varie peu sur la gamme 100–800 km, alors que tous les autres ions accusent des diminutions importantes pour $\chi = 90^\circ$. Cette singularité est encore ici due à la forme du profil de concentration de H dont la variation diurne reste faible en comparaison des autres espèces (HEDIN, 1983).

Pour les autres espèces ioniques, la caractéristique la plus évidente est la modification de la position des pics qui s'élèvent en altitude jusqu'à typiquement 250 km d'altitude pour $\chi = 90^\circ$. Le maximum de production de photoélectrons est prédit par le modèle vers 230 km avec une intensité de $1,5 \times 10^2 \text{ cm}^{-3} \text{ s}^{-1}$, à comparer au maximum de $3 \times 10^3 \text{ cm}^{-3} \text{ s}^{-1}$ à 150 km pour $\chi = 30,47^\circ$.

Le maximum à plus basse altitude est aussi déplacé (de 100 km [$\chi = 30,47^\circ$] à 130 km [$\chi = 90^\circ$]) et son intensité, du même ordre de grandeur que le pic à 150 km pour un χ faible, devient nettement plus petite pour $\chi = 90^\circ$ ($\sim 5 \times 10^1 \text{ cm}^{-3} \text{ s}^{-1}$). Remarquons qu'à 100 km et pour un grand χ , aucun photoélectron n'est produit selon les résultats du modèle.

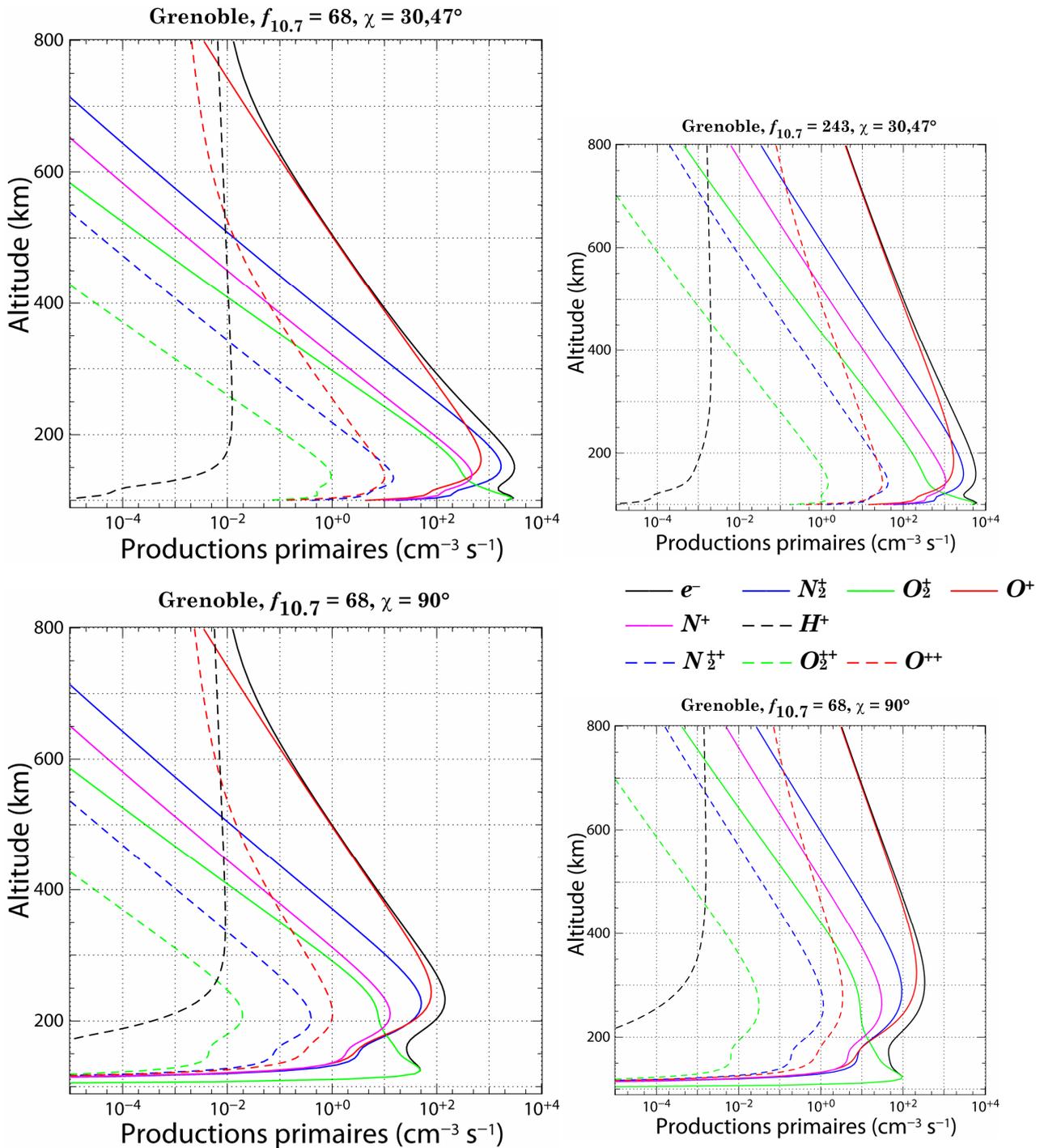


Fig. 2-5 – Productions comparées des principales espèces ioniques à la latitude de Grenoble, pour deux χ différents : $\chi = 30,47^\circ$ (haut) et $\chi = 90^\circ$ (bas). Les courbes respectives à flux fort sont présentées à droite. Une nette diminution des productions est observée pour $\chi = 90^\circ$ ainsi qu'une remontée très nette des maxima de productions vers 250 km d'altitude, d'autant plus accentuée que l'activité solaire est élevée.

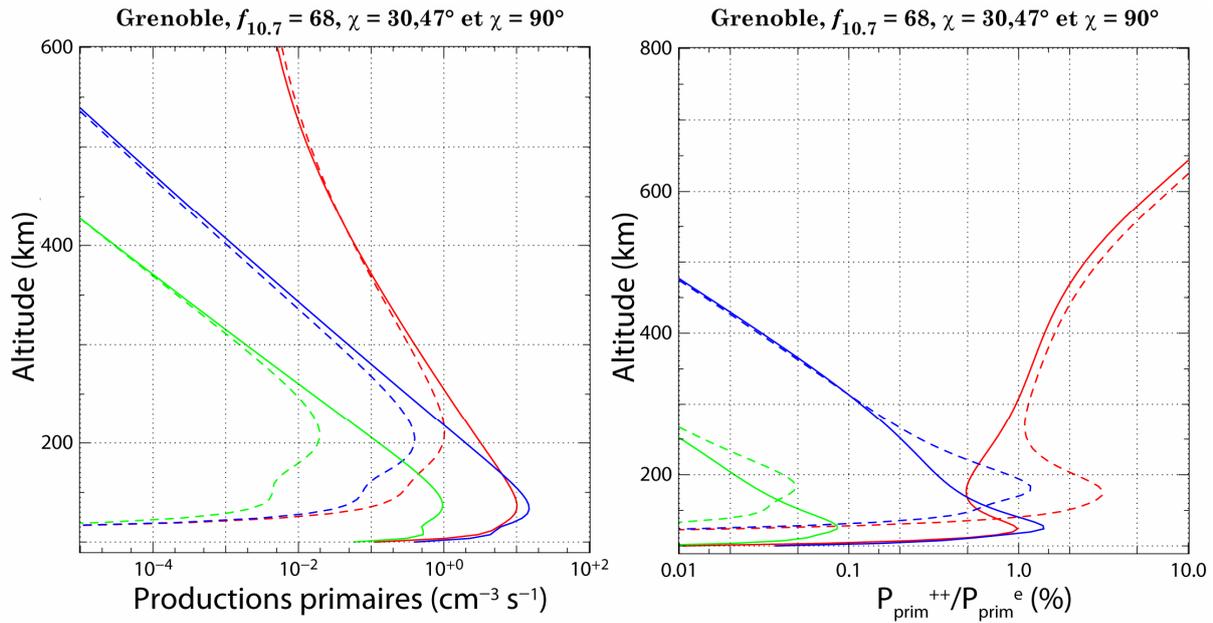


Fig. 2-6 – Gauche, productions entre 100 et 600 km des ions N_2^+ (bleu), O_2^+ (vert) et O^+ (rouge) pour $\chi = 30,47^\circ$ (traits pleins) et $\chi = 90^\circ$ (tirets). Droite, rapport exprimés en % des productions de ces ions à la production totale électronique en fonction de l'altitude en km.

En période d'activité solaire importante, la position des pics tend ainsi à s'élever jusqu'à 300 km pour la production électronique, et en moyenne à 270 km pour les espèces moléculaires et atomiques : on voit donc que plus l'activité est intense, plus cette caractéristique s'accroît, et ce, de manière générale pour toutes les espèces ioniques.

La contribution des ions doublement chargés est, elle aussi, modifiée de façon importante (Fig. 2-6), et ce d'autant plus qu'on se place à plus basse altitude (< 300 km). On voit notamment que pour un soleil rasant, la contribution de O^{++} devient aussi importante en nombre que celle de N_2^+ ($\sim 1 \text{ cm}^{-3} \text{ s}^{-1}$), et correspond par la même à une contribution à la création de photoélectrons quasiment identique à celle de N_2^+ , soit un peu plus de 2 % calculée au pic (Fig. 2-6, gauche). La part de chaque dication moléculaire dans la production de photoélectrons reste en outre la même en amplitude, de l'ordre de 0.5 à 1 % en dessous de 300 km.

On observe également que les pics de productions et les maxima des courbes $P_{i^{++}}/P_{e^{tot}}$ ne coïncident pas parfaitement pour $\chi = 90^\circ$: les pics de production d'ions doublement chargés contribuent donc relativement moins à la photoproduction électronique totale dans le cas d'un angle solaire grand ($\chi = 90^\circ$) que dans celui d'un angle petit ($\chi = 30,47^\circ$).

Enfin, on constate que les pics de contribution pour $\chi = 90^\circ$ sont plus larges, ce qui indique qu'à ces angles solaires, les mécanismes de photoionisation à basse altitude sont légèrement plus efficaces pour produire des photoélectrons qu'à des angles solaires faibles.

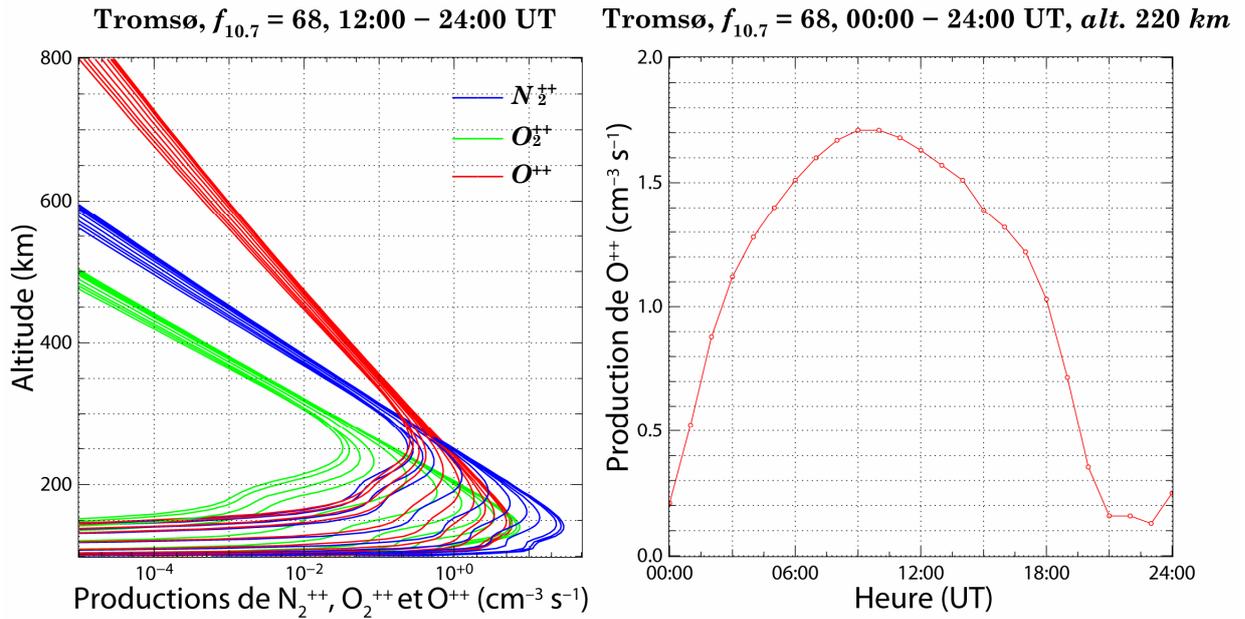


Fig. 2-7 – Gauche : productions primaires des ions N_2^+ (bleu), O_2^+ (vert) et O^+ (rouge) en fonction de l'altitude et pour $56,3^\circ < \chi < 95,4^\circ$. Les angles les plus faibles correspondent aux courbes dont les productions sont maximales au pic, les angles les plus grands aux courbes dont les productions sont minimales. Droite : tracé des productions ($\text{cm}^{-3} \text{s}^{-1}$) à l'altitude de 220 km de l'ion O^+ en fonction des heures de la journée (UT) à la latitude de Tromsø. On obtient une courbe caractéristique en cloche, non symétrique et centrée sur 10:30 UT.

Évolution sur une journée

On peut tracer l'évolution de la production des ions N_2^+ , O_2^+ et O^+ en fonction de l'altitude de 00:00 UT à 24:00 UT²³ pour une latitude donnée. Nous avons choisi ici les coordonnées de Tromsø, et nous présentons les résultats de la modélisation des productions pour une journée complète à flux faible ($f_{10.7} = 68$). Les heures de la journée peuvent être converties directement en angles solaires zénithaux²⁴ : pour Tromsø, les angles solaires zénithaux s'échelonnent ainsi du minimum $\chi = 54,7^\circ$ (10:45 UT) au maximum $\chi = 95,4^\circ$ (22:45 UT).

La Fig. 2-7 présente les productions des trois dications calculées dans cette étude, qu'on fait varier en fonction de χ . Comme nous l'avons vu au paragraphe précédent, les pics ont tendance à remonter avec χ en moyenne de plus de 100 km en s'élargissant considérablement, avec une diminution du taux de production de deux ordres de grandeur pour N_2^+ et O_2^+ , de seulement un ordre de grandeur pour O^+ .

²³ *Universal Time*. À la latitude de Tromsø, l'heure locale LT est, pour le 120^e jour de l'année retenu ici : $LT = UT + 01:15$.

²⁴ Grâce à la formule : $\cos \chi = \cos \lambda \cos \delta - \cos \lambda \sin \delta \sin \varphi$ où λ est la latitude du lieu, δ la déclinaison, et φ l'angle horaire.

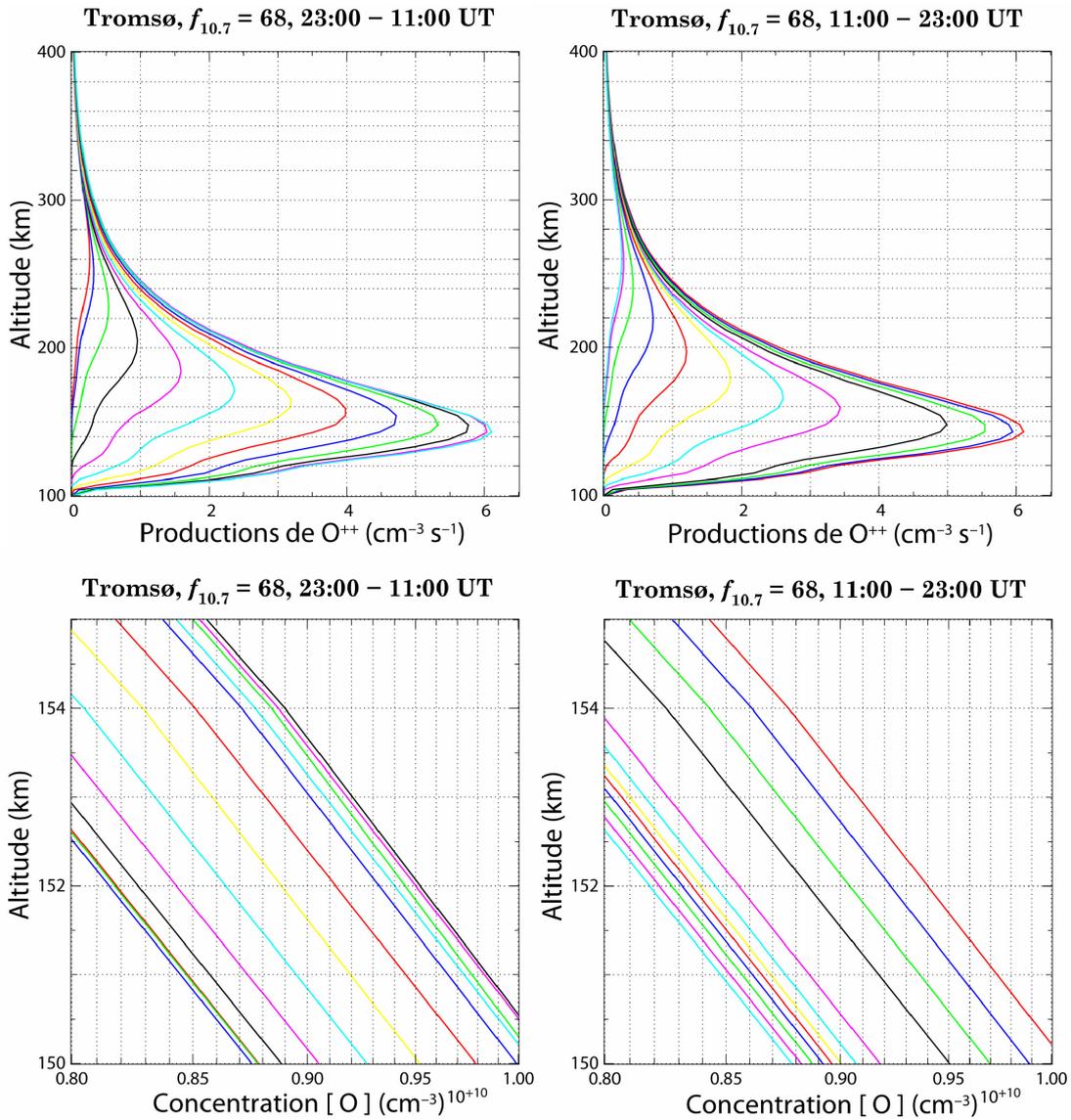
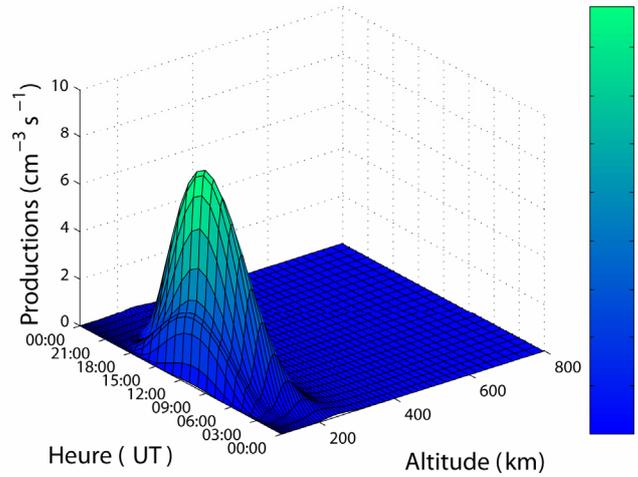


Fig. 2-8 – *Haut* : Taux de productions de l'ion atomique O^{++} dans la gamme 100–400 km à la latitude de Tromsø pour différentes heures de la journée. *Haut, gauche* : de 23:00 UT à 11:00 UT, correspondant aux productions heure par heure de gauche à droite. *Haut, droite* : de 11:00 UT à 23:00 UT de droite à gauche. *Bas* : Concentrations (cm^{-3}) en O entre 150 km et 155 km d'altitude pour les mêmes périodes de temps.

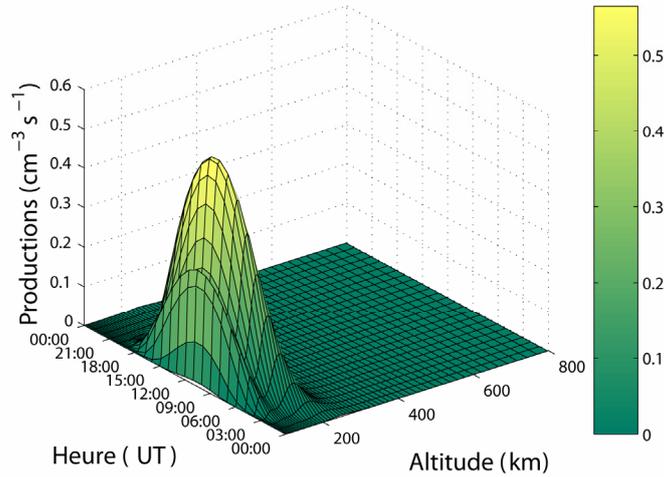
Dans la gamme 300–500 km, les productions tendent à devenir identiques quel que soit l'angle solaire zénithal (ou de manière équivalente, l'heure locale) considéré. À haute altitude, le phénomène de diminution avec l'angle diminue en amplitude voire s'inverse, et les productions pour des angles zénithaux élevés peuvent devenir plus importantes que celles calculées pour des χ faibles.

Nous avons également tracé les courbes (Fig. 2-8) représentant les taux de production de l'ion O^{++} , ici en échelle linéaire, pour deux demi-journées complètes entre 23:00 UT et 11:00 UT (gauche) et 11:00 UT et 23:00 UT (droite).

$N_{2\text{ phot}}^{++}$ – Tromsø, $f_{10.7} = 68$, $t = 00:00 - 24:00$ UT



$O_{2\text{ phot}}^{++}$ – Tromsø, $f_{10.7} = 68$, $t = 00:00 - 24:00$ UT



O_{phot}^{++} – Tromsø, $f_{10.7} = 68$, $t = 00:00 - 24:00$ UT

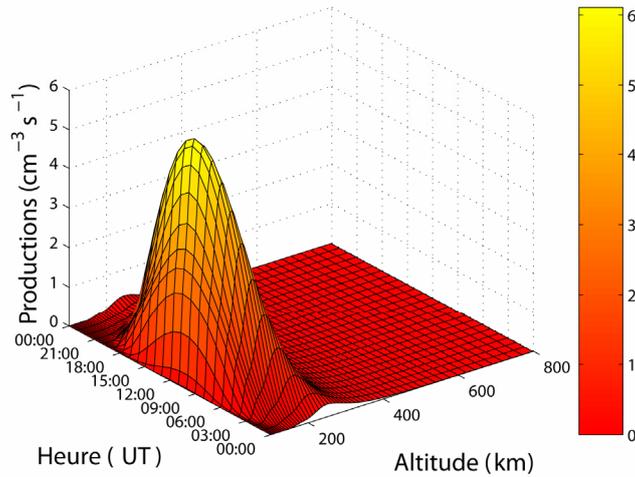


Fig. 2-9 – Profils hebdomadaires des productions primaires (photo-production) des trois espèces doublement chargées à Tromsø, $f_{10.7} = 68$.

Pour chaque heure incrémentée de 23:00 à 11:00 UT, on utilise le code de couleurs consécutif : rouge, bleu, vert, noir, magenta, cyan, jaune, et ainsi de suite.

Ces deux courbes devraient être symétriques, puisque les tranches horaires utilisées le sont par rapport à 12:00 LT (ou \sim 11:00 UT). Or on voit que les courbes ne sont pas superposables bien que le pas horaire choisi soit constant. Cela signifie que le comportement des productions en fonction de l'angle solaire zénithal n'est pas le même et que le matin n'est pas équivalent à l'après-midi pour la production ionique. Les variations d'atmosphère neutre en fonction de l'angle solaire zénithal sont à l'origine de ces caractéristiques, comme le montre, pour l'atome d'oxygène O , la Fig. 2-8, bas.

Sur la Fig. 2-8 (bas), les concentrations tracées correspondent aux valeurs maximales de la courbe de production vers 150 km.

On voit clairement que les différences d'amplitude des pics entre les courbes observées pour les productions de O^{++} sont corrélées aux variations de concentration de l'oxygène atomique (voir par exemple les deux tracés de droite) : une « compression » des concentrations pour les angles solaires faibles (*i.e.* pour les concentrations plus petites) est relevée, qui se répercute linéairement sur les productions ioniques, proportionnelles comme on l'a vu aux concentrations des espèces neutres associées. On a tracé sur la Fig. 2-7, les valeurs des maxima de productions en fonction de l'heure en temps universel : la courbe obtenue est périodique de période $t = 24$ heures, centrée sur environ 10:30 UT (soit approximativement 12:00 TL) et possède une certaine dissymétrie.

La variation périodique journalière de l'intensité des pics, dite *variation diurne*, est associée à la période de rotation de la Terre autour de son axe.

La légère dissymétrie constatée peut quant à elle être attribuée à la différence d'éclairement entre le jour et la nuit qui induit des variations de température (marées thermiques provoquant notamment une dilatation du gaz thermosphérique) et donc des variations de composition chimique.

Pour finir ce paragraphe, nous avons dessiné sur la Fig. 2-9 l'évolution temporelle en échelle linéaire des profils des productions primaires au cours d'une journée entière à Tromsø pour les trois dications N_2^+ , O_2^+ et O^{++} . Les principales caractéristiques décrites précédemment sont aisément visibles : pics de production à basse altitude, et dont l'altitude diminue au fur et à mesure que le soleil est bas sur l'horizon, productions au pic du même ordre de grandeur entre N_2^+ et O^{++} , facteur 10 d'écart pour O_2^+ . Le pic de production de O^{++} est également plus large en altitude que pour les dications moléculaires.

2.2 Étude comparée des productions primaires et secondaires

2.2.1 Caractéristiques générales

- **Paramètres de modélisation**

Comme pour les productions primaires, nous prenons comme paramètres d'évolution ceux listés dans le Tableau 3 pour des conditions thermosphériques correspondant à un jour de printemps (120^e jour).

- **Incertitudes**

A la suite du paragraphe 2.1.2 sur la production primaire, l'incertitude sur la production secondaire de N_2^+ , O_2^+ et O^{++} est évaluée à plus de 100% en moyenne, tout en sachant que le modèle final testé est correct à mieux que 5% sur les productions ioniques.

2.2.2 Forme générale des productions électroniques

- **Etude générale**

La Fig. 2-10 (*gauche*) représente les profils typiques de productions données par le modèle TRANSCAR (*ici*, à Grenoble, $f_{10.7} = 243$, $\chi = 63,51^\circ$), avec la contribution respective des photoélectrons et des électrons secondaires. La production électronique totale est tracée en noir.

Nous voyons que par photoionisation de l'atmosphère, le flux EUV est responsable d'une composante ionisée à deux maxima dans la production totale, l'un à 110 km atteignant près de $4,8 \times 10^3 e^- cm^{-3} s^{-1}$, l'autre plus en altitude vers 175 km à $4,4 \times 10^3 e^- cm^{-3} s^{-1}$. Les électrons secondaires sont minoritaires au-dessus de 200 km, où ils ne contribuent qu'à hauteur de 20% en moyenne à la production totale. En revanche, à plus basse altitude, la production secondaire augmente rapidement en regard de la production primaire pour atteindre 70% du total à 120 km, c'est-à-dire au pic de production électronique.

Pourquoi les productions secondaires deviennent-elles alors plus importantes que les productions primaires ? Une réponse nous est donnée en se remémorant que la quantité d'atmosphère traversée joue un rôle prédominant dans l'absorption du rayonnement, facteur d'autant plus marqué que l'on considère une altitude plus basse ou un angle solaire zénithal plus rasant.

Lorsqu'ils se propagent dans l'atmosphère, les photons d'énergie extrême (typiquement en dessous de 300 Å) sont absorbés moins vite que les photons d'énergie moyenne (entre 300 et 800 Å) comme on peut le voir sur la Fig. 2-12.

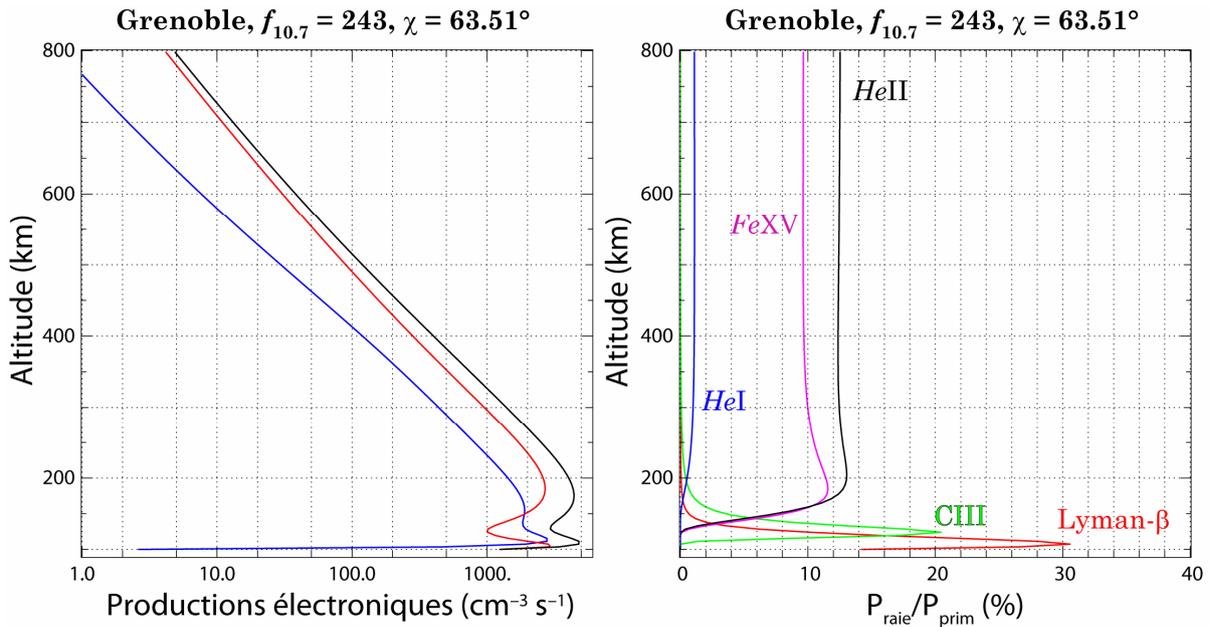


Fig. 2-10 – Profils des productions électroniques totale (noir), primaire (rouge) et secondaire (bleu, gauche) et contribution des principales raies solaires à la création d'électrons primaires (droite) : en rouge est la contribution de la raie Lyman β , en bleu HeI, en noir HeII, en vert CIII et en magenta FeXV.

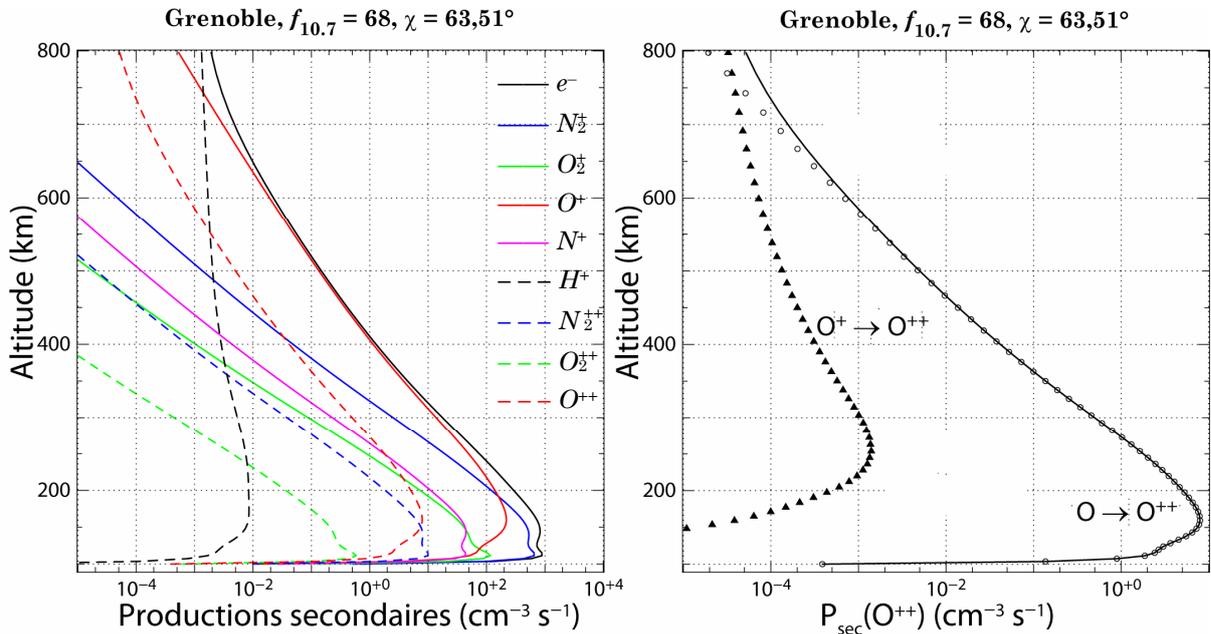


Fig. 2-11 – Gauche : taux de productions secondaires des principales espèces à Grenoble, pour un flux faible et un angle solaire zénithal de $63,51^\circ$. En noir est tracée la production électronique secondaire totale, i.e. la somme des productions ioniques pondérée par le nombre d'électrons produits. Droite : détail des contributions des deux sources de production secondaire de O^{++} . La simple ionisation de O^+ est schématisée par des triangles noirs, la double ionisation de O par des cercles évidés. La production secondaire totale de O^{++} est représentée en trait plein : c'est la somme de ces deux contributions.

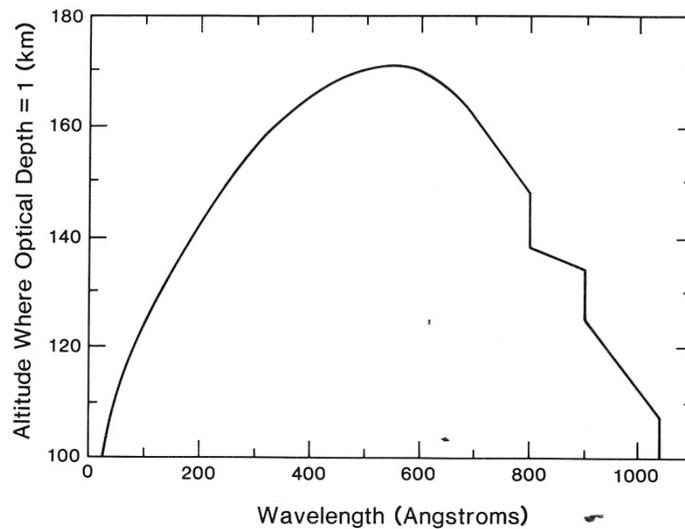


Fig. 2-12 – Longueur d'onde des photons solaires (\AA) en fonction de l'altitude à laquelle la profondeur optique $\tau = 1$, i.e. la profondeur effective de pénétration d'un photon. On voit que les photons entre 300 et 800 \AA sont absorbés plus vite que ceux des énergies extrêmes, ce que l'on doit bien entendu rapprocher des valeurs des sections efficaces d'absorption (d'après Kivelson & Russell, 1995).

Or ce sont ces derniers qui contribuent le moins à la création d'électrons suffisamment énergétiques pour ioniser à leur tour les constituants neutres, à l'origine des électrons secondaires. Il y a moins d'électrons primaires créés, mais les électrons primaires de haute énergie sont moins sensibles à cette diminution. Relativement aux électrons primaires, les électrons secondaires sont ainsi favorisés à basse altitude et les productions deviennent plus importantes.

Une étude plus fine de l'impact des principales raies solaires discrètes dans la photoproduction primaire est présentée sur la Fig. 2-10 (*droite*). Vers 100 km, la raie *HI* Lyman β (1025,72 \AA) est responsable à elle seule de 30% de la production électronique primaire. A 140 km, c'est la raie *CIII* (977,02 \AA) qui joue le plus grand rôle, avec 20% au pic de la production primaire. Au delà de 200 km, les raies plus énergétiques comme *FeXV* (284,15 \AA), *HeII* (303,78 \AA) et *HeI* (584,33 \AA) contribuent à hauteur d'environ 10% du total de photoélectrons créés pour les deux premières et 1% pour *HeI*. Le continuum très énergétique entre 25 et 250 \AA est alors responsable du reste de la production ionique.

La Fig. 2-11 (*gauche*) présente les productions secondaires des principales espèces ioniques : N_2^+ (vert), O_2^+ (bleu), O^+ (rouge), N^+ (magenta), H^+ (jaune), $N_2^{\frac{1}{2}+}$ (tirets verts), $O_2^{\frac{1}{2}+}$ (tirets bleus), O^{++} (tirets rouges) à Grenoble pour un angle solaire zénithal de $63,51^\circ$ et des conditions solaires calmes ($f_{10.7} = 68$). Le pic de production de O^{++} se situe vers 160 km d'altitude alors que ceux de $O_2^{\frac{1}{2}+}$ et $N_2^{\frac{1}{2}+}$ se situent vers 110 km.

On peut remarquer que les productions secondaires ont un comportement relatif similaire lorsque l'on fait varier les paramètres. A basse altitude (130 km), et parmi les trois dications considérés, c'est la production de N_2^+ qui est la plus importante ($\sim 8 \text{ ions cm}^{-3} \text{ s}^{-1}$ au pic) devant O^{++} ($\sim 5 \text{ ions cm}^{-3} \text{ s}^{-1}$). La production de O_2^+ est à toutes les altitudes minoritaire par rapport aux deux autres d'un facteur supérieur à 10 ($\sim 0,3 \text{ ions cm}^{-3} \text{ s}^{-1}$ au pic). Dès 250 km d'altitude, c'est O^{++} qui devient à son tour prépondérant, car l'atome O ainsi que l'ion O^+ pour les ions deviennent majoritaires au-dessus de 300 km.

• **Détail des productions secondaires pour l'ion O^{++}**

A la suite de cette remarque, examinons de manière plus précise le comportement des deux sources de production secondaire de O^{++} , à savoir d'un côté la double ionisation de l'atome O et de l'autre l'ionisation simple de O^+ (Fig. 2-11). Comme on l'a déjà vu dans le cas des productions primaires, l'ionisation double de O est le mécanisme prépondérant à basse altitude, même si cet effet est ici moins marqué. En effet, l'ionisation de O^+ ne devient comparable qu'au dessus de 650 km ; il l'était lors de notre étude des productions primaires dès 400 km.

L'évolution générale des profils s'explique d'ailleurs par le fait que les courbes de production suivent les concentrations des espèces neutre O et ionique O^+ correspondantes, avec une décroissance de $[O^+]$ nettement plus lente que $[O]$ à mesure que l'altitude augmente. Ces mécanismes sont bien sûr modulés par les sections efficaces d'ionisation de O^+ , en moyenne 10 fois plus importantes que celles de double ionisation de O . Les pics principaux de section efficace sont situés tous deux dans les mêmes gammes d'énergie, soit 70–150 eV, ce qui explique le faible effet de l'ionisation simple de O^+ sur la production de O^{++} même à haute altitude.

La sensibilité du modèle aux conditions d'activité solaire, à la latitude et à l'angle solaire zénithal a été testée dans les paragraphes suivants.

2.2.3 Sensibilité aux paramètres géophysiques

• **Activité solaire**

Fig. 2-13 : Profils des productions primaires (traits pleins) et secondaires (tirets) des trois dications (N_2^+ en bleu, O_2^+ en vert et O^{++} en rouge) à Grenoble, en période d'activité solaire faible (haut) et forte (bas). A droite sont tracés les rapports des productions secondaires aux productions totales pour les 6 espèces N_2^+ (cercles bleus), O_2^+ (cercles verts), O^+ (cercles rouges), N_2^+ , O_2^+ et O^{++} .

De manière générale, les productions secondaires pour toutes les espèces — qu'elles soient simplement ou doublement chargées — sont très inférieures aux productions primaires (elles atteignent de 5% à 30% seulement des productions totales au-dessus de 150 km pour une activité forte, au-dessus de 300 km pour une activité faible), excepté pour O^{++} . Pour N_2^+ et O_2^+ , les productions secondaires

possèdent un pic à basse altitude (qui varie de 110 km à 120 km selon les espèces) et deviennent alors prépondérantes. Un regain de production secondaire de N_2^{++} et de O^{++} est observé à 250 km, particulièrement marqué pour O^{++} .

A contrario des autres espèces, les productions primaires ne deviennent majoritaires pour O^{++} qu'au-delà de 375 km ($f_{10.7} = 68$) voire 550 km d'altitude ($f_{10.7} = 243$).

Le comportement singulier des profils de productions de O^{++} peut s'expliquer par deux effets. Le premier est d'origine probabiliste, comme conséquence directe de la forme des sections efficaces. En effet, les sections efficaces d'ionisation double par impact électronique sont dans le cas de O^{++} plus importantes que celles de photoionisation correspondantes, et ce dans un rapport de l'ordre de 25 au pic ($5,4 \times 10^{-18}$ contre $0,2 \times 10^{-18} \text{ cm}^2$ à 70 eV), d'où une création de photoélectrons secondaires particulièrement efficace en dessous de cette altitude (translation de la courbe des secondaires par rapport à celle des primaires). Le deuxième effet, intervenant dans une moindre mesure, est d'origine énergétique, et prend en compte la donnée de l'altitude à laquelle se déposent les principales raies discrètes du spectre solaire EUV (voir Fig. 2-10).

Pour pouvoir ioniser O deux fois, il faut avoir à disposition des photons d'énergie supérieure à 48,74 eV (soit $\lambda < 254 \text{ \AA}$). Or on voit que les raies prépondérantes pour la photoionisation au-delà de 150 km sont toutes au-dessous de ce seuil en énergie ; elles ne participeront donc plus aussi efficacement à la production primaire de O^{++} , alors que, dans le même temps, la production secondaire, qui dépend des raies les plus énergétiques, sera moins affectée.

Les pics de production entre cations simplement chargés et dications correspondants ne se situent pas à la même altitude, puisque les seuils et sections efficaces d'ionisation sont différents.

Les comportements des profils selon l'activité solaire sont sensiblement différents, surtout à plus haute altitude. En période de grande activité, les pics de N_2^+ , O_2^+ et O^{++} secondaires se situent respectivement vers 120 km, 115 km et 180 km, accusant une petite augmentation d'altitude de 10 km en moyenne par rapport à leur valeur en période calme. Les valeurs maximales sont multipliées par 2 à 3 environ, ce qui suit l'évolution des productions primaires. A plus haute altitude, et à cause originellement de l'accroissement de la concentration des neutres (et dans une moindre mesure de la concentration de O^+) corrélé à l'intensification du flux solaire $f_{10.7}$, les productions d'ionisation augmentent fortement avec $f_{10.7}$ à une altitude donnée (d'un facteur 50 à 100), la pente moyenne devenant plus grande pour une activité solaire plus forte.

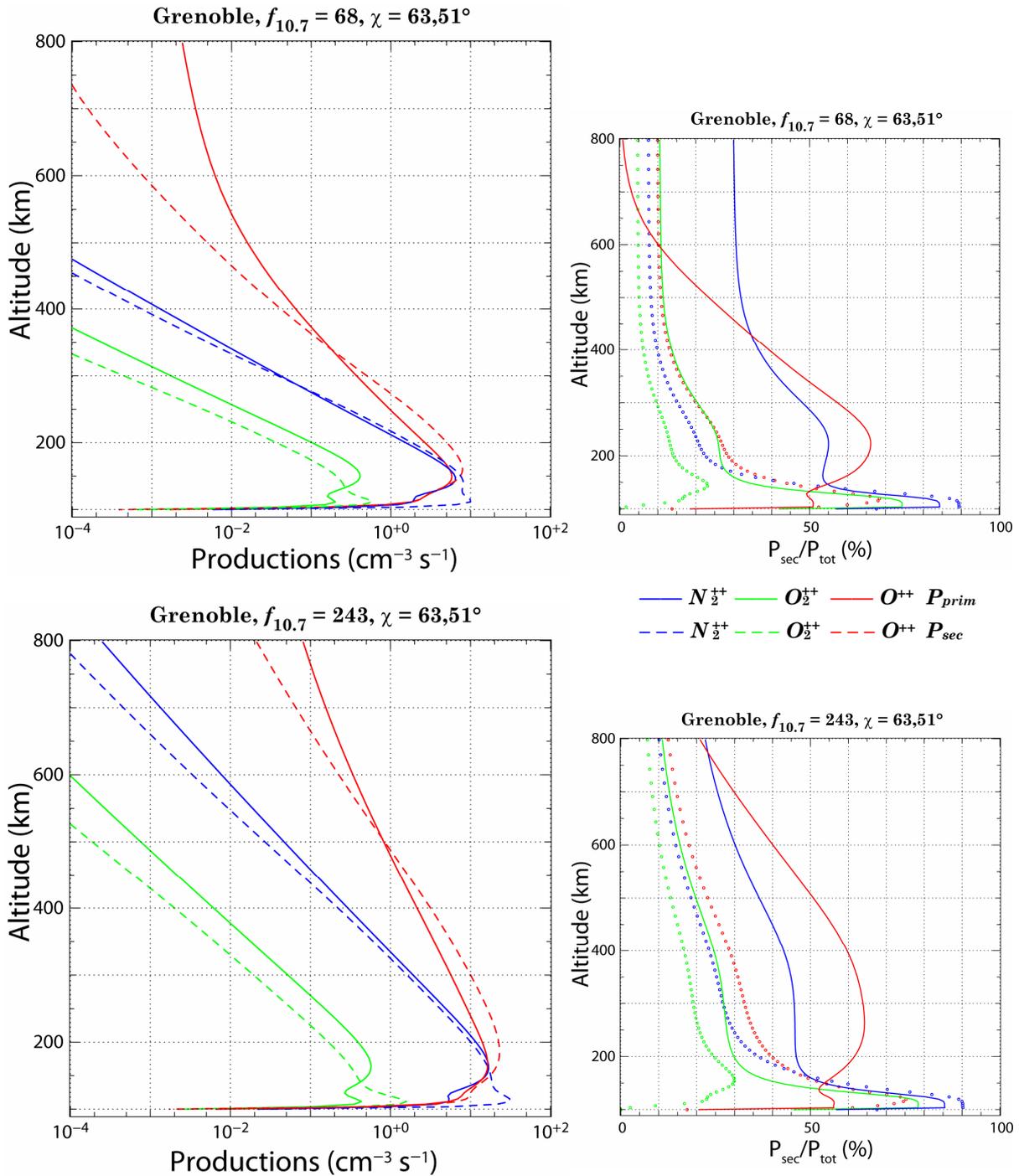


Fig. 2-13 – Taux de productions primaires (traits pleins) et secondaires (tirets) des ions N_2^+ , O_2^+ et O^+ à la latitude de Grenoble, pour $\chi = 63,51^\circ$ (gauche). A droite, rapport des productions secondaires à la production totale (Prim + Sec) pour les six espèces N_2^+ (cercles bleus), O_2^+ (cercles verts), O^+ (cercles rouges), N_2^+ , O_2^+ et O^+ (traits pleins bleus, verts et rouges).

Contrairement à l'évolution de la production primaire de O^{++} , la part que prend l'ionisation simple de O^+ dans la création d'ions O^{++} secondaires reste marginale et c'est la double photoionisation de O qui est le mécanisme physique privilégié quelle que soit l'altitude considérée.

- **Effet de la latitude**

Intéressons-nous maintenant à la sensibilité des résultats à la position géographique. Nous nous plaçons pour un χ fixé à $63,51^\circ$, à la latitude géographique de Tromsø (au-dessus du cercle polaire arctique, dans l'ovale auroral), et nous comparons ces données à celles du paragraphe précédent.

Au changement de coordonnées géographiques correspond uniquement un changement de concentrations des espèces neutres — qui dictent donc le comportement des courbes de production —, le flux EUV restant bien entendu le même compte tenu de l'orientation fixe du soleil par rapport à l'horizon (représentée par l'angle solaire zénithal).

Comme expliqué précédemment, à la latitude de Tromsø, les concentrations en N_2 et O_2 sont plus élevées qu'à Grenoble en moyenne de 5%, alors que la concentration en O reste sensiblement identique pour les deux latitudes sauf à basse altitude (100–200 km) où elle est inférieure à celle donnée à Grenoble.

Les résultats à la latitude de Tromsø pour chaque condition de flux sont similaires en intensité et en forme à ceux présentés pour Grenoble. Les différences sont relativement faibles comme le montre la Fig. 2-14. La position des maxima de production est inchangée et les écarts entre les deux courbes ne sont marqués qu'à partir de 300 km pour N_2^+ et O_2^+ .

Pour O^{++} en revanche, l'écart maximal est situé au pic de production vers 150 km : le nombre d'ions O^{++} est alors plus bas à Tromsø qu'à Grenoble, des évolutions en accord avec les variations des concentrations des espèces neutres.

On voit sur la Fig. 2-14 (droite) que l'écart relatif entre Grenoble et Tromsø évolue de la même façon pour les deux espèces N_2^+ et O_2^+ . Les différences peuvent monter dans leur cas jusqu'à 50% à haute altitude pour une activité faible. O^{++} se particularise à nouveau en suivant une évolution à contre courant, puisqu'à haute altitude, les différences se chiffrent à moins de 1%. Pour une activité forte, les différences tendent à s'homogénéiser sur une très grande plage d'altitudes (400–800 km), ne dépassant pas 15% pour N_2^+ et O_2^+ , atteignant au maximum 25% pour O^{++} .

- **Effet de l'angle solaire zénithal**

La variation des productions secondaires est étudiée dans la suite à trois angles solaires zénithaux, puis sur toute une journée.

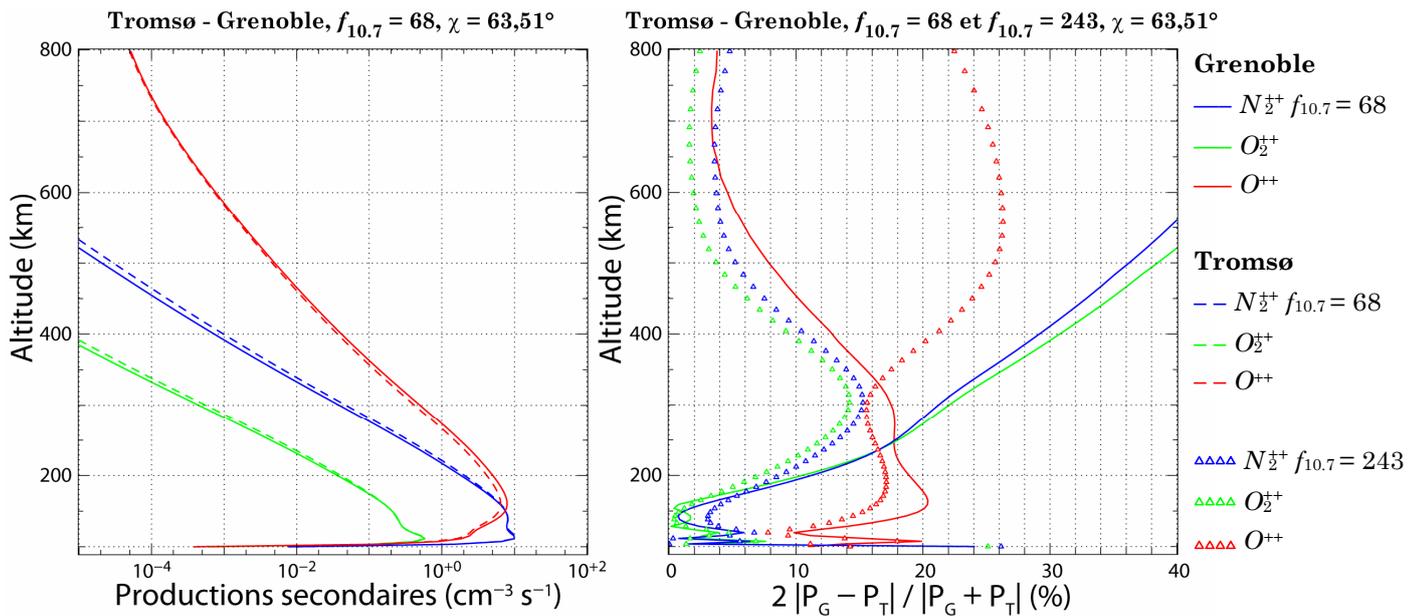


Fig. 2-14 – Comparaison des productions des trois dications au-dessus de Grenoble (traits pleins) et Tromsø (tirets). A droite est représenté en % le rapport relatif des productions ioniques entre Grenoble et Tromsø pour deux activités solaires ($f_{10.7} = 68$ en traits pleins et $f_{10.7} = 243$ en triangles).

Etude générale

Contrairement aux conclusions précédentes, les résultats sont très sensibles à la variation de l'angle solaire zénithal, qui prend en compte à la fois l'épaisseur d'atmosphère traversée par les photons primaires et la variation jour-nuit des concentrations (variation diurne). Ici, les profils à Grenoble pour $f_{10.7} = 68$ ont été calculés à $\chi = 30,47^\circ$ et $\chi = 90^\circ$, ce que présente la Fig. 2-15.

Plus l'angle solaire zénithal est élevé, plus l'absorption du flux solaire est grande (on traverse plus de couches d'atmosphère), ce qui implique une production moindre à une altitude donnée et un déplacement des pics vers de plus hautes altitudes : le flux solaire primaire, et par voie de conséquence les photoélectrons primaires, pénètrent moins l'atmosphère, et on a donc une diminution importante de la quantité d'ions secondaires produits à basse altitude (100–150 km). Ainsi, à 100 km, aucune ionisation secondaire n'existe selon les résultats du modèle (comme d'ailleurs nous l'avons remarqué pour les productions primaires).

Ce raisonnement qualitatif rend bien compte des différents profils calculés pour toutes les espèces ionisées excepté H^+ qui reste relativement constant tout en jouant un rôle prépondérant dans la production électronique totale dès 700 km : dans ce cas, la différence vient du profil de concentrations de H qui a une variation diurne faible en comparaison des autres espèces neutres.

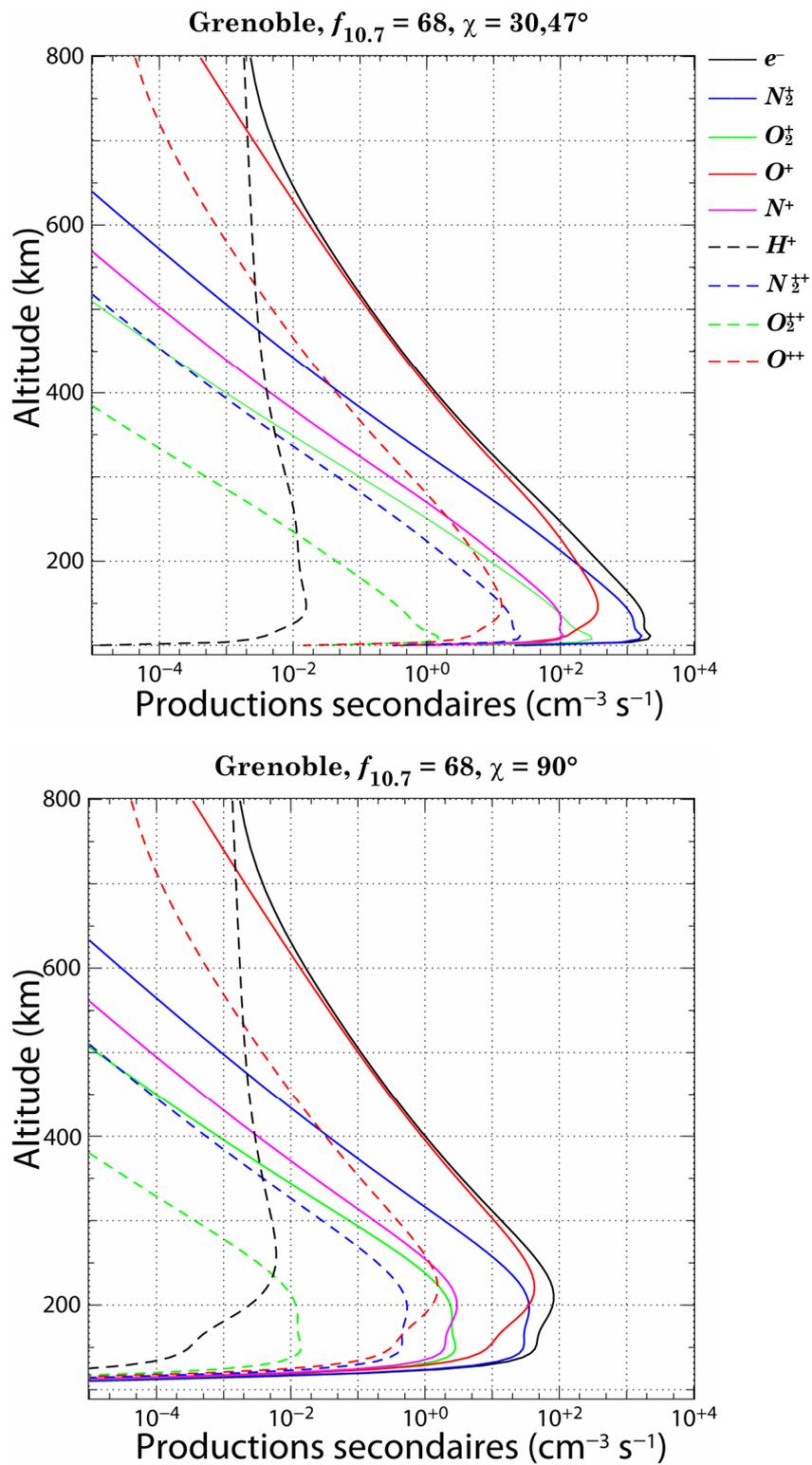


Fig. 2-15 – Productions secondaires des principales espèces ioniques à la latitude de Grenoble, pour deux χ différents : $\chi = 30,47^\circ$ (haut) et $\chi = 90^\circ$ (bas).

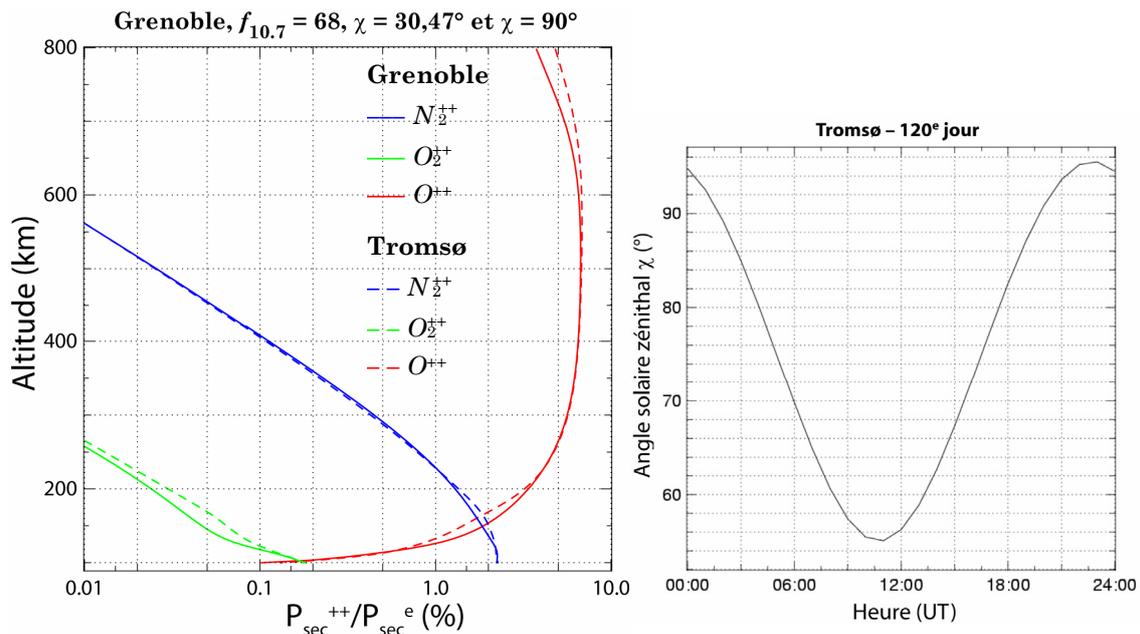


Fig. 2-16 – Gauche : profil des rapports exprimés en % des productions électroniques ayant pour origine l'ionisation double à la production totale des électrons secondaires. Les rapports pour les ions N_2^{++} (bleu), O_2^{++} (vert) et O^{++} (rouge) sont calculés à Tromsø (tirets) et à Grenoble (traits pleins). Droite : angle solaire zénithal en fonction de l'heure (UT). Le soleil est au zénith à 10:45 UT.

En faisant varier l'angle solaire zénithal, la modification de la position des pics est très nette, et l'on passe selon les espèces de 150 km environ pour $\chi = 30,47^\circ$ à presque 250 km d'altitude pour $\chi = 90^\circ$. En fait, le pic de basse altitude devient plus petit en intensité que celui de plus haute altitude, ce dernier étant alors responsable de la forme globale plus évasée des profils de productions.

Pour quantifier la part des ions doublement chargés dans la production électronique secondaire totale, on a tracé sur la Fig. 2-16 les pourcentages correspondant au rapport des productions secondaires via l'ionisation double de N_2 , O_2 et O . On voit que la production ionique d'ions secondaires O^{++} atteint rapidement un plateau à 8% du total sur la plage 300-600 km et que cette variation dépend très faiblement de l'angle solaire zénithal (Tromsø en tirets, Grenoble en traits pleins). Les productions de N_2^{++} et O_2^{++} sont minoritaires par rapport à O^{++} dans la production électronique secondaire, avec un pic à basse altitude calculé respectivement à 3% et à moins de 0,2% de la production totale. Pour ces deux espèces, la part qu'elles prennent dans la création d'électrons secondaires diminue avec l'altitude pour devenir rigoureusement négligeable dès 450 km pour N_2^{++} , dès 150 km pour O_2^{++} . Ici encore les variations du rapport P_i/P_e sont faibles.

Etude sur une journée

On peut tracer l'évolution de la production secondaire des ions N_2^{++} , O_2^{++} et O^{++} en fonction de l'altitude de 00:00 UT à 24:00 UT pour une latitude donnée.

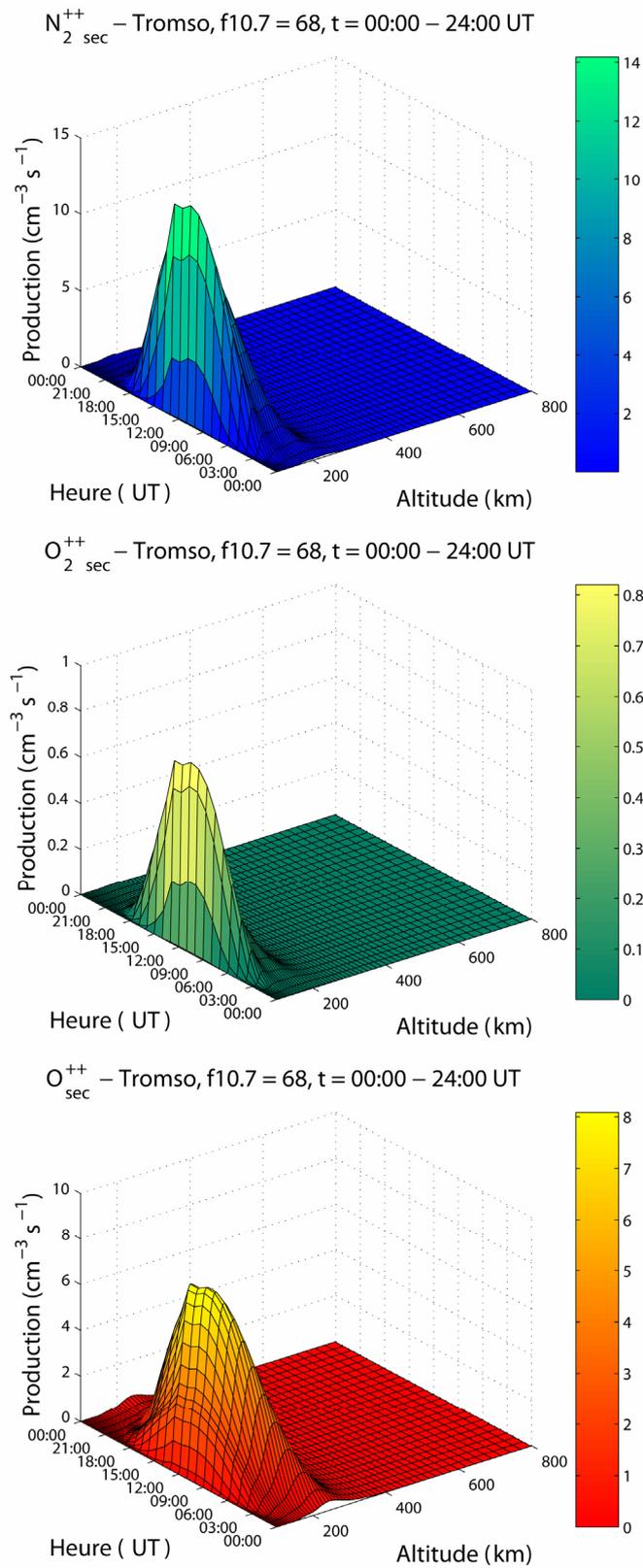


Fig. 2-17 – Profils des productions secondaires en $\text{cm}^{-3} \text{s}^{-1}$ des trois ions doublement chargés sur une journée à Tromsø, $f_{10.7} = 68$.

Nous avons choisi ici les coordonnées de Tromsø, et nous présentons les résultats de la modélisation des productions pour une journée complète à flux faible ($f_{10.7} = 68$) dans un dessin synoptique temps-altitude (Fig. 2-17). Les heures de la journée peuvent être converties directement en angles solaires zénithaux : pour Tromsø, les angles solaires zénithaux s'échelonnent ainsi du minimum $\chi = 54,7^\circ$ (10:45 UT) au maximum $\chi = 95,4^\circ$ (22:45 UT). On observe bien la remontée des pics avec l'angle solaire zénithal ainsi qu'une intensification de la production lorsque le soleil est au zénith local (10:45 UT comme montré sur la Fig. 2-16, droite).

On remarque aussi que les courbes ne sont pas symétriques par rapport à 12:00 LT et que les productions diminuent plus vite le soir qu'elles n'augmentent le matin : cet effet est dû à l'évolution diurne de l'atmosphère neutre déjà évoquée pour les productions primaires. Les pics sont très localisés et abrupts, centrés sur des altitudes très basses pour les ions moléculaires : 120 km pour N_2^+ , 115 km pour O_2^+ .

Le comportement global change significativement pour O^{++} dont l'intensité du pic de production est comparable à celle de N_2^+ , soit de l'ordre de 10 ions produits, tout en étant plus étalé (maximum à 200 km). La grande valeur des sections efficaces de double ionisation par impact électronique par rapport aux productions primaires explique cette différence.

La production de O_2^+ reste en retrait d'un ordre de grandeur au moins par rapport aux deux autres espèces avec moins d'un ion produit par double ionisation de O_2 .

2.3 Récapitulons (I)

2.3.1 Productions primaires

Les productions primaires des ions doublement chargés sont de manière générale inférieures d'un facteur 10 aux productions primaires des ions simplement chargés correspondantes et suivent une évolution similaire. Deux pics sont visibles, l'un à basse altitude, l'autre vers 200 km, plus ou moins marqués en fonction de l'angle solaire zénithal : si leur position est peu sensible à la latitude, les pics principaux de N_2^+ , O_2^+ et O^{++} varient en position de 150 km pour $\chi = 30,47^\circ$ à plus de 200 km pour $\chi = 90^\circ$. La contribution de ces trois ions à la production de photo-électrons primaires est évaluée à moins de 2 % sur la plage 100–800 km. Remarquons qu'à haute altitude, la contribution des ions O^+ et O^{++} devient prépondérante par rapport aux autres espèces.

2.3.2 Productions secondaires

Quant aux productions secondaires, elles suivent rigoureusement pour les trois dications les profils de productions des ions simplement chargés en étant inférieures

d'un facteur pouvant varier de 30 à 200 selon les espèces considérées. Un pic très étroit à basse altitude ($< 125 \text{ km}$) est visible, qui correspond à l'altitude à laquelle les productions secondaires deviennent plus importantes que les productions primaires. Le comportement de O^{++} est significativement différent des deux autres ions moléculaires et contribue à hauteur de 8% en moyenne à la création d'électrons secondaires. Les trois ions cumulés constituent environ 10% de la production électronique secondaire totale entre 100 et 800 km d'altitude.

2.3.3 Productions totales

Un profil typique des productions totales des ions doublement chargés, *i.e.* la somme des productions primaires et secondaires, est présenté sur la Fig. 2-18 ci-dessous. Sur la plage d'altitudes considérées, elles se composent en moyenne de 50 % de productions secondaires pour O^{++} , 15 % pour N_2^{++} , et moins de 5 % pour O_2^{++} . Deux pics sont visibles pour N_2^{++} (l'un à 120 km , l'autre à 150 km), celui de basse altitude étant à peine décelable pour les deux autres ions. Le pic de basse altitude dans la production totale vient de la production secondaire, celui de plus haute altitude étant dû à la production primaire. Pour O^{++} , le changement de régime de décroissance à partir de 500 km d'altitude est dû à l'importance grandissante à ces altitudes de la production $O^+ + h\nu \rightarrow O^{++} + e^-$ par rapport à la double photoionisation.

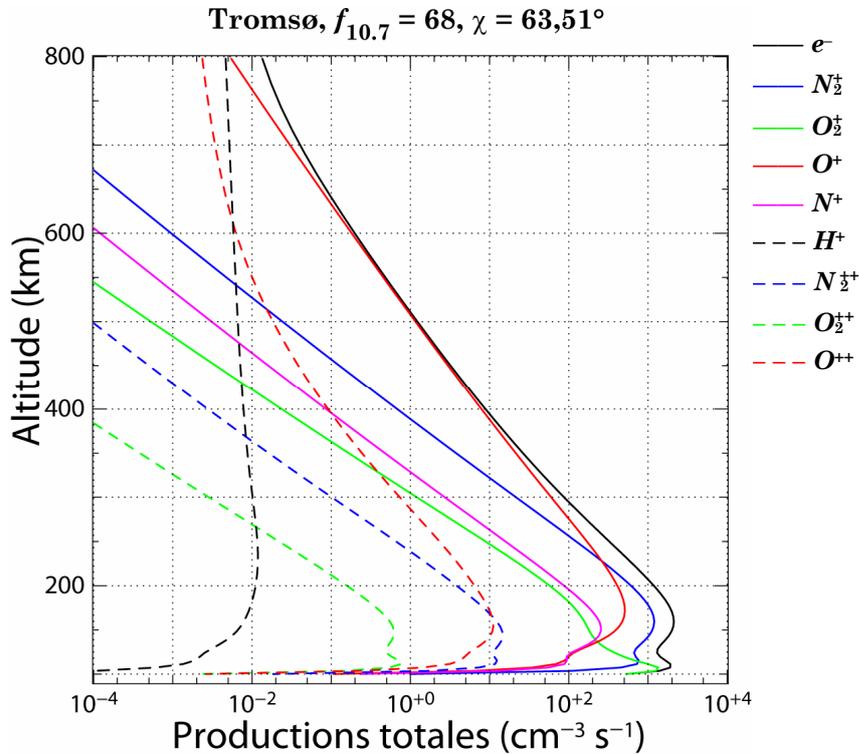


Fig. 2-18 – Productions totales (primaires + secondaires) des six ions N_2^+ , O_2^+ , O^+ , N^+ , H^+ , N_2^{++} (tirets bleus), O_2^{++} (tirets verts) et O^{++} (tirets rouges) et productions totales toutes espèces confondues (noir).

Pour comparaison, on a tracé les différentes productions des autres ions ainsi que la production électronique totale résultante.

2.4 Modèle photochimique et concentrations

Une recherche bibliographique approfondie a été menée parallèlement afin de déterminer les constantes de vitesse des réactions chimiques impliquées dans la perte et éventuellement la production des espèces doublement chargées. La validité des constantes de réaction est également discutée.

Nous calculons ensuite les concentrations en supposant l'équilibre photochimique, hypothèse suffisante pour la validation du modèle, que l'on discutera au vu des uniques mesures disponibles dans la littérature faites lors des vols du satellite *Atmosphere Explorer* au cours de l'année 1974, il y a tout juste 30 ans.

2.4.1 Réactions chimiques

Une première remarque s'impose : les dications moléculaires n'ont été jusqu'à présent que très peu étudiés, contrairement à l'ion O^{++} qui a bénéficié des recherches en astrophysique sur les nébuleuses planétaires et les AGN où le rayonnement de cette espèce est bien identifié et sert notamment de traceur des concentrations électroniques et des températures du milieu (*cf.* par exemple Menzel & Haller, 1941 ou Mathis & Liu, 1999).

Seules trois réactions de pertes impliquant $O_{\frac{1}{2}}^{++}$ ont été recensées dans la littérature (Chatterjee & Johnsen, 1989), et deux seulement pour $N_{\frac{1}{2}}^{++}$ (qui n'est pour Prasad & Furman [1975] qu'une hypothèse de travail et non une mesure en laboratoire) incluant la recombinaison électronique avec $N_{\frac{1}{2}}^{++}$ dont le coefficient a été récemment déterminé (Seiersen *et al.*, 2003).

Dans cette optique, une collaboration avec une équipe de physico-chimistes du Laboratoire de Chimie Physique d'Orsay (Roland Thissen, Odile Dutuit, Christian Alcaraz et Héloïse Soldi-Lose) a été mise en place et nous avons donc pu obtenir pour l'ion $N_{\frac{1}{2}}^{++}$ les constantes expérimentales des réactions $N_{\frac{1}{2}}^{++} + N_2/O_2$.

Ces mesures ont été menées grâce au dispositif expérimental CERISES (acronyme pour *Collisions Et Réactions d'Ions Sélectionnés par des Électrons de Seuil*), dont les grandes lignes sont décrites dans l'article de Nicolas *et al.* (2002). Ce dispositif a été développé dans les années 1980 afin de produire spécifiquement des ions dans des états électroniques et vibrationnels donnés : à partir d'une source d'émission synchrotron, et en éliminant les électrons chauds porteurs d'énergie cinétique, on peut ainsi sélectionner des ions en énergie interne dans l'état voulu, extraire l'ion d'intérêt pour le guider vers la cellule de collision, et enfin détecter l'ion produit ainsi que les produits de la réaction.

Tableau 4 – Réactions prises en compte dans la littérature pour chaque ion doublement chargé.

Espèce	Réactions	Constantes de vitesse ($cm^3 s^{-1}$)	Référence
$N_{\frac{1}{2}}^{2+}$	$N_{\frac{1}{2}}^{2+} + N_2 \xrightarrow{k_1} \text{produits}$	$k_1 = 2,70 \times 10^{-9}$	Mesures LCP
	$N_{\frac{1}{2}}^{2+} + O_2 \xrightarrow{k_2} \text{produits}$	$k_2 = 2,79 \times 10^{-9}$ $k_2 = 2,3 \times 10^{-11}$	Mesures LCP Prasad & Furman (1975)
	$N_{\frac{1}{2}}^{2+} + e^- \xrightarrow{k_3} N_{\frac{1}{2}} + h\nu$	$k_3 = 5,8 \times 10^{-7} \left(\frac{300}{T[K]}\right)^{0,5}$	Seiersen <i>et al.</i> (2003)
$O_{\frac{1}{2}}^{2+}$	$O_{\frac{1}{2}}^{2+} + N_2 \xrightarrow{k_4} O_{\frac{1}{2}} + N_{\frac{1}{2}}$	$k_4 = 2,0 \times 10^{-9}$ $k_4 = (2,0 \pm 0,5) \times 10^{-9}$ à 0,04 eV	Glosik <i>et al.</i> (1978) Chatterjee & Johnsen(1989)
	$O_{\frac{1}{2}}^{2+} + O_2 \xrightarrow{k_5} O_{\frac{1}{2}} + O_{\frac{1}{2}}$	$k_5 = (2,0 \pm 0,5) \times 10^{-9}$ à 0,04 eV	Chatterjee & Johnsen(1989)
	$O_{\frac{1}{2}}^{2+} + NO \rightarrow \text{produits}$	$(1,8 \pm 0,1) \times 10^{-9}$ à 0,125 eV	Chatterjee & Johnsen(1989)
O^{++}	$O^{++} + N_2 \xrightarrow{k_6} \text{produits}$	$k_6 = 2,9 \times 10^{-10}$ $k_6 = (1,3 \pm 0,3) \times 10^{-9}$ à 300 K $k_6 = (1,3 \pm 0,3) \times 10^{-9}$ $k_6 = (1,6 \pm 0,6) \times 10^{-9}$ $k_6 = 1,4 \times 10^{-9}$ $k_6 = (3,15 \pm 0,26) \times 10^{-9}$ à 2×10^4 K	Breig <i>et al.</i> (1977) Johnsen & Biondi (1978) Victor & Constantinides (1979) Howorka <i>et al.</i> (1979) Geiss & Young (1981) Fang & Kwong (1995)
	$O^{++} + O_2 \xrightarrow{k_7} \text{produits}$	$k_6 = (1,5 \pm 0,3) \times 10^{-9}$ à 300 K $k_6 = (1,5 \pm 0,3) \times 10^{-9}$ $k_6 = (1,7 \pm 0,7) \times 10^{-9}$	Johnsen & Biondi (1978) Victor & Constantinides (1979) Howorka <i>et al.</i> (1979)
	$O^{++} + O \xrightarrow{k_8} O^+ + O^+$	$k_8 = 8,4 - 1,0 \times 10^{-12}$ $k_8 \sim 2 \times 10^{-11}$ $k_8 \sim 10^{-11}$ $k_8 = 1,5 \times 10^{-10}$ (in the case of Venus) $k_8 = 6,6 \times 10^{-11}$ $k_8 = 2,0 \times 10^{-10}$ (in the case of Io) $k_8 = (1,06 \pm 0,40) \times 10^{-10}$	Breig <i>et al.</i> (1977) Avakyan (1978a) Victor & Constantinides (1979) Fox & Victor (1981) Breig <i>et al.</i> (1982) Brown <i>et al.</i> (1983) <i>Cette étude</i>
	$O^{++} + e^- \xrightarrow{k_9} O^+ + h\nu$	$k_9 = 2,1 \times 10^{-11} Z^2 T^{-0,5}$ où $Z = 2$	Nakada & Singer (1968)
	$O^{++} + N_2 \xrightarrow{k_{10}} O + N_{\frac{1}{2}}^{2+}$	$k_{10} \sim 6,8 \times 10^{-11}$	Avakyan (1978a)
	$O^{++} + O_2 \xrightarrow{k_{11}} O + O_{\frac{1}{2}}^{2+}$	$k_{11} \sim 2 \times 10^{-11}$	Avakyan (1978a)

Les sections efficaces obtenues peuvent alors être converties en constantes de vitesse. Une description précise des possibilités de CERISES se trouve dans Dutuit *et al.* (1996) et Alcaraz *et al.* (2004) ; l'application aux ions CO_2^{++} est présentée dans Franceschi *et al.* (2003).

Deux réactions de production de N_2^+ et O_2^+ à partir de O^{++} ont par ailleurs été mentionnées en 1978 par Avakyan (1978a), avec une estimation très grossière des constantes de réaction, pertes prises en compte dans les produits des réactions générales.

En ce qui concerne O^{++} , pas moins de quatre réactions de perte sont disponibles pour une dizaine d'articles différents. Un consensus existe aux incertitudes près sur les valeurs des constantes de vitesse résumées dans le Tableau 4, sauf pour la réaction $O^{++} + O$ qui n'a jamais fait l'objet de mesures précises et dont la constante de vitesse a seulement été inférée par Breig *et al.* (1977, 1982).

Plusieurs auteurs ont pointé par ailleurs la nécessité d'effectuer des mesures en laboratoire (Johnsen & Biondi, 1978 ; Smith & Adams, 1979).

Dans le modèle, les coefficients adoptés sont généralement les plus récents, ou les plus complets : pour N_2^+ , les dernières mesures du LCP, pour O_2^+ , les coefficients de Chatterjee & Johnsen (1989), et pour O^{++} , ceux de Howorka *et al.* (1979) sur les collisions avec les molécules N_2 et O_2 . La réaction $O^{++} + O$ étant toujours l'objet de spéculations, plusieurs essais ont été menés, pour aboutir à une valeur $k_8 = (1,06 \pm 0,40) \times 10^{-10} \text{ cm}^3 \text{ s}^{-1}$.

En plus de ces pertes chimiques, le modèle doit prendre en compte la dissociation spontanée des molécules N_2^+ et O_2^+ , information donnée par leur durée de vie respective. La durée de vie naturelle de l'état fondamental de N_2^+ a été mesurée égale à $\tau_d = 3 \text{ s}$ (Mathur *et al.*, 1995). Aucune donnée n'est pour l'instant disponible dans la littérature pour O_2^+ : la durée de vie est limitée par l'effet tunnel à travers la barrière de potentiel pour la dissociation. On a fait l'hypothèse que la durée de vie est égale à celle de CO_2^+ , soit 4 s (Mathur *et al.*, 1995), car les puits de potentiel sont approximativement de même profondeur et qu'elle est déterminée dans les deux cas par l'effet tunnel avec un atome d'oxygène O . Lorsqu'il est produit dans des états excités électroniques ou vibrationnels, on sait que la durée de vie du dication décroît rapidement (Cox *et al.*, 2003). Ainsi une autre inconnue reste l'abondance du dication dans son état fondamental par rapport aux sections efficaces mesurées (références dans le Tableau 4). Comme la durée de vie décroît avec l'énergie interne, et comme les spectromètres utilisés pour les mesures sont sensibles aux espèces stables dans la gamme des $10 \mu\text{s}$ ou plus, on peut estimer que l'abondance du dication dans son état fondamental se situe au maximum à environ 75%. Nous avons donc utilisé les sections efficaces référencées dans la littérature en faisant cette dernière approximation, ce qui indique que les concentrations en O_2^+ et N_2^+ calculées constituent dans notre cas une limite haute.

Finalement, le taux de perte totale L_i (en s^{-1}) pour le dication i s'écrit alors tout simplement :

$$L_i = \sum_l k_l n_l + \tau_i^{-1} \quad (50)$$

où k_l sont les constantes de vitesse ($cm^3 s^{-1}$) pour les réactions des ions avec les neutres l (N_2 , O_2 et O) de concentration n_l (cm^{-3}). τ_i est la durée de vie moyenne de dissociation des molécules N_2^+ et O_2^+ ; elle n'intervient bien entendu pas pour O^+ .

2.4.2 Calcul des concentrations ioniques entre 100 et 500 km

Le calcul se fait grâce à l'équation de continuité qui correspond au premier moment de la fonction de distribution de Boltzmann. En exprimant la *conservation de la matière* dans un volume donné, on écrit :

$$\frac{dn_i}{dt} + \text{div } n_i v_i = P_i - n_i L_i \quad (51)$$

où n_i est la concentration de l'espèce i doublement chargée (cm^{-3}), v_i sa vitesse de diffusion (essentiellement verticale dans notre cas, en $cm s^{-1}$), P_i la production totale d'ions i ($cm^{-3} s^{-1}$), et L_i les taux de perte de l'espèce i exprimés en s^{-1} . Dans le modèle, la vitesse de diffusion est supposée nulle. Pour une prise en compte totale dans le modèle, cet effet nécessiterait de résoudre les différents moments de l'équation de Boltzmann comme cela est déjà fait dans TRANSCAR pour les ions simplement chargés. On sait que cet effet, dû aux gradients de concentration et de température de l'atmosphère neutre, à la gravité et aux effets de champ électrique, n'est surtout sensible qu'à haute altitude (altitude qui dépend des espèces considérées).

Notre approximation donnant $\frac{dn_i}{dt} = P_i - n_i L_i$ et même $n_i = \frac{P_i}{L_i}$ est ainsi bonne tant que l'on se situe à basse et moyenne altitudes, soit typiquement entre 100 et 500 km. Afin de tester l'hypothèse d'équilibre photochimique, et comme la vitesse de diffusion des ions n'est pas connue, nous avons introduit une vitesse de diffusion ionique typique, puis plus importante et nous avons pu constater qu'aucun changement notable n'était visible en dessous de 500 km. De plus, considérer qu'il y a équilibre n'est pas une hypothèse étonnante en elle-même puisque, dans notre cas, nous nous plaçons dans une situation où le code tend vers un équilibre numérique au cours d'un nombre suffisant d'itérations correspondant à un « run » de 6 heures. Avant le résultat final de l'exécution du programme, les données n'ont pas de signification physique absolue.

Finalement, le profil de concentration $n_i(z)$ d'un dication i s'écrit :

$$n_i(z) = \frac{P_{i,prim}(z) + P_{i,sec}(z)}{\sum_{kl} k_{kl} n_l(z) + \tau_d^{-1}} \quad (52)$$

A haute altitude cependant, il faut bien garder à l'esprit que les concentrations modélisées par l'équation simplifiée (sans vitesse de diffusion) continueront à croître indéfiniment, et ce de manière totalement non physique pour des ions aussi lourds. Le problème ne se prête pas à une résolution analytique simple de l'équation de continuité dépendante du temps puisque les conditions initiales ne sont pas déterminées. Néanmoins, pour les hautes altitudes, il serait souhaitable en complément de ce travail d'inclure la variation en temps dans l'équation en supposant les variables P_i et L_i constantes sur le pas de temps d'intégration, ce que corroborent les durées de vie de chaque espèce doublement chargée, au maximum de 4 secondes, plus probablement moins. Les concentrations des ions moléculaires n'ayant jamais été mesurées jusqu'à présent, cette évolution temporelle reste toutefois une difficulté difficilement surmontable à courte échéance.

2.4.3 Validation du modèle

- **Une comparaison pour O^{++} avec AE-C**

Les seules mesures disponibles sont les mesures le 12 août 1974 du satellite Atmosphere Explorer C (spectromètre de masse MIMS) rapportées par Breig *et al.* (1982). Pour le vol référencé 2758, le satellite est en phase de descente dans l'atmosphère : au cours de cette descente, l'angle solaire zénithal varie de $78,53^\circ$ à 80° , mais aussi et surtout les coordonnées géographiques changent.

A une altitude donnée correspondent donc un angle solaire zénithal et un couple latitude/longitude donnés. Nous nous plaçons à un indice décimétrique moyen $f_{10.7}$ de 98, soit une activité faible et un indice magnétique A_p égal à 16.

Trois "runs" successifs ont été ainsi effectués, prenant en compte ces différents paramètres, afin d'obtenir une enveloppe de variation de la concentration en O^{++} donnée par le modèle (Fig. 2-19). Les coordonnées $(-31.55^\circ, 54.64^\circ)$ correspondent par exemple au moment où le satellite se situe à une altitude de 377 km et "voit" un angle solaire zénithal χ de $78,53^\circ$.

De manière générale, une très bonne concordance est trouvée entre 100 et 500 km , et reste très acceptable (différence de l'ordre de 15 %) jusqu'à environ 600 km .

Remarquons que les trois courbes à latitude/longitude données commencent à diverger significativement les unes des autres vers 300 km où productions et pertes n'évoluent plus dans les mêmes ordres de grandeur. On voit que dans notre étude, l'hypothèse stationnaire la plus simple suffit à la bonne modélisation de la

concentration, sachant que ce que nous voulons obtenir est un ordre de grandeur pour valider le modèle : c'est l'argumentaire du *rasoir d'Occam* où l'hypothèse la plus simple est retenue au profit de la plus compliquée, ce qui, selon le franciscain Guillaume d'Occam (fin XIII^e-1349), est un gage de véracité à défaut d'être une preuve absolue.

- **La question de l'atmosphère neutre**

Le gros problème de la comparaison des mesures avec le satellite AE-C vient avant tout du fait qu'à chaque point de mesure sur l'orbite du satellite correspond la variation des paramètres géophysiques. Comme nous devons attendre l'équilibre des concentrations et de TRANSCAR, en le faisant évoluer dans le temps (typiquement 6 heures) depuis un état donné jusqu'à l'état final voulu, utiliser MSIS pour estimer les concentrations des espèces neutres est évidemment l'hypothèse la plus pertinente.

Néanmoins, il est justifié de se poser la question des paramètres d'entrée de TRANSCAR et notamment des conditions d'atmosphère neutre. Quelle peut être ainsi la différence dans les concentrations finales en ions entre le modèle MSIS-90 d'atmosphère neutre et les mesures in situ du satellite AE-C ? N'est-il pas plus approprié de prendre ces dernières dans le modèle d'ionosphère afin de calculer les concentrations des ions ?

Quand on compare les données (Fig. 2-19), on voit que MSIS donne un excellent accord à basse altitude pour N_2 et O , alors que plus on s'élève, plus le modèle surestime les valeurs des concentrations, jusqu'à un facteur 2 à 500 km.

Quand on impose les conditions de AE-C dans TRANSCAR, nous obtenons la courbe suivante (Fig. 2-20 gauche, rouge) que l'on a tracée pour comparaison avec les résultats, pour les mêmes coefficients, du calcul issu du modèle MSIS. En ne considérant que l'équilibre photochimique, un excellent accord est d'emblée obtenu, même si nous perdons en partie la structure du pic de basse altitude, déjà décelable sur les mesures. Le coefficient k_8 utilisé ici est $1,25 \times 10^{-10} \text{ cm}^3 \text{ s}^{-1}$.

On note aussi que les résultats sortis des données de MSIS sont parfaitement en accord, et ce jusqu'à 550 km, alors qu'une notable divergence des résultats est visible dès 475 km, dans le cas d'une atmosphère neutre donnée par AE-C.

On voit ainsi que TRANSCAR couplé à MSIS donne de meilleurs résultats, ce qui n'est pas surprenant puisque, dans ce cas, la mise à l'équilibre de toutes les concentrations des espèces neutres et ionisées est effectuée de manière totalement cohérente dans le programme fluide.

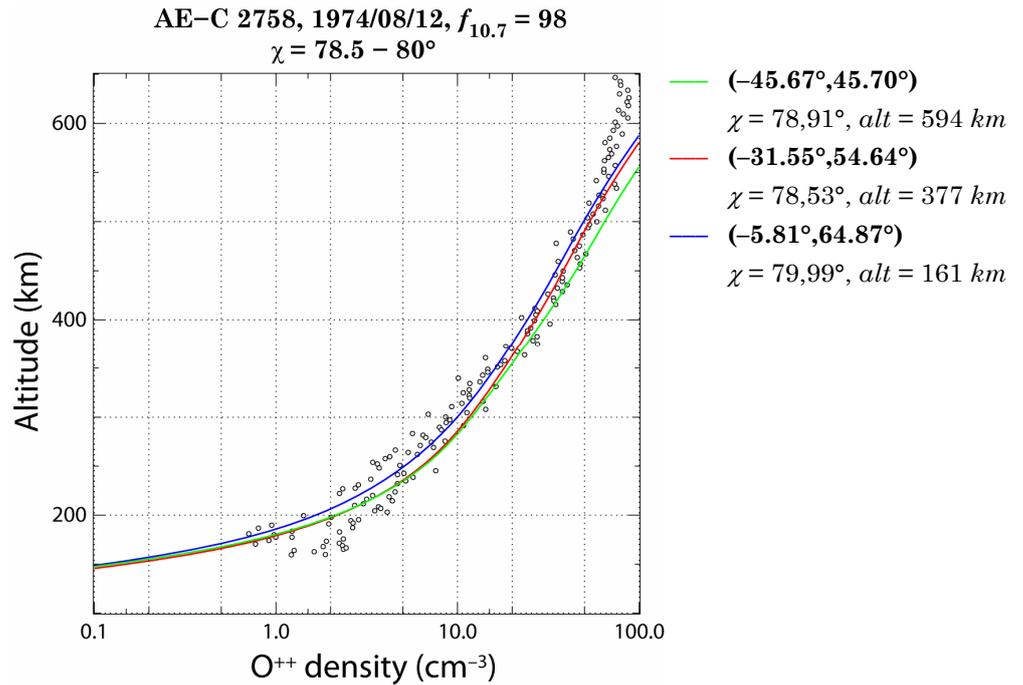


Fig. 2-19 – Comparaison des concentrations en O^{++} mesurées par le satellite AE-C (cercles) et calculées par le modèle (trait plein) dans l'hypothèse stationnaire. La courbe verte est pour un couple de coordonnées latitude/longitude de $(-45.67^\circ, 45.70^\circ)$, la courbe rouge pour le couple $(-31.55^\circ, 54.64^\circ)$ et la courbe bleue pour $(-5.81^\circ, 64.87^\circ)$.

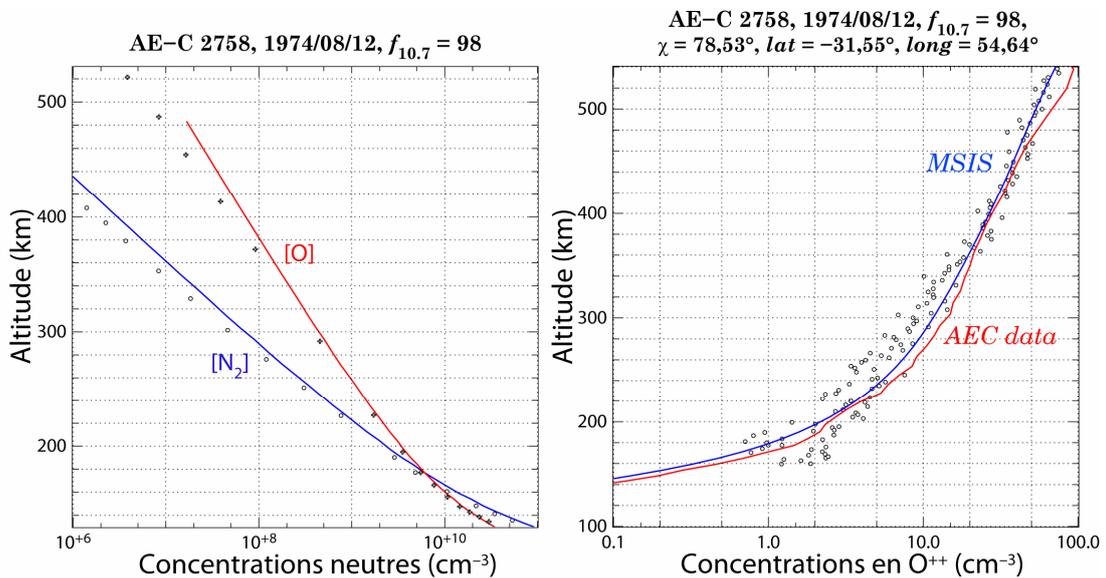


Fig. 2-20 – Gauche : comparaison des concentrations en N_2 (bleu) et O (rouge) entre les données expérimentales de AE-C (points de mesure) et les sorties du modèle MSIS (trait plein), pour le 12/08/1974, $\chi = 78,53^\circ$. A droite, comparaison entre les entrées du modèle pour le calcul des concentrations en O^{++} . Le calcul est effectué soit avec les données de AE-C (rouge) soit avec celles de MSIS (bleu) pour les concentrations neutres.

• **Impact des coefficients de réaction**

Etude préliminaire

Comme on l'a vu précédemment, parmi toutes les réactions à prendre en compte dans le modèle, seule la réaction d'échange de charge impliquant O :



reste globalement mal connue. Sachant que O est l'espèce prépondérante dans la thermosphère dès 250 km , on peut s'attendre à ce que la valeur de ce taux de réaction soit cruciale pour une bonne interprétation des données. Nous allons dans un premier temps pour l'orbite AE-C 2758 étudier le comportement de la concentration de O^{++} , en faisant varier le coefficient k_s de 10^{-11} à $2 \times 10^{-10} \text{ cm}^3 \text{ s}^{-1}$, valeurs adoptées généralement dans les précédentes études théoriques de Breig *et al.* (1977 et 1982) ou Fox & Victor (1981).

Sur la Fig. 2-21 (*droite*), l'impact du coefficient k_s n'est visible qu'à haute altitude au-dessus de 250 km , où la concentration décroît très sensiblement avec la constante de vitesse. Puisque l'oxygène atomique devient prépondérant à partir de 250 km , la réaction de O^{++} avec O devient le processus de pertes dominant à ces altitudes, entraînant ainsi une différence d'autant plus grande dans les concentrations.

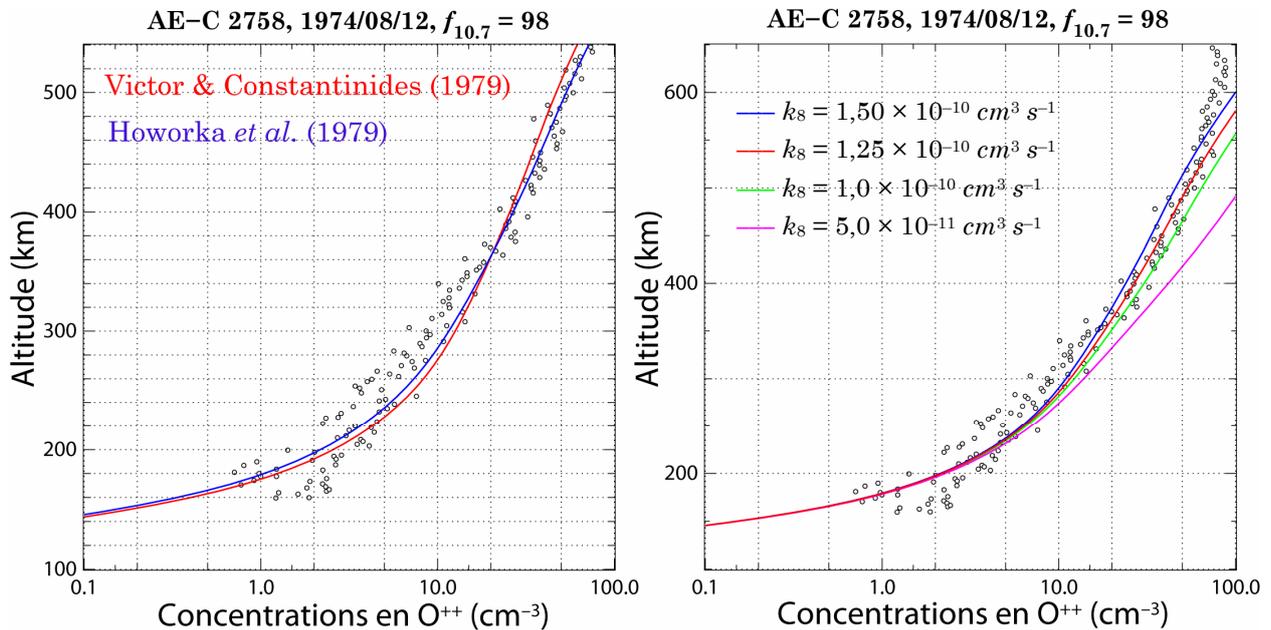


Fig. 2-21 – Évolution de la concentration en O^{++} sous l'effet de la variation des coefficients k_s/k_e (gauche) et k_s (droite). A gauche, les données de Howorka *et al.* (1979, bleu) sont comparées à celles de Victor & Constantinides (1979, rouge). A droite, plusieurs coefficients variant successivement de $k_s = 5,0 \times 10^{-11}$ à $k_s = 2,0 \times 10^{-10} \text{ cm}^3 \text{ s}^{-1}$ sont testés.

Le coefficient retenu qui correspond le mieux aux données de AE-C 2758 est dans notre cas $k_8 = 1,25 \times 10^{-10} \text{ cm}^3 \text{ s}^{-1}$.

La figure de gauche compare quant à elle les jeux de données existantes pour les réactions (5) et (6) faisant intervenir les molécules N_2 et O_2 . Les deux mesures — contemporaines — de Howorka *et al.* (1979) et Victor & Constantinides (1979) sont identiques aux incertitudes près. La différence entre les deux jeux de données sont particulièrement visibles à basse et haute altitude (150–350 km puis au-delà de 450 km respectivement) où on a des différences de l'ordre de 50 %. Le meilleur couple de données d'après le modèle et les mesures de AE-C sur les concentrations est ainsi celui de Howorka *et al.* (1979).

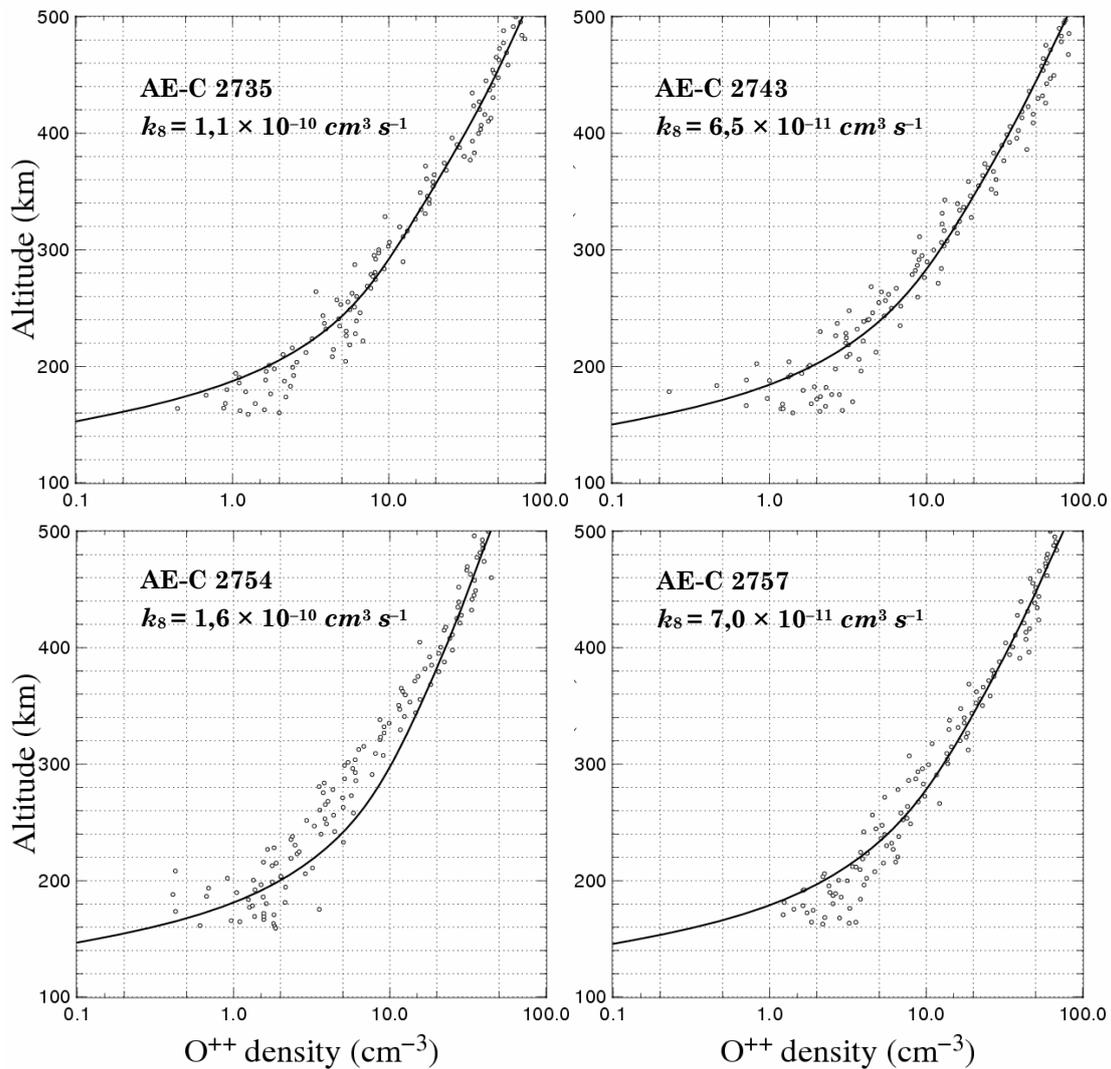


Fig. 2-22 – Concentration en O^{++} dans la gamme 100–500 km pour les orbites successives C-2735 (en haut à gauche), C-2743 (en haut à droite), C-2754 (en bas à gauche) et C-2757 (en bas à droite). Les résultats du modèle sont comparés aux mesures satellite (tirées de Breig *et al.*, 1982) grâce à un ajustement de la constante de vitesse k_8 .

Autres mesures publiées dans la littérature

D'autres mesures sont disponibles dans l'article de Breig *et al.* (1982) pour les jours et heures précédents, vols référencés AE-C 2735, 2743, 2754 et 2757 entre le 10 et le 12 août 1974. Les angles solaires zénithaux varient de 75° à 85°. L'indice décimétrique reste bien entendu identique : $f_{10.7} = 98$. L'indice magnétique A_p est égal à 16.

La Fig. 2-22 montre ainsi la comparaison des courbes expérimentales avec les concentrations théoriques calculées grâce aux coefficients de réaction déterminés au paragraphe précédent dans l'hypothèse de l'équilibre chimique. La courbe théorique reproduit parfaitement les mesures sur toute la plage considérée (100–500 km) en forme et en amplitude.

La moyenne statistique de ces ajustements à 1 σ près est ainsi (voir Tableau 5) :

$$\bar{k}_8 = 1.06 \pm 0.40 \times 10^{-10} \text{ cm}^3 \text{ s}^{-1} \quad (54)$$

Cette valeur est corroborée par les résultats issus d'une approche similaire de Fox & Victor (1981) sur l'ionosphère vénusienne, et vérifiée aux incertitudes près les estimations de Breig *et al.* (1982) sur Terre. Qu'on ne s'y trompe pas : ces dernières estimations ne sont aussi que le résultat d'un ajustement de la courbe expérimentale avec un modèle photochimique très simplifié, et n'ont donc qu'une valeur indicative.

Tableau 5 – Résumé des constantes de vitesse obtenues pour la réaction $O^{++} + O$ sur chaque orbite.

Orbite AE-C	Constante de vitesse k_8 ($\text{cm}^3 \text{ s}^{-1}$)
2735	1.10×10^{-10}
2743	6.50×10^{-11}
2754	1.60×10^{-10}
2757	7.00×10^{-11}
2758	1.25×10^{-10}
Moyenne	$(1.06 \pm 0.40) \times 10^{-10}$

2.4.4 Conclusion préliminaire : validation et limites du modèle

L'étude précédente, dans deux conditions différentes, montre qu'avec les coefficients couplés de Howorka *et al.* (1979) et un ajustement de la constante de vitesse k_8 à $1,06 \times 10^{-10} \text{ cm}^3 \text{ s}^{-1}$, les mesures sont parfaitement reproduites en forme et en amplitude pour peu que l'on se restreigne à la gamme 100–500 km.

Avec une hypothèse aussi simple que celle de l'équilibre photochimique, nous sommes même capables de reproduire la structure de moyennes altitudes identifiable dans les données de AE-C, que l'on peut attribuer à un changement de dépendance de l'expression du taux de production.

Plusieurs limitations sont cependant à garder en mémoire. A haute altitude, le modèle n'est pas capable de reproduire les données car nous ne prenons pas en compte la diffusion verticale de l'ion dans l'atmosphère neutre. D'après la comparaison entre les sorties du modèle et les mesures satellite, la limite basse de diffusion se situe vers 500 km d'altitude. Au-delà, un régime dynamique et diffusif se met en place, que nous pourrions mieux comprendre en résolvant successivement les moments de l'équation de Boltzmann afin d'obtenir l'expression numérique de la vitesse de diffusion. L'hypothèse d'un fluide non stationnaire prend alors tout son sens physique puisqu'à des transports macroscopiques de matière est liée une évolution temporelle.

Que veut-on obtenir dans notre cas ? Certainement pas une précision maximale, ni une complexification outrancière du code de transport fluide. La finalité de cette étude est bien d'obtenir un ordre de grandeur satisfaisant des productions et concentrations.

Le modèle donnant la concentration de l'ion O^{++} est ainsi validé entre 100 et 500 km d'altitude, et par extension, nous pouvons dire que l'approche similaire adoptée pour les dications moléculaires N_2^+ et O_2^+ est correcte, à la différence près que nous ne connaissons pas le domaine de validité en altitude de ces deux espèces. Quelle est l'altitude à partir de laquelle la diffusion devient importante ? Les ions moléculaires étant beaucoup plus lourds que O^{++} , on peut s'attendre à ce que ces ions aient une vitesse de diffusion d'autant plus importante. Des précautions d'interprétation sont donc particulièrement nécessaires dans le cas de ces deux ions, en attendant la caractérisation complète de ces ions d'un point de vue chimique (mesure en laboratoire) et surtout géophysique (mesures dans l'atmosphère).

2.4.5 Sensibilité des concentrations aux paramètres géophysiques

En reprenant le synopsis des chapitres précédents, nous allons refaire une étude synthétique de sensibilité aux paramètres géophysiques pris en compte dans le modèle — *activité solaire, coordonnée géographique et angle solaire zénithal*— mais cette fois-ci pour la concentration des ions doublement chargés. Les latitudes de Grenoble et Tromsø sont à nouveau prises comme représentatives des moyennes et hautes latitudes respectivement (*cf.* Tableau 3).

- **Activité solaire**

La Fig. 2-23 représente les concentrations des espèces N_2^+ , O_2^+ , O^+ , N^+ , NO^+ , H^+ , N_2^{++} , O_2^{++} et O^{++} calculées entre 100 et 500 km par le code TRANSCAR à la latitude de Grenoble pour deux activités solaires extrêmes.

A basse altitude, l'ion moléculaire O_2^+ est prépondérant et atteint une valeur moyenne de 10^5 ions cm^{-3} qui ne varie presque pas lorsque l'activité solaire augmente. La région *E* de l'ionosphère, composée essentiellement de O_2^+ , est ainsi clairement visible à très basse altitude (100–140 km). On reconnaît entre 140 et 170 km la couche ionosphérique *F*₁ marquée par un pic de la concentration de l'ion NO^+ . Au-delà, l'ion O^+ est majoritaire et atteint un maximum en période calme 6×10^5 ions cm^{-3} vers 250 km, qui se déplace vers 300 km à $1,5 \times 10^6$ ions $cm^{-3} s^{-1}$ pour un $f_{10.7} = 243$. La décroissance de la concentration est ensuite très lente avec une valeur à 500 km de l'ordre de 10^5 ions cm^{-3} .

Alors que pour toutes les autres espèces, on assiste à une augmentation ou une stabilisation des valeurs de concentration lors de l'augmentation de l'activité solaire, la concentration en ion H^+ a un comportement opposé : à un $f_{10.7}$ de 243, la concentration est en moyenne 10 fois moins importante qu'à $f_{10.7} = 68$, un phénomène qui peut directement être rapproché de l'évolution de la concentration de H (anticorrélée au flux $f_{10.7}$) et donc à celle des productions d'ionisation, une remarque que nous avons déjà faite au § 2.1.3.

La concentration des trois espèces doublement chargées reste négligeable par rapport aux autres espèces jusqu'à environ 350 km d'altitude.

Parmi les dications, O^{++} est l'espèce la plus importante à partir de 120 km, suivie de N_2^{++} puis O_2^{++} , cette dernière restant toujours en retrait d'un facteur 10 à basse altitude par rapport à N_2^{++} , d'un facteur environ 100 vers 500 km. A 500 km d'altitude et pour un $f_{10.7} = 68$, O^{++} devient le quatrième ion majoritaire après O^+ , H^+ et N^+ . Cependant, dans des conditions d'activité forte ($f_{10.7} = 243$), la croissance des concentrations des trois dications est moins marquée que les ions monochargés et O^{++} passe ainsi de la quatrième à la septième place.

Chaque ion doublement chargé évolue différemment avec la croissance du flux solaire : en moyenne, la concentration de O^{++} est multipliée par 2 quand on passe d'un flux faible à un flux fort, alors que dans le même temps, celle de N_2^{++} est augmentée d'un facteur 4 et O_2^{++} d'un facteur 8. O_2^{++} est donc l'espèce la plus sensible à la variation d'activité solaire. Ce phénomène est dû aux effets conjugués de l'augmentation uniforme du flux solaire (et notamment de la composante à haute énergie) et de la valeur du seuil de double ionisation de O_2 (le plus bas des trois dications, *i.e.* 36,13 eV) : les plus hautes énergies du flux solaire susceptible d'ioniser auront tendance à se déposer plus bas en altitude où la concentration de O_2 est plus importante, alors même que la production en O_2^{++} est favorisée par la faible valeur de son seuil d'ionisation.

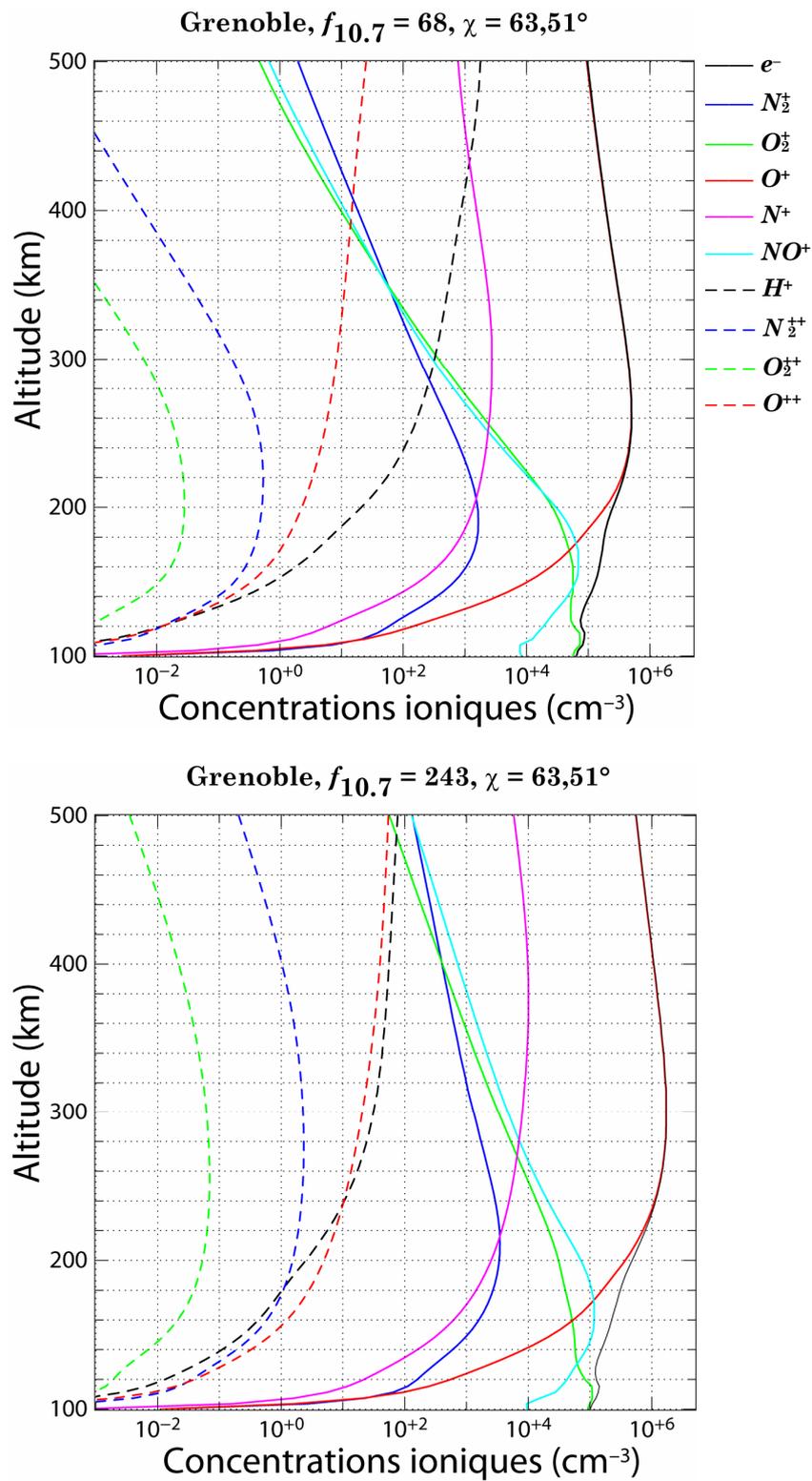


Fig. 2-23 – Concentration des principales espèces ioniques à Grenoble à un angle solaire moyen de $63,51^\circ$ pour deux conditions d'activité solaires $f_{10.7} = 68$ (haut) et $f_{10.7} = 243$ (bas). Les ions doublement chargés sont représentés en tirets.

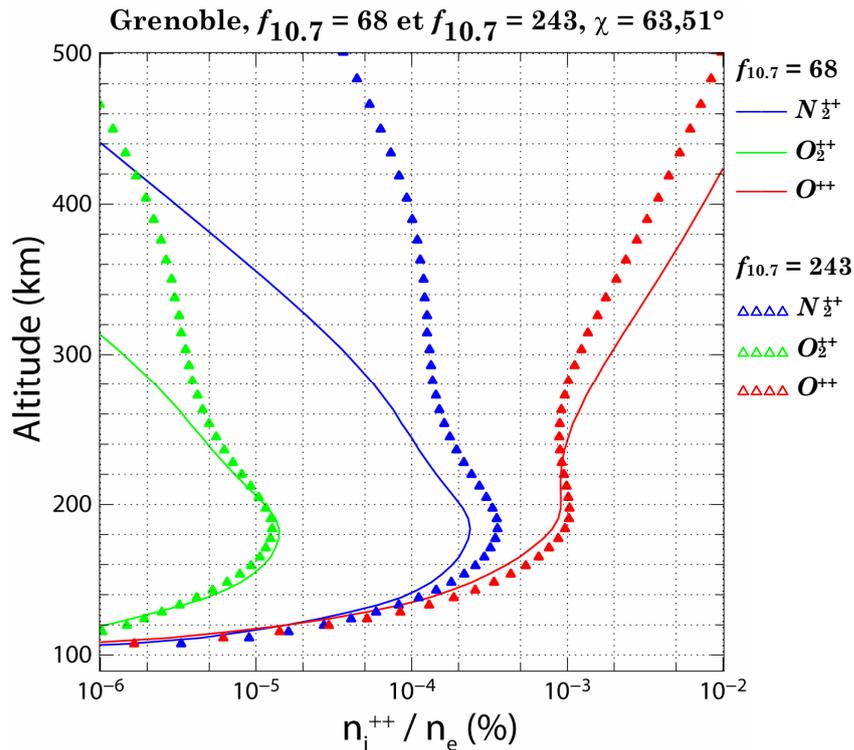


Fig. 2-24 – Rapports exprimés en % des concentrations des ions doublement chargés à la concentration électronique totale à Grenoble ($\chi = 63,51^\circ$) pour deux conditions d'activité solaire $f_{10.7} = 68$ (traits pleins) et $f_{10.7} = 243$ (triangles).

Sur la plage 200–500 km dans des conditions d'activité calmes, les concentrations en N_2^{++} et O_2^{++} restent relativement stables, atteignant vers 250 km 0,7 ions cm^{-3} et 0,02 ions cm^{-3} respectivement.

Sur la Fig. 2-24, on a tracé les rapports des concentrations des dications à la concentration électronique totale. On remarque que l'évolution pour un flux faible et pour un flux fort est similaire sur la plage d'altitude considérée avec une divergence plus marquée toutefois pour O^{++} à haute altitude.

La contribution à la concentration électronique reste extrêmement faible pour les trois ions, N_2^{++} et O_2^{++} étant de plusieurs ordres de grandeur inférieurs à O^{++} . Le pourcentage varie pour ce dernier de 0,001 % à 200 km à 0,01 % au dessus de 400 km. On voit par ailleurs que, dans le cas de O^{++} , l'importance de cette contribution diminue très sensiblement entre 200 et 500 km avec l'augmentation de l'activité solaire, ce que nous avons déjà remarqué dans les courbes précédentes.

• Coordonnées géographiques

Quand nous faisons varier les coordonnées géographiques (Fig. 2-25, droite), à l'instar de ce que nous avons remarqué pour les productions, les comportements généraux ne changent qu'assez peu, tandis que O^{++} possède une évolution originale par rapport aux deux dications moléculaires.

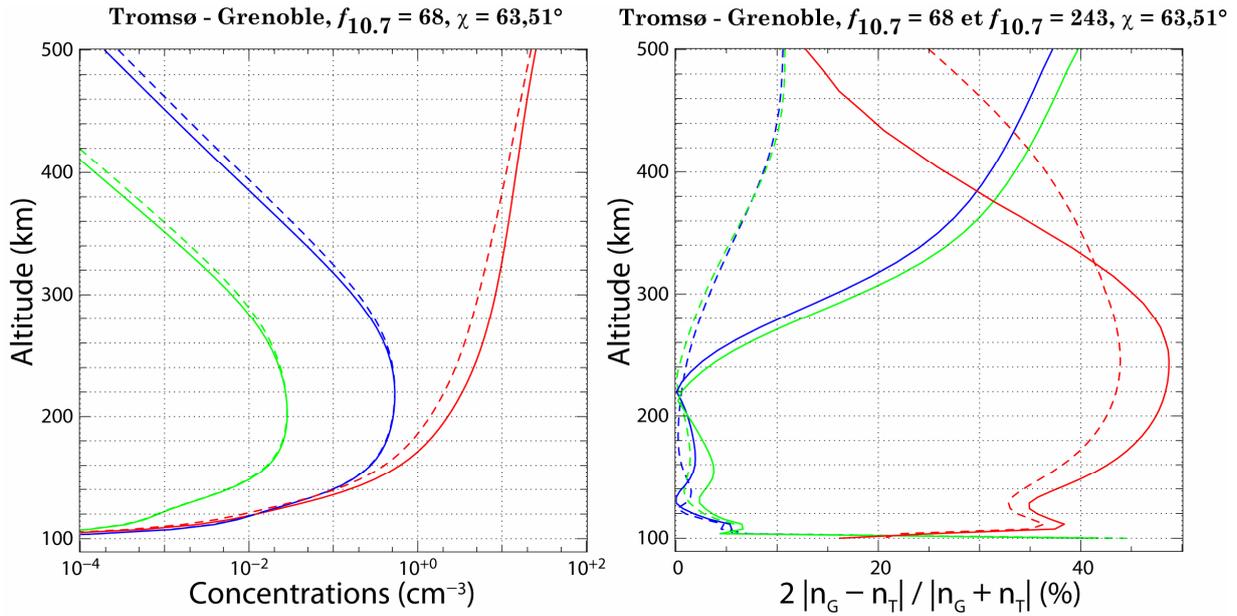


Fig. 2-25 – Comparaison des concentrations des ions N_2^+ (bleu), O_2^+ (vert) et O^+ (rouge) au-dessus de Grenoble (traits pleins) et de Tromsø (tirets). La figure de droite représente le rapport relatif en % des écarts de concentration de ces trois ions entre Grenoble et Tromsø pour $f_{10.7} = 68$ (lignes) et $f_{10.7} = 243$ (tirets).

De manière générale, les productions des ions doublement chargés étant plus importantes à Tromsø qu'à Grenoble (c'est le contraire dans le cas de O^+), les concentrations ioniques suivront globalement cette variation, même si cette variation est compensée en partie par l'évolution dans le même sens des pertes chimiques au dénominateur de l'équation.

L'analyse plus fine de la Fig. 2-25 (gauche) nous montre la différence relative des profils de concentration entre Grenoble et Tromsø pour les trois ions. Les différences pour les ions moléculaires sont extrêmement faibles. Cet écart est constant sur toute la plage d'altitudes considérée et ne varie qu'assez peu avec la position géographique sauf à haute altitude pour l'ion O_2^+ : en moyenne, la différence ne dépasse pas 3 % pour N_2^+ et O_2^+ .

Aux extrêmes, *i.e.* en dessous de 150 km et au dessus de 400 km, le comportement des profils de N_2^+ et O_2^+ varie de manière importante : pic à 6 % pour les deux ions vers 110 km puis diminution jusqu'à atteindre 0 % à 130 km, augmentation dans le cas de O_2^+ à partir de 400 km jusqu'à atteindre 15 % de différence entre Tromsø et Grenoble. A flux solaire fort, les différences tendent à disparaître entre 150 et 400 km.

En ce qui concerne O^+ , les grandeurs calculées sont nettement variables avec la latitude et la concentration à Grenoble peut être de l'ordre de 50 % plus petite que celle de Tromsø calculée au pic à 240 km d'altitude.

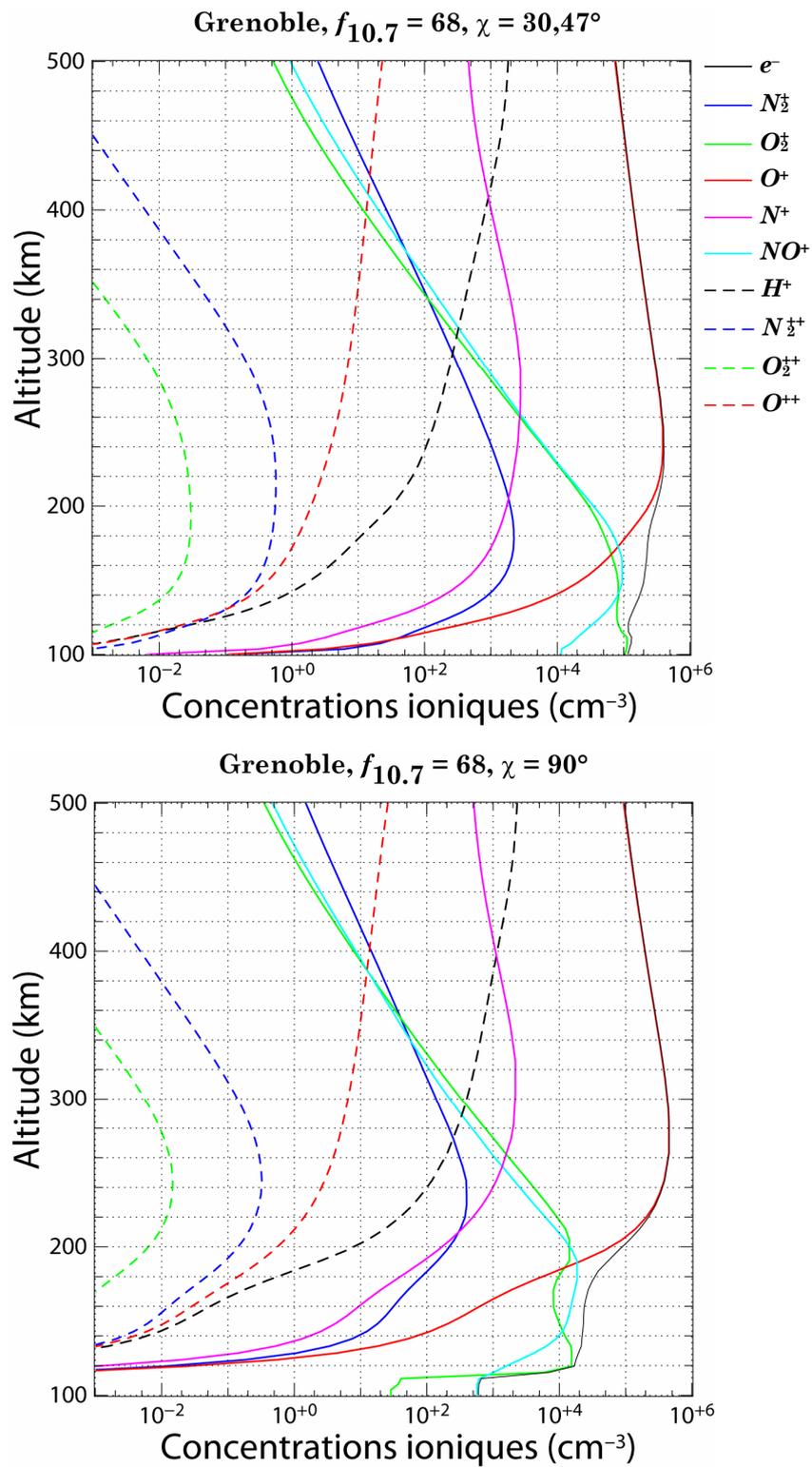


Fig. 2-26 – Profils des concentrations des principales espèces ioniques dont $N \frac{1}{2}^+$ (tirets bleus), $O \frac{1}{2}^+$ (tirets verts) et O^{++} (tirets rouges) au-dessus de Grenoble à deux angles solaires zénithaux : en haut, $\chi = 30,47^\circ$, en bas $\chi = 90^\circ$.

Dans le cas d'un $f_{10.7}$ égal à 243, ce pic devient plus large et la courbe décroît moins lentement (43 % à 250 km) : il y a ainsi une certaine stabilisation des différences aux altitudes considérées. L'écart reste dans les deux cas toujours supérieur à 10 % (flux faible) voire 25 % (flux fort).

En conclusion de ce paragraphe, la modification des concentrations due à la latitude géographique est surtout sensible pour O^{++} , avec des écarts qui peuvent aller de 10 à 50 % en fonction de l'altitude, selon le schéma : quand la latitude augmente, la concentration en O^{++} diminue. A flux solaire fort, les écarts ont tendance à se stabiliser et à se moyenniser sur toute la gamme 100–500 km.

• Étude temporelle sur une journée

Dans un premier temps, nous nous intéressons à la sensibilité des concentrations aux deux conditions extrêmes correspondant au soleil couchant ($\chi = 90^\circ$) et au zénith local ($\chi = 30,47^\circ$), à la latitude de Grenoble. Contrairement aux conclusions précédentes, la composition en ion change de manière drastique sous l'influence de la position du soleil par rapport à l'horizon.

La différence entre les deux graphiques de la Fig. 2-26 (*haut* pour $\chi = 30,47^\circ$ et *bas* pour $\chi = 90^\circ$) ne se situe pas tant au niveau de l'amplitude maximale des courbes qu'à celui de l'altitude et donc de la forme générale des profils de concentration. La diminution de la concentration n'est en effet surtout visible que chez les ions moléculaires puisque l'on passe au pic de 10^5 ions cm^{-3} ($\chi = 30,47^\circ$) à 2×10^4 ions cm^{-3} ($\chi = 90^\circ$) pour O_2^+ et NO^+ , de 2×10^3 ions cm^{-3} à 5×10^2 ions cm^{-3} pour N_2^+ .

Comme nous l'avons déjà remarqué — et expliqué — dans l'étude des productions, on assiste à une remontée générale en altitude des profils de concentration de 20 à 50 km selon les espèces : N_2^+ varie le plus en altitude (50 km) à l'opposé de O^+ qui accuse une remontée de seulement 20 km. Dans tous les cas, à haute altitude, la composition de l'atmosphère ionisée reste inchangée, ce qui indique bien que c'est l'efficacité de photoionisation qui est en cause dans ce phénomène, due au plus ou moins grand nombre de couches d'atmosphère traversées et donc de l'absorption du flux solaire sur la ligne de visée.

Les ions doublement chargés ont une évolution similaire aux espèces simplement chargées comme on peut le voir sur la Fig. 2-27 ci-dessous : remontée impressionnante des concentrations et des pics moléculaires de 180 à 260 km, profils identiques à haute altitude. Pour un angle solaire rasant (90°) et typiquement en dessous de 120 km, l'ionosphère se vide complètement de ses dications car le mécanisme de photoproduction devient inefficace : à cause de la quantité d'atmosphère à traverser, le flux solaire ne pénètre plus à ces altitudes. Le comportement global de N_2^{2+} et O_2^{2+} à un angle solaire donné est parfaitement symétrique avec une stabilisation voire une légère diminution des concentrations et, encore une fois, seul l'ion O^{++} déroge à la règle : la concentration continue de grandir jusqu'à atteindre environ 2 ions cm^{-3} à 500 km.

De manière plus précise (Fig. 2-27, *droite*), la proportion d'ions doublement chargés responsable de la concentration totale en électrons varie très graduellement dans la gamme d'altitudes considérée sauf à très basse altitude. Ce n'est pas surprenant si l'on se remémore que, pour créer ces ions et donc libérer deux électrons, il faut que le rayonnement et les électrons suprathermiques soient suffisamment énergétiques pour franchir le seuil d'ionisation double, principal mécanisme à basse altitude. À très basse altitude donc, ces électrons et ces photons susceptibles d'ioniser deux fois n'existent presque plus et favorisent l'ionisation simple des constituants neutres de l'atmosphère dans la création d'électrons.

La modulation qui existe entre concentrations des neutres et des ions, discrétisation du flux solaire, altitude et sections efficaces d'ionisation nous donne deux pics d'efficacité pour les dications moléculaires, l'un vers 180 km, l'autre situé plus haut, vers 260 km d'altitude.

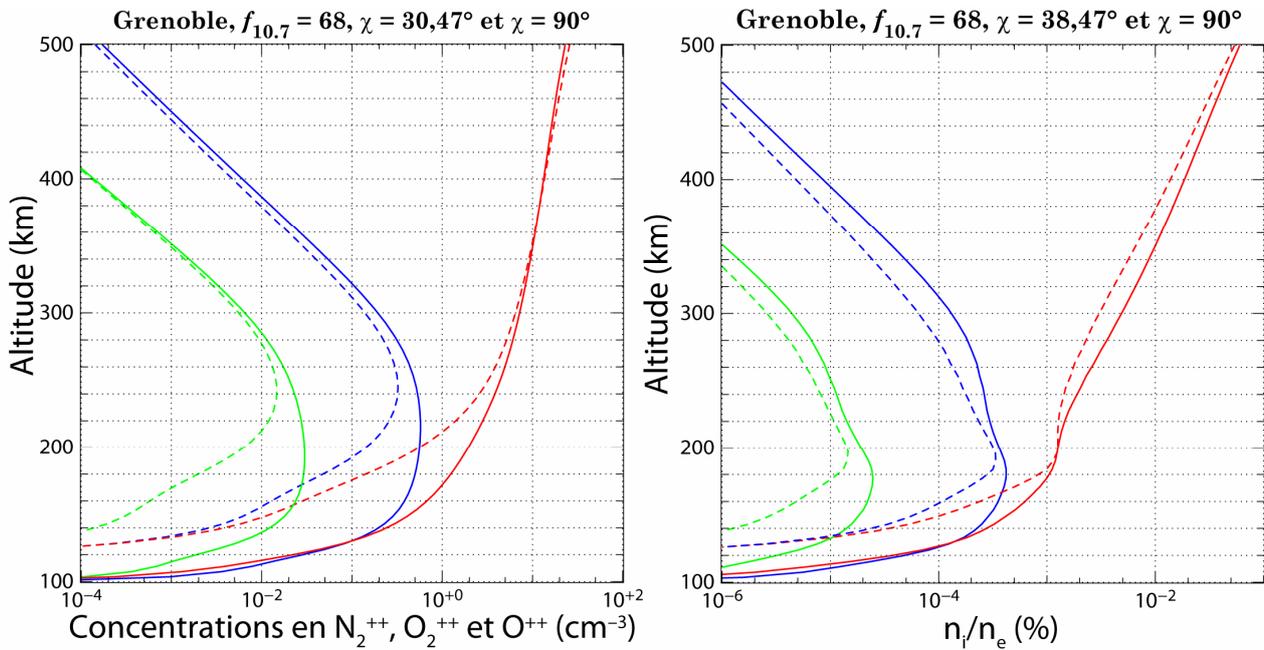


Fig. 2-27 – Profils des concentrations des trois espèces N_2^+ (bleu), O_2^+ (vert) et O^+ (rouge) sous un angle solaire zénithal de 30,47° (traits pleins) et un angle rasant de 90° (tirets), à la latitude de Grenoble. A droite est tracée pour ces deux angles la part en % de la présence de ces ions dans la concentration électronique.

2.5 Récapitulons (II)

A la suite du calcul des productions, nous avons calculé les concentrations des ions doublement chargés dans l'ionosphère terrestre. La confrontation pour l'espèce ionique O^+ avec les données satellite de Atmosphere Explorer nous a permis de

valider notre calcul dans la gamme d'altitudes 100-500 *km* et de contraindre les valeurs de constantes de vitesse non encore mesurées en laboratoire. Les résultats pour les dications moléculaires doivent être considérés comme des prédictions, tout en gardant en mémoire que des incertitudes subsistent, liées essentiellement aux sections efficaces de double photoionisation des espèces moléculaires.

Suite à cette validation, nous avons étudié la sensibilité des concentrations calculées à différents paramètres géophysiques. D'une manière générale, O^{++} est la quatrième espèce prépondérante (avec une amplitude de l'ordre de 10 ions cm^{-3}) au-dessus de 400 *km* d'altitude pour des conditions d'activité solaire calmes ($f_{10.7} = 68$) après les espèces monochargées O^+ , N^+ et H^+ : la mesure d'un tel ion par spectrométrie de masse embarquée sur satellite est ainsi grandement facilitée.

On remarque également que lorsque l'activité solaire croît, la concentration des ions doublement chargés grandit proportionnellement moins vite que celle des ions simplement chargés : O^{++} passe ainsi de la 4^e contribution majoritaire à la 7^e place à haute altitude quand on atteint des indices $f_{10.7}$ supérieurs à 200.

Des trois ions bi-chargés, O_2^{++} est l'ion le plus sensible à la variation d'activité solaire : lorsqu'entre $f_{10.7} = 68$ et $f_{10.7} = 243$, la concentration en O^{++} croît en moyenne d'un facteur 2 au pic, celle de N_2^{++} est multipliée par 4 et celle de O_2^{++} par 8, une différence due à la combinaison de deux mécanismes, l'altitude de déposition du flux solaire qui diminue d'une part (les concentrations en N_2 et O_2 deviennent alors majoritaires), le seuil de photoionisation moindre pour la création de dications moléculaires d'autre part.

D'une manière générale, les concentrations sont plus importantes à moyenne latitude. Les différences entre moyenne et haute latitude peuvent alors monter à 40% pour O^{++} , alors qu'elles restent minimales (< 5%) pour les dications moléculaires.

C'est l'angle solaire zénithal qui influe le plus sur l'évolution des concentrations, et ce particulièrement à basse altitude, où pour $\chi = 90^\circ$ (soleil à l'horizon), les pics de concentrations se forment plus haut en altitude alors que leur amplitude décroît d'un facteur 2 en moyenne.

De cette étude, nous devons donc retenir que les pics de concentrations pour les dications moléculaires N_2^{++} et O_2^{++} (d'amplitude respective en ordre de grandeur 1 cm^{-3} et 0.01 cm^{-3}) se situent d'après la simulation entre 200 *km* and 250 *km* et restent en moyenne 10 à 100 fois moins abondants que O^{++} , l'espèce doublement chargée la plus importante dans l'ionosphère terrestre.

Après l'étude terrestre, nous allons maintenant nous intéresser à un autre objet du système solaire, Titan, qui, depuis deux ans, occupe le devant de la scène en planétologie grâce au succès de la mission Cassini-Huygens.

2.6 Résultats sur Titan

Ce paragraphe a pour but d'exposer les résultats du portage sur Titan du code d'ions doublement chargés modifié tel que nous l'avons expliqué aux paragraphes précédents. Cette prédiction a fait l'objet de deux articles publiés dans *Icarus* et *Geophysical Research Letters* en 2005 et présentés en annexe.

2.6.1 Présentation générale

- **Contexte scientifique**

Titan est le plus grand satellite de Saturne avec 5150 km de diamètre et le plus grand du système solaire après Ganymède. Découvert en 1655 par l'astronome et mathématicien hollandais Christiaan Huygens, peu de choses étaient connues sur ce satellite lointain jusqu'à l'arrivée des sondes Voyager dans les années 1980 et bien sûr, l'an dernier, la descente dans son atmosphère dense et pendant plus de deux heures de la petite sonde européenne Huygens.

Ainsi, depuis l'arrivée de Cassini-Huygens dans le système de Saturne —une des missions spatiales les plus ambitieuses jamais lancées dans le système solaire, fruit de la collaboration entre l'ESA et la NASA—, et le largage réussi de la sonde européenne Huygens dans l'atmosphère de Titan le 14 janvier 2005, de nombreuses spéculations sur la composition physico-chimique de ce satellite de Saturne ont pu être levées. Cet événement dans le système kronien a ainsi relancé l'intérêt de la communauté pour la modélisation de l'atmosphère et de l'ionosphère de Titan.

- **Retour sur Cassini : application aux atmosphères**

La mission Cassini-Huygens (<http://saturn.jpl.nasa.gov/home/index.cfm>) est le résultat de 20 ans de prospective scientifique et de réflexions qui ont conduit en 1997 à son lancement vers Saturne grâce une fusée Titan IV-Centaure. D'un poids de 2,2 tonnes, la mission est divisée en deux modules, un orbiteur nommé Cassini de conception américaine, et la sonde européenne Huygens, de 350 kg seulement, destinée à explorer *in-situ* Titan et à atterrir à sa surface. Sept ans plus tard, Cassini-Huygens arrivait à destination et pouvait commencer l'étude du système de Saturne, tout au long des 74 orbites prévues et des 44 survols de Titan : planète, anneaux, satellites, tous les éléments de ce système solaire en miniature sont abordés au travers de ses 18 instruments embarqués, dont 6 sur Huygens.

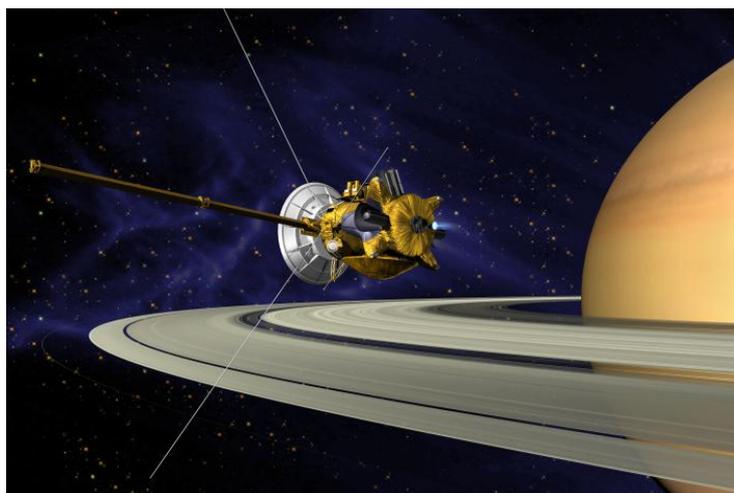


Fig. 2-28 – La sonde Cassini traversant le plan des anneaux de Saturne lors de son insertion orbitale (image de synthèse, crédits NASA/ESA).

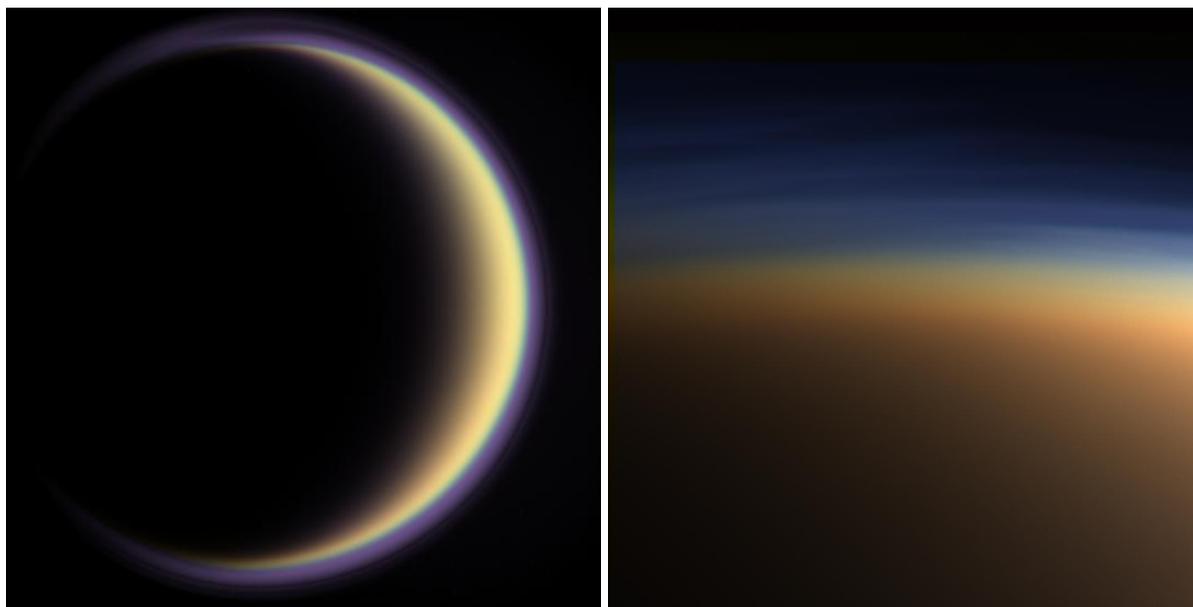


Fig. 2-29 – Le satellite Titan vu par la caméra ISS²⁵ de Cassini. A gauche, l'image, prise le 5 Mai 2005 à 1,4 millions de km, combine une vue dans l'UV (limbe bleuté prise par UVIS²⁶) et l'image grand champ en couleur de l'atmosphère. A droite, on peut voir en vraies couleurs le détail de la haute atmosphère de Titan et de sa structure en couches de nuages, obtenue à une distance de 9500 km le 31 mars 2005. La couleur bleue est due à la diffusion Rayleigh de la lumière par les brumes de haute altitude. Plus bas dans l'atmosphère, la densité de l'atmosphère croît pour ne laisser passer que 10% environ de la lumière (crédits NASA/JPL).

²⁵ Imaging Science Subsystem, constituée d'une camera grand angle et d'un téléobjectif haute résolution.

²⁶ UVIS, ou Ultraviolet Imaging Spectrograph, est le spectrographe UV et EUV de Cassini (voir texte).

Plusieurs objectifs prioritaires ont été identifiés : dynamique et composition des anneaux, histoire et composition géologique des satellites glacés, structure de la magnétosphère, dynamique et composition de l'atmosphère de Saturne et enfin étude détaillée physico-chimique de Titan du point de vue surface, atmosphère et ionosphère.

Sur Cassini, plusieurs instruments sont d'un intérêt spécifique à l'ionosphère : INMS (Ion and Neutral Mass Spectrometer) mesure, grâce à un spectromètre de masse, les compositions ioniques et neutres dans les atmosphères de Titan, de Saturne et au niveau des anneaux. RPWS (Radio and Plasma Wave Science) étudie quant à lui les champs électriques et magnétiques et les ondes radio dues à l'action du vent solaire dans la magnétosphère.

RPWS permet également de déterminer les concentrations électroniques et les températures grâce à une sonde de Langmuir suédoise qui complète le dispositif initial. Enfin, quatre spectrographes constituent l'expérience UVIS (Ultraviolet Imaging Spectrograph) destinés à observer Titan dans l'ultraviolet (110–190 *nm*) et l'extrême ultraviolet (56–118 *nm*), permettant d'étudier précisément la composition chimique de l'atmosphère. Un canal supplémentaire permet de mesurer les abondances Deutérium/Hydrogène de Saturne et Titan.

2.6.2 L'atmosphère de Titan et application aux ions N_2^{++}

La température moyenne à la surface de Titan est de l'ordre de -183°C avec une pression de 1,5 bar. Ce qui nous intéresse ici, c'est la composition de son atmosphère : 97% de N_2 , 2% de CH_4 , avec la présence de gaz rares comme l'argon sous forme de traces et des brumes d'hydrocarbures.

Suite aux derniers résultats de la sonde Cassini, la haute atmosphère de Titan a également révélé une chimie complexe baignée dans le champ magnétique turbulent de Saturne, et où le rayonnement EUV peut casser les molécules de méthane, dont les dérivés peuvent former alors des composés d'éthane. Cette extrême complexité, incluant espèces neutres et ionisées dans un environnement magnétisé, reste un problème d'envergure dans tout effort visant à modéliser précisément la physique et la chimie de l'atmosphère.

Une description récente de l'ionosphère de Titan d'un point de vue modélisation est présentée dans Fox & Yelle (1997), Wilson & Atreya (2004) ou Cravens *et al.* (2004, 2006) : plus de 1000 réactions neutre-ion et neutre-neutre doivent être ainsi prises en compte dans les modèles.

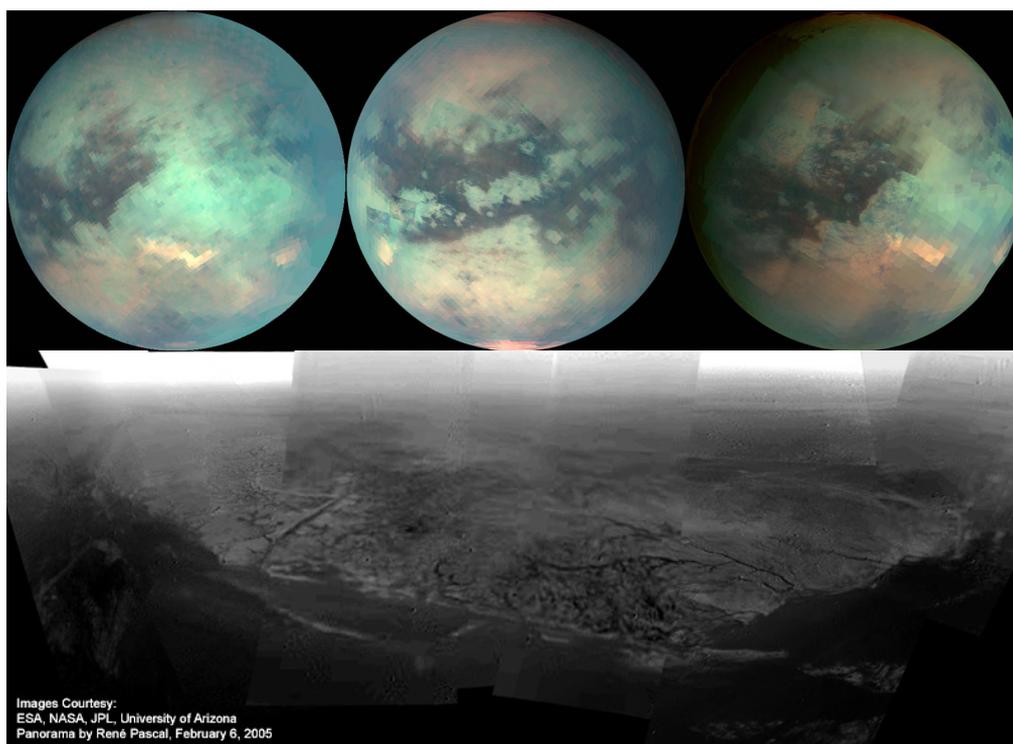


Fig. 2-30 – *Haut : mosaïques d'images en fausses couleurs prises le 28 octobre, le 26 décembre 2005 et le 15 janvier 2006 par l'instrument VIMS²⁷ sur Cassini. On observe une grande dynamique de l'atmosphère au pôle sud de Titan. Au sud de l'équateur, la région brillante à 5 μ m, appelée Tui Reggio, est peut-être un dépôt de surface d'origine volcanique. Bas : composite d'images de la surface de Titan, lors de la descente de la sonde Huygens, à environ 8 km du sol. On peut identifier une côte séparant les reliefs (clair) de parties plus basses (sombre) avec vraisemblablement des canaux de drainages. Des détails de 20 m sont visibles sur ce panoramique (crédits ESA/NASA/JPL).*

Plusieurs études concernent également la configuration du champ magnétique de Saturne et comment celui-ci s'empile et se déforme à cause de la présence de Titan (*cf.* Kallio *et al.*, 2004 ou Backes *et al.*, 2005). Ces deux éléments sont un sujet central dans la modélisation cinétique de l'ionosphère de Titan et nécessiteront dans les années à venir des développements spécifiques. Ainsi, le transport des ions lourds, celui des protons ou l'influence des rayons cosmiques n'en sont qu'à leurs balbutiements et devraient faire partie dans les prochaines années des thématiques indispensables pour comprendre les principales entrées d'énergie dans la haute atmosphère de Titan. Suivant ce raisonnement, il a pu être montré récemment par des méthodes statistiques Monte Carlo que les ions moléculaires ionisés par le flux EUV et emportés par le vent solaire (dits « pick-up ions ») ainsi que les ions N^+ provenant de la magnétosphère pouvaient apporter plus d'énergie que le flux solaire

²⁷ VIMS, ou Visual and Infrared Mapping Spectrometer, est constitué de deux spectromètres imageurs, l'un opérant dans l'IR (850–5100 nm), l'autre dans le visible (350–1070 nm).

EUV seul, que l'on pensait majoritaire dans l'ionisation et le chauffage de la haute atmosphère (Michael & Johnson, 2005). Les ions *pick-up* sont par ailleurs responsables du ralentissement du vent solaire en amont des magnétosphères planétaires et contribuent à l'empilement du champ magnétique interplanétaire. Une approche globale de ces phénomènes est donc devenue un enjeu important pour les aéronomes.

Dans ce cadre, la présence d'ions doublement chargés n'a jamais été considérée jusqu'alors dans l'atmosphère de Titan et constitue un premier pas vers cette approche globale. Des mesures en laboratoire ont ainsi montré que certaines espèces pouvaient être stables et jouer un rôle significatif dans les atmosphères denses des planètes du système solaire, dont Titan en est un des plus intéressants représentants. Le code TRANSCAR a été adapté depuis quelques années à l'ionosphère de Titan (Galand *et al.*, 1999) suivant le formalisme expliqué précisément tout au long de cette thèse.

En complément de mon travail sur l'ionosphère de la Terre, il m'a donc été permis d'inclure l'espèce stable N_2^{++} dans le code existant et de calculer pour la première fois les concentrations de cette espèce dans l'ionosphère de Titan (Lilensten *et al.*, 2005a, 2005b). CH_4^{++} , dication uniquement instable, n'est pas considéré ici.

2.6.3 Description du modèle photochimique diurne

Dans la continuité des expressions destinées aux dications moléculaires exposées au paragraphe sur les concentrations, on peut réécrire dans le cadre du modèle photochimique de Titan :

$$n_{N_2^{++}}(z) = \frac{P_{N_2}^{photo}(z) + P_{N_2}^{impact}(z)}{n_e(z) k_{RD} + n_{N_2}(z) k_{N_2} + n_{CH_4}(z) k_{CH_4} + \tau_d^{-1}} \quad (55)$$

où $P_{N_2}^{photo}$ est la production ionique primaire due à la double photoionisation de N_2 , $P_{N_2}^{impact}$ la production secondaire de N_2^{++} due à l'ionisation de N_2 par impact électronique. On suppose que les ions N_2^{++} sont créés par double photoionisation et impact des photoélectrons sur N_2 , alors qu'ils sont détruits de manière prédominante par les réactions chimiques avec N_2 et CH_4 et par la recombinaison dissociative avec les électrons ambiants (RD). Les concentrations électroniques, en diazote N_2 et en méthane CH_4 sont notées n_e , n_{N_2} et n_{CH_4} respectivement. Le taux de recombinaison dissociative s'écrit k_{RD} alors que les constantes de vitesse pour la réaction chimique avec N_2 et CH_4 sont notées k_{N_2} et k_{CH_4} . Rappelons les valeurs mesurées pour chacune de ces vitesses de réaction, exprimées en $cm^3 s^{-1}$:

$$\begin{cases} k_{RD} = 5,8 \pm 1,5 \times 10^{-7} \sqrt{\frac{300}{T_e}} & \text{(Seiersen *et al.*, 2003)} \\ k_{N_2} = 2,7 \pm 0,7 \times 10^{-9} & \text{(Mesures LCP)} \\ k_{CH_4} = 1,8 \pm 0,5 \times 10^{-9} \end{cases} \quad (56)$$

τ_d est le temps de demi-vie de l'ion N_2^{++} , mesuré égal à 3 s (Mathur *et al.*, 1995).

L'atmosphère neutre est décrite dans l'article de Müller-Wodarg *et al.* (2000) avec une température exosphérique de 175 K. Les sections efficaces de photoabsorption adoptées sont celles de Fennelly & Torr (1992) pour N_2 et de Samson *et al.* (1989) pour CH_4 . Pour la double photoionisation de N_2 , qui n'a jamais été mesurée, il a été adopté le même formalisme que dans notre étude sur la Terre. Les sections efficaces de double ionisation par impact électronique viennent de Märk (1975) pour la formation de N_2^{++} .

2.6.4 Résultats

Les productions et les concentrations en N_2^{++} calculées à la suite de ce travail pour $f_{10.7} = 150$ (conditions d'activité solaires moyennes) sont présentées sur la Fig. 2-31.

Sur la figure de gauche, on a tracé les productions électroniques et ioniques primaires et secondaires pour un angle solaire zénithal de 45° , représentant selon Lebonnois & Toublanc (1999) une moyenne planétaire. De manière classique, les productions secondaires dessinés en tirets sont plus importantes à basse altitude (< 900 km environ) que les productions primaires en pointillés. Les productions de N_2^{++} sont environ 100 fois moins importantes au pic vers 1000 km que celles de l'ion simplement chargé correspondant N_2^+ .

Sur la figure de droite, les concentrations ioniques des ions minoritaires $C_2H_6^+$, CH^+ , CN^+ et C_2H^+ sont comparées aux concentrations de N_2^{++} . On peut voir que les concentrations atteignent pour N_2^{++} des valeurs jusqu'à 10^{-2} cm^{-3} vers 1100 km, ce qui contribue à hauteur d'environ 0.01% à la densité ionique totale sur Titan.

L'intérêt de la présence de N_2^{++} vient cependant de la grande réactivité de ce dication qui lui permet, après réaction avec les neutres ambiants, de former des ions simplement chargés très énergétiques (Mrázek *et al.*, 2000). Les implications sont nombreuses comme la modification des taux de réaction de N_2^+ et N^+ , ainsi que l'échappement éventuel vers l'exosphère de certains ions. Le tracé en pointillés noirs représente le même calcul pour un indice solaire $f_{10.7} = 100$, correspondant à une activité faible.

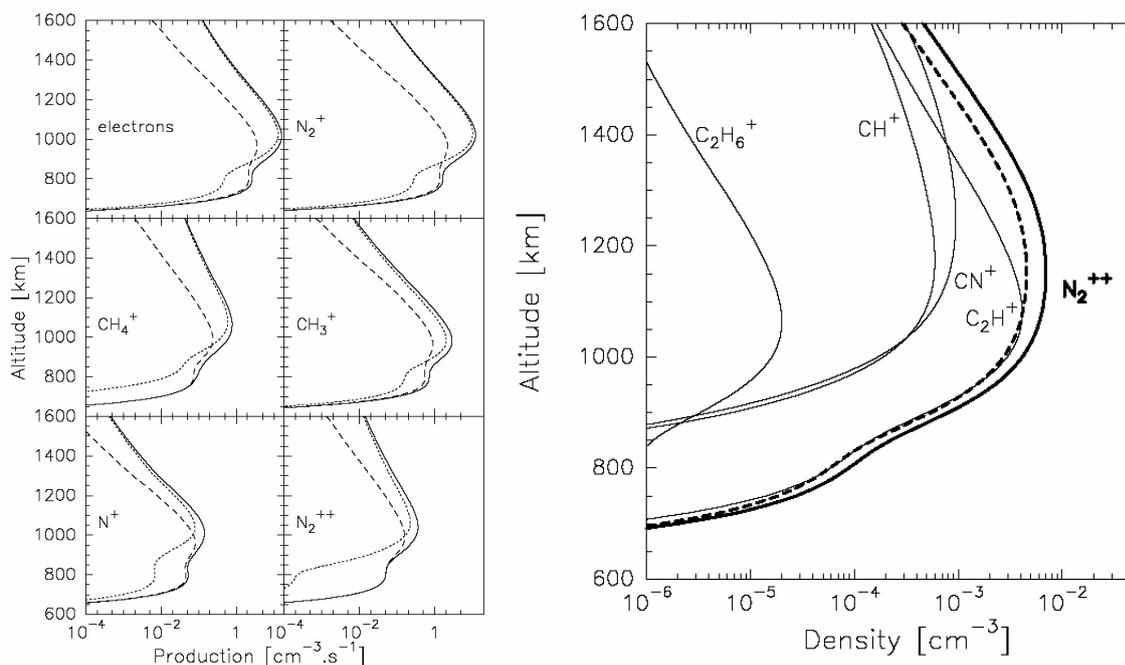


Fig. 2-31 – Productions des principaux ions simplement chargés et de N_2^{++} (gauche) dans l'ionosphère de Titan. Les productions totales en traits pleins sont la somme des productions primaires (pointillés) et secondaires (tirets). A droite, nous avons tracé les concentrations des ions minoritaires, ainsi que celle de N_2^{++} , qui apparaît comme l'espèce minoritaire la plus importante vers 1100 km d'altitude.

2.6.5 Conclusions

A la suite de cette étude, nous avons également voulu rendre les calculs des productions secondaires des ions simplement chargés N_2^+ , CH_4^+ , N^+ et CH_3^+ et de l'ion doublement chargé N_2^{++} facilement accessibles à la communauté. Le calcul du transport des photoélectrons dans la haute atmosphère de Titan a ainsi pu être modélisé par une loi polynomiale grâce à l'étude des efficacités d'ionisation, ce qui permettra d'inclure facilement ces espèces dans les modèles globaux d'ionosphère de Titan (Lilensten *et al.*, 2005b).

Ce travail représente un apport original sur la physico-chimie de l'ionosphère de Titan grâce à la prédiction d'une couche d'ions N_2^{++} . De récentes mesures faites grâce à la sonde de Langmuir à bord de Cassini (Cravens *et al.*, 2006 ; Wahlund, communication personnelle, 2006) évoquent un excès de charge électronique au niveau planétaire par rapport à la concentration en ions effectivement mesurée. Sur Titan, la double photoionisation crée l'ion N_2^{++} stable mais aussi l'ion N_2^{++} instable qui se dissocie en $N^+ + N^+$. Ces deux voies produisant chacune deux électrons pour une espèce ionique pourraient expliquer l'écart constaté sans faire appel à des hypothèses convectives dans la basse atmosphère.

Chapitre 3

Conclusions et perspectives de l'Acte I

*La Terre est le berceau de l'Humanité, mais on
ne peut rester sa vie entière au berceau.*

Konstantin Tsiolkovsky

Sommaire

3.1	Détection d'ions doublement chargés dans les ionosphères planétaires	114
3.1.1	Spectrométrie de masse	114
3.1.2	Spectroscopie optique des dications	114
3.1.3	Fluorescence	115
3.2	Conclusion de l'acte I	117

Cette première partie de mon travail touche à sa fin. Après la mise en évidence théorique des ions doublement chargés dans l'atmosphère de la Terre et de Titan, il nous reste à parler de leur détection expérimentale, une perspective prioritaire pour les prochaines années. Cette mise en évidence, à la fois dans les spectres diurnes mesurés du sol et grâce aux spectromètres embarqués sur satellites, nous permet de boucler ce récit à la manière du serpent de Midgard entourant le monde : nous avons commencé notre étude avec la spectroscopie optique, nous finirons donc par elle.

3.1 Détection d'ions doublement chargés dans les ionosphères planétaires

Pour détecter dans les atmosphères planétaires les dications, nous avons à notre disposition deux méthodes complémentaires. L'une consiste en la détermination des espèces recherchées par spectrométrie de masse. L'autre fait appel aux mesures optiques et à l'étude des spectres auroraux et diurnes en région polaire.

3.1.1 Spectrométrie de masse

La spectrométrie de masse embarquée sur satellite est historiquement l'un des premiers moyens expérimentaux qui ait permis de préciser la composition de l'ionosphère terrestre (Atmosphere Explorer) ou martienne (Pioneer).

La mission Cassini-Huygens en partance pour Saturne et son principal satellite Titan a récemment relancé l'intérêt d'un modèle d'atmosphère/ionosphère cohérent. Dans une étude parallèle à celle de la Terre, nous avons ainsi prédit l'existence d'ions doublement chargés N_2^{2+} dans l'atmosphère très dense de Titan, composée essentiellement de diazote N_2 et de méthane CH_4 (Toublanc *et al.*, 1995). L'article correspondant se trouve en annexe de ce manuscrit (Lilensten *et al.*, 2005).

Cette technique permet de sélectionner un ion donné par le rapport masse sur charge m/q caractéristique d'une espèce neutre ou d'une molécule.

Sur Terre, l'espèce O^{++} est déterminée de manière univoque puisque son rapport $m/q=8$ n'a pas de recouvrement avec les autres espèces. Pour les dications moléculaires cependant, la méthode reste ambiguë puisque N_2^{2+} et O_2^{2+} ont le même rapport m/q que N^+ et O^+ , égal à 14 et à 16 respectivement.

Les résultats du modèle ont montré que la détection de ces trois ions N_2^{2+} , O_2^{2+} et O^{++} est plus facile dans des conditions maximales d'activité solaire, et vers le zénith local lorsque les concentrations ioniques sont à leur maximum. La latitude, comme on l'a vu, ne joue qu'un rôle de moindre importance, permettant une plus grande tolérance lors d'un passage de satellite dans l'atmosphère.

3.1.2 Spectroscopie optique des dications

De tous les ions doublement chargés moléculaires, N_2^{2+} est l'espèce qui a été la plus étudiée d'un point de vue spectroscopique et ce, depuis une vingtaine d'années. L'état fondamental de N_2^{2+} , noté $X^1\Sigma_g^+$, se situe à 43,00 eV au-dessus de l'état fondamental de la molécule neutre (Ahmad, 2002). Quatre états excités ont par ailleurs été identifiés (parmi les 8 calculés) : $a^3\Pi_u$ and $b^3\Sigma_g^-$, les deux premiers états

excités, sont bien caractérisés et situés à 0,57 et 1,48 eV respectivement au-dessus de l'état fondamental de $N\frac{1}{2}^+$ (Taylor and Partridge, 1987).

L'état fondamental $X^1\Sigma_g^+$ de $O\frac{1}{2}^+$ est quant à lui localisé à 36,13 eV au dessus de l'état fondamental de la molécule neutre, alors que le premier état excité $A^3\Sigma_u^+$ se situe à 16 eV au-dessus du fondamental de $O\frac{1}{2}^+$ (Fournier *et al.*, 1992). La structure vibrationnelle de $O\frac{1}{2}^+$ a été étudiée grâce à la technique de photoélectrons de seuil en coïncidence (TPESCO) (Hall *et al.*, 1992 et références incluses).

L'état fondamental de O^{++} , que l'on note 3P_0 , est situé à 48,74 eV au-dessus de l'état fondamental de l'atome neutre (He *et al.*, 1995). Les états excités détectables par émission sont 1D_2 , 1S_0 et $^5S_0^2$, avec des énergies d'excitation de 2.513 eV , 5.354 eV et 7.479 eV : ils sont impliqués notamment dans la formation de raies en émission que l'on discute dès le paragraphe suivant.

3.1.3 Fluorescence

Le phénomène de fluorescence de O^{++} , dont le doublet centré autour de 500 nm constitue la plus grande part, a fait l'objet d'études dès les années 1940 comme traceur des concentrations et les températures électroniques dans les nébuleuses gazeuses (*e.g.* Menzel & Haller, 1941).

Comme l'ont déjà remarqué plusieurs auteurs, la fluorescence est plutôt un phénomène rare pour les ions moléculaires doublement chargés. Il se trouve que c'est le cas pour $N\frac{1}{2}^+$ (Cossart *et al.*, 1985; Cossart and Launay, 1985; Olsson *et al.*, 1988; Ehresmann *et al.*, 2000). En ce qui concerne $O\frac{1}{2}^+$, Avakyan (1978*b*) rapporte la possible identification d'émissions aurorales autour de 243 nm qu'il attribue à la transition $A^3\Sigma_u^+ - X^1\Sigma_g^+$ dans $O\frac{1}{2}^+$: cette hypothèse n'a cependant jamais été confirmée. Dans le Tableau 6, les transitions de fluorescence dans $N\frac{1}{2}^+$ et O^{++} sont récapitulées avec leurs longueurs d'onde respectives. Les transitions de O^{++} sont situées dans la partie bleue du spectre visible et dans le proche ultraviolet.

L'état excité $D^1\Sigma_u^+$ de $N\frac{1}{2}^+$ est à la base de la fluorescence autour de 159 nm vers l'état neutre de $N\frac{1}{2}^+$ situé 7,8 eV plus bas (Ahmad, 2002; Olsson *et al.*, 1988). La durée de vie de l'état excité a été estimée à $6,0 \pm 0,5 ns$ d'après Olsson *et al.* (1988). Aucune désactivation collisionnelle n'aura ainsi le temps d'avoir lieu dans l'ionosphère terrestre compte tenu de cette très faible durée de vie. En utilisant les résultats de Ehresmann *et al.* (2003), on peut calculer approximativement qu'environ 10% des ions $N\frac{1}{2}^+$ créés par double photoionisation au pic de section efficace situé à 65 eV , sont produits dans l'état de fluorescence. Comme les concentrations en $N\frac{1}{2}^+$ atteignent au mieux 1 ion par cm^3 , on peut espérer qu'environ 0,1 ion par cm^3 est produit dans cet état.

On peut ensuite estimer l'intensité maximale escomptée le long de la ligne de visée en intégrant les productions ioniques sur la plage d'altitude considérée.

$$\mathfrak{F}_f \approx 10\% \times \int_{z_{min}}^{z_{max}} P_{tot}^{N_{\frac{1}{2}^+}}(z) dz \times 10^{-6} \quad (57)$$

où \mathfrak{F}_f est l'intensité de fluorescence en Rayleighs R ($1 R = 10^6 \text{ photons cm}^{-2} \text{ s}^{-1}$), et $P_{tot}^{N_{\frac{1}{2}^+}}(z)$ la production totale de $N_{\frac{1}{2}^+}$ (en $\text{cm}^{-3} \text{ s}^{-1}$) à l'altitude z .

L'intensité calculée varie de $0,6 R$ en conditions solaires calmes à quelques $2,3 R$ en condition active. Cette valeur est suffisamment élevée pour être détectée par des spectrophotomètres embarqués au regard de la précision actuelle des instruments, typiquement dans la gamme du déci-Rayleigh.

Tableau 6 – Longueurs d'onde de fluorescence et transitions radiatives pour $N_{\frac{1}{2}^+}$, $O_{\frac{1}{2}^+}$ et O^{++} .

Espèce	λ (nm)	Transition
$N_{\frac{1}{2}^+}$	158.7 – 159.3	$D \ ^1\Sigma_u^+(0) \rightarrow X \ ^1\Sigma_g^+(0)$
	158.9 – 159.4	$D \ ^1\Sigma_u^+(1) \rightarrow X \ ^1\Sigma_g^+(1)$
$O_{\frac{1}{2}^+}$	470	$A \ ^3\Sigma_u^- - X \ ^1\Sigma_g^+$
	443	
	417	
O^{++} (OIII)	500.824	$^1D_2 \rightarrow ^3P_2$ N_1
	496.029	$^1D_2 \rightarrow ^3P_1$ N_2
	436.443	$^1S_0 \rightarrow ^1D_2$
	232.166	$^1S_0 \rightarrow ^3P_1$
	166.615	$^5S_2^0 \rightarrow ^3P_2$
	166.081	$^5S_2^0 \rightarrow ^3P_1$

O^{++} , quant à elle, est de loin l'espèce bi-chargée la plus abondante dans l'ionosphère terrestre et par conséquent celle qui a le plus de chance d'être détectée dans les aurores ou les spectres diurnes à haute résolution. En dehors des transitions interdites N_1 et N_2 , trois autres raies existent dans la gamme UV (base de données NIST sur http://physics.nist.gov/cgi-bin/AtData/main_asd) sans jamais avoir été détectées dans les spectres. La durée de vie de l'état métastable $^5S_2^0$ de O^{++} a été mesurée à $1.22 \pm 0.08 \text{ ms}$ selon Johnson *et al.* (1984). Des comparaisons avec les résultats par spectrométrie de masse seront donc d'un grand intérêt dans les années à venir.

3.2 Conclusion de l'acte I

Tout au long de cet acte, nous avons pu montrer l'existence, pour l'instant théorique pour ce qui est des ions moléculaires, d'ions doublement chargés dans la haute atmosphère terrestre. Pour la première fois, les trois dications N_2^{2+} , O_2^{2+} et O^{++} ont été étudiés de manière cohérente et théorique avec comme point d'orgue la comparaison réussie avec les données satellites, malheureusement encore rares. Le modèle TRANSCAR, basé sur le formalisme de Boltzmann, a été modifié et complété pour permettre le calcul des productions d'ionisations primaire et secondaire. Pour calculer les concentrations, but ultime de ce voyage au pays des dications, nous avons construit un modèle photochimique simple dans lequel les constantes des réactions impliquées dans la destruction de ces ions ont été incluses. Ces entrées du modèle nous ont permis de mettre en place une collaboration fructueuse avec les laboratoires LCP et LURE, qui a abouti à des mesures en laboratoire les premières du genre. Nous mettons aussi l'accent sur la nécessité future de mesures complémentaires en laboratoire concernant les sections efficaces de double photoionisation de N_2 et O_2 .

Notre approche a ensuite été validée pour O^{++} par la comparaison avec les données du satellite Atmosphere Explorer au milieu des années 1970. Nous en avons déduit la constante de la réaction $O^{++} + O \rightarrow O^+ + O^+$, soit:

$$k_8 = 1.06 \pm 0.40 \times 10^{-10} \text{ cm}^3 \text{ s}^{-1},$$

une valeur qui demande une confirmation expérimentale à courte échéance.

Une fois validée, nous avons étudié les sorties du modèle par une approche de sensibilité des résultats aux paramètres géophysiques que sont l'activité solaire, les coordonnées géographiques et l'angle solaire zénithal. Les conditions les plus favorables à la création (et donc à la détection) d'ions doublement chargés ont pu ainsi être mises en valeur.

Un travail d'observations systématique devra suivre dans le futur afin de confirmer ces prédictions qui ont fait l'objet sur Terre, sur Mars et sur Titan d'études croisées. La prochaine étape reste la mise en valeur de transitions de raies dans les spectres en émission diurnes et nocturnes correspondant à la présence de ces étranges ions dans les ionosphères des planètes. Des études prometteuses sur Titan grâce à la sonde Cassini et la difficulté de faire correspondre mesures et modèles pourraient aboutir prochainement à la découverte de dications moléculaires. En outre la présence d'états excités pourrait jouer un rôle sur les constantes de réaction, une possibilité qui demandera un travail spécifique.

CHAPITRE 3

CONCLUSIONS ET PERSPECTIVES DE L'ACTE I

Cette étude est la troisième d'une série engagée sur Mars par Witasse *et al.*, 2002, et par l'équipe LPG/LCP sur Titan (Lilensten *et al.*, 2005a, 2005b) et sur Terre. Si l'on se remémore le travail de Fox & Victor (1981) et Ghosh *et al.* (1995) sur Vénus et de Brown *et al.* (1983) sur Io, satellite de Jupiter, nous pouvons déjà suggérer que la présence d'ions doublement chargés d'origine ionosphérique est une caractéristique commune aux planètes et satellites possédant une atmosphère dense.





Acte II
*Modélisation couplée des protons
et des électrons dans l'ionosphère
terrestre*

There are no answers – only choices.
Gibarian

Yeah... How about that?
Snow, in Solaris by Steven Soderbergh

Foreword

One of the ambitions of this PhD project lies in the building of a kinetic/fluid proto-electron model able to perform simultaneous computations of the suprathermal electrons and protons precipitating in the Earth's upper atmosphere.

A lot of effort has been cast since the discovery of hydrogen lines by Lars Vegard (Vegard, 1939) on the understanding of the effect of proton precipitation in the ionosphere. Extensive experimental surveys have been carried out about proton events identified as such from the ground through their specific Doppler-shifted Balmer emissions, and more recently on Lyman- α lines through satellites²⁸ (Gérard *et al.*, 2000 and 2001). In parallel, this gave rise at the end of the 1980s to a wealth of complementary theoretical and modelling approaches, which can be divided into two main groups, one dealing with Monte-Carlo statistical methods (Kozelov and Ivanov, 1992), the other with kinetic transport equations based on Boltzmann's formalism. Initiated numerically by Basu *et al.* (1993), the latter method is based on the resolution of the linear (H^+, H) transport equations, and was notably developed analytically by Galand and Lilensten (1996) including angular redistributions due to the magnetic mirroring and the neutral collisions.

On the other side, a great expertise already exists on the measure, modelling and interpretation of precipitating electrons in the ionosphere. Numerous kinetic approaches have been built such as the TRANSCAR model to account for these mechanisms, a model which was explained in detail in the first act of the present work with a special emphasis on double photoionisation mechanisms. Besides the impact of the primary photoionisation, the second aspect in the modelling of energy sources going on in the ionosphere is the long-studied electron precipitation mechanisms. TRANSCAR has already shown its ability to account for measured densities and temperatures in the ionosphere and through satellite data and radar measurements; it has been validated in a wide range of physical situations. Several

²⁸ The Lyman α line is absorbed in the atmosphere, making it impossible to measure from the ground. Thus it didn't play a role historically in the study of proton aurora.

ionospheric predictions from the model concerning ion/electron densities have then been made and tested.

Following Hardy's statistical study (Hardy *et al.*, 1989) stating that the proton contribution to the total auroral energy flux could reach 20 to 25% of that of the electrons, attempts have been made to describe dual proton/electron precipitation, but they were unable to take into account angular redistributions (Basu *et al.* [1993], Strickland *et al.* [1993]). From this point on, no self-consistent modelling combining the two phenomena has been attempted, except very partially by using in turn the individual electron and proton codes already existing.

In this theatrical act, we present a new dynamical approach of this recurrent issue, that we will call TRANS4 hereafter, based on the internal coupling of TRANSCAR with the model of Galand *et al.* (1997, 1998), both originally developed in the *Aéronomie-Ionosphère* team at LPG.

Avant-propos

Une des ambitions de ce projet de thèse réside dans la construction d'un code cinétique/fluide de transport couplé électrons/protons capable de calculer simultanément la contribution des électrons et des protons précipitant dans l'ionosphère de la Terre.

Depuis la découverte des raies de l'hydrogène dans le spectre des aurores (Vegard, 1939), un effort considérable a été consacré à la compréhension de l'effet des précipitations de protons. De nombreuses campagnes de mesures ont ainsi été menées sur la signature Doppler des raies Balmer et plus récemment depuis les satellites sur la raie Lyman- α (Gérard *et al.*, 2000 et 2001). Dès la fin des années 1980, ce sont les études théoriques en parallèle aux mesures expérimentales qui arrivent à maturité. Deux principales directions dans la modélisation du transport des protons sont alors privilégiées, modèles Monte Carlo (Kozelov et Ivanov, 1992) d'abord et modèles basés sur l'équation de transport de Boltzmann ensuite. La deuxième méthode, initiée par Basu *et al.* (1993), est fondée sur la résolution d'un système de deux équations couplées de transport pour le système (H^+, H). Ces équations couplées ont été en 1996 résolues analytiquement par Galand et Lilensten (1996) et incluent les redistributions angulaires d'origine magnétique et collisionnelle.

Parallèlement à ces efforts sur les protons en région aurorale, il existe déjà une grande expérience sur la mesure, la modélisation et l'interprétation des précipitations d'électrons dans l'ionosphère terrestre. De nombreuses approches cinétiques, tel le modèle TRANSCAR (voir Acte I), ont été développées, capables de rendre compte des mesures satellites ou radars de températures et de concentrations ioniques.

Hardy *et al.* (1989) ont pu montrer statistiquement que la part des protons dans le flux total d'énergie cédé à l'ionosphère pouvait atteindre 20 à 25% de la contribution des électrons : depuis lors, plusieurs tentatives ont été menées afin de

décrire les précipitations combinées électrons/protons, sans toutefois prendre en compte les redistributions angulaires (Basu *et al.* [1993], Strickland *et al.* [1993]). Par la suite, peu d'études des précipitations combinées ont été faites, excepté en utilisant tour à tour les modèles d'électrons et de protons déjà existants.

Dans l'Acte II, nous présentons une approche dynamique de ce problème, une approche que nous appellerons TRANS4 dans la suite, basée sur le couplage interne de TRANSCAR et du modèle de Galand *et al.* (1997, 1998), deux codes numériques développés dans l'équipe *Aéronomie-Ionosphère* du LPG.

Chapitre 4

Description of Trans4 and building of a coupled electron-proton code

Lancelot – *Look, my liege!*
Arthur – *Camelot!*
The others – *Camelot! Camelot!*
Servant Patsy – *It's only a model!*
Arthur – *Shh!*

Quote from **Monty Python and the Holy Grail**.

Contents

4.1	On the importance of proton precipitation: a brief history	128
4.1.1	Ground-based and rocket observations of hydrogen lines.....	128
4.1.2	A bit of theory: the proton transport modelling issue.....	130
4.2	The birth of TRANS4: coupling Protons and Electrons, a multi-coupled ionospheric model	133
4.2.1	Boltzmann's dissipative equation	133
4.2.2	Principles for an analytical solution (Galand <i>et al.</i> , 1997).....	138
4.2.3	The magnetic mirroring effect and collisional angular redistributions	140
4.2.4	Coupling electrons with protons	145
4.2.5	Computing the hydrogen emission line zenith profiles	147

Before explaining in detail the birth of the new model called TRANS4, the preliminary tests and its final application to a coordinated ESR-DMSP-optical case study, we will map out the present knowledge of the effect of proton precipitation, in an experimental and a theoretical way.

4.1 On the importance of proton precipitation: a brief history

4.1.1 Ground-based and rocket observations of hydrogen lines

As soon as 1939, Lars Vegard at the University of Oslo identifies for the first time in the auroral spectrum the signature of the two first hydrogen Balmer emission lines, H_α (656.3 nm) and H_β (486.1 nm). For him, these spectroscopic signatures are due to “*showers of hydrogen or to a kind of ‘hydrogen-radiation’ coming from the sun*” (Vegard, 1939). A few years later in Tromsø, Vegard and Tønsgberg (1944) detect a Doppler broadening and a shift in the diffuse Balmer H_β lines.

Almost ten years after his discovery, Vegard (1948) proposes the first interpretation and ascribes this shift to a Doppler effect due to neutralized protons precipitating down in the ionosphere, soon backed up by Gartlein (1950). High energy protons, originating from the magnetosphere and the solar-wind, precipitate along the geomagnetic field lines into the ionosphere where they encounter charge-exchange collisions, producing hydrogen atoms which in turn react with the ambient neutrals, as sketched in Fig. 4-1. Gartlein (1950, 1951) and then Meinel (1951) use high-resolution spectroscopy techniques to identify this shift in H_α , H_β and H_γ , which confirms Vegard’s first idea.

Definitive theoretical support is given experimentally to this interpretation by Chamberlain (1954a and 1954b) and Omholt (1956) and in 1965, Eather and Jacka (1966) make measurements in the magnetic horizontal and magnetic zenith directions: H_β appears to be unshifted in the horizontal directions, while it experiences a 5 to 7-Å blue shift in the zenith direction, together with a significant red shift of the tail of the distribution.

Extending their study to the polarization of the Balmer lines as well, they find no polarization for H_β and the thermo-ionospheric N_2^+ (4709 Å) bands and OI(6300 Å) lines they observe on occasions, but they point out that one possible cause of this relative failure might have been the lack of spectral resolution.

Thenceforth, the interpretation of hydrogen lines seems clearer: the blue shift is due to the incoming protons precipitating along the geomagnetic field lines, while the redshifted wing of the distribution originates from the H atoms escaping upwards by magnetic reflection.

Eather then made a very interesting historical review on the successive steps that led to the understanding of hydrogen emission lines at the time (Eather, 1967a).

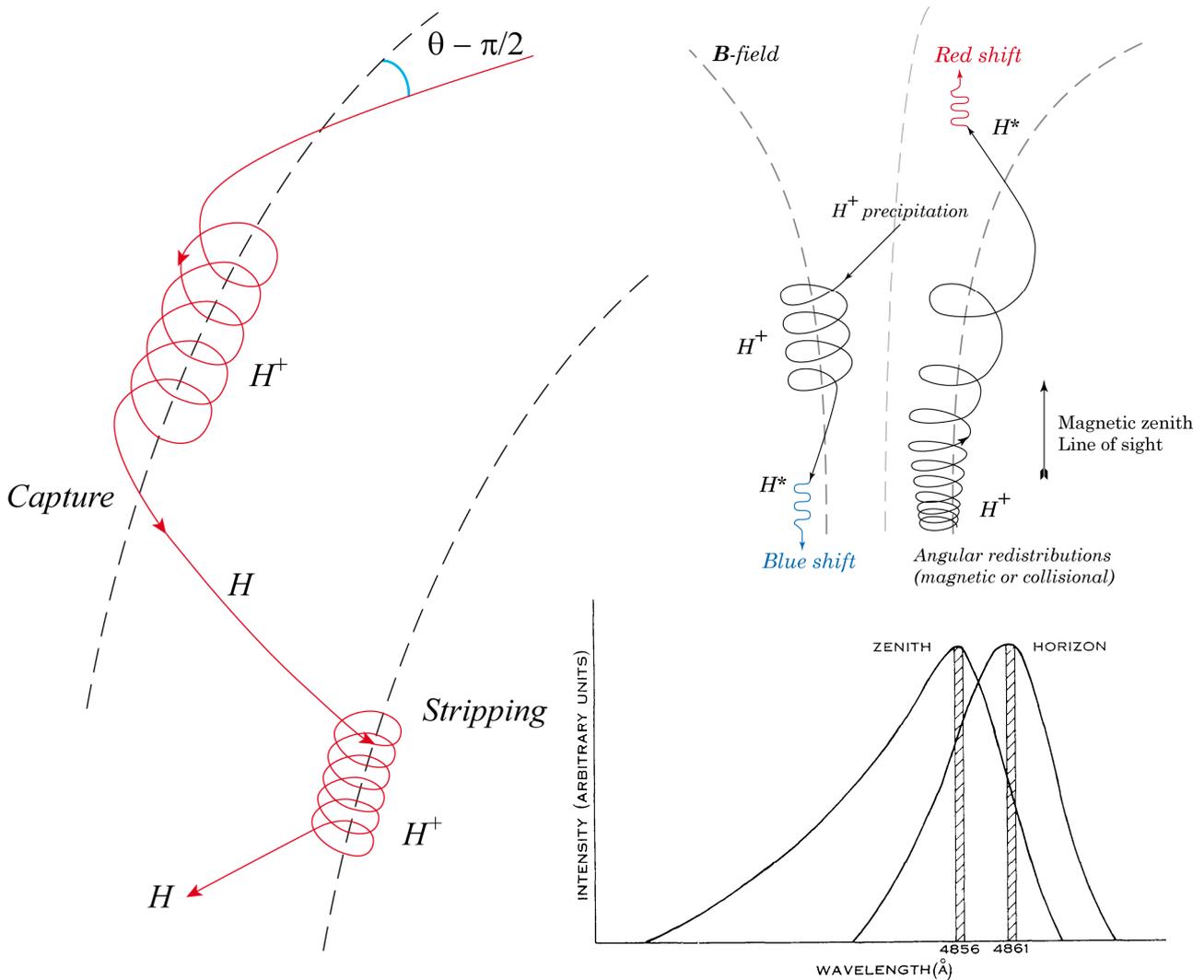


Fig. 4-1 – Proton precipitation and beam spreading from capture $H^+ + e^- \rightarrow H$ to stripping $H \rightarrow H^+ + e^-$ (left) and Doppler H_β intensity profile (bottom right) measured along magnetic zenith and horizon at the Australian Antarctic station (after Eather and Jacka, 1966). The proton pitch angle is θ and the magnetic field lines are drawn as dashed lines. When neutralized, the particle is not bound any more to the B -field, and its descent in the ionosphere is only constrained by the hydrogen scale height. The profiles of the H_β show no shift in the line in the magnetic horizon direction, while in the zenith profile a blue-shifted peak associated to a wide wing appears 5 \AA shorter to the initial laboratory wavelength. On the top right of the figure, we have sketched Vegard's interpretation of the blue and red shifts from H^+ precipitation and angular redistributions. The process $H^+ + M \rightarrow H^* + M^+$ gives birth to the excited state H^* responsible of the emissions, where M is a neutral ambient species. For clarity, the magnetic mirroring effect was not depicted in these sketches.

The zenith Doppler-shifted profiles indicate that field-aligned protons are travelling up to 400 km s^{-1} in the upper atmosphere when precipitating²⁹.

With the development of specific interference filters with narrow passbands (of a few Å), new high-resolution surveys were made from the 1970s onwards. Scanning spectrophotometers such as the Ebert-Fastie configurations coupled with CCD detectors were favoured in the following years (Deehr *et al.*, 1998). H_β lines have also received a wide interest as no contamination from overlapping emissions occur, contrary to H_α , subject to the influence of $OH(6-1)$ bands.

Several of these instruments dedicated to H_α and H_β lines have been installed at Svalbard situated in the northern hemispheric cusp region, in Longyearbyen and in Ny-Ålesund, and have been the basis of many observational and modelling studies (Sigernes *et al.* [1994], Sigernes [1996]). These high-resolution instruments showed that little variation of the auroral brightness with latitude is observed in the line profiles, except in the daytime polar cleft where profiles usually exhibit narrower shapes (Lorentzen *et al.*, 1998). Removing twilight contamination has also been recently the subject of an important motivation (Robertson *et al.*, submitted, 2006) which allows to draw new perspectives on the study of H_β lines in conditions where the solar zenith angle is above 90° , a condition often encountered at Svalbard.

Simultaneously to these ground-based efforts, sounding rocket campaigns have been launched to study the proton aurora through its Balmer emission lines (Søraas *et al.*, 1974): the interest of such in-situ campaigns lies indeed in a new parameter we can get, *i.e.* the altitude emission line profiles over the large horizontal extent of the proton aurora. Since then, many rockets have been built and launched to map *in situ* the hydrogen lines (see Søraas *et al.*, 1994 and 1996). Coordinated experiments between rockets, ground-based spectrophotometers, incoherent scatter radars and orbiting satellites are the next step in the systematic study of proton events. In the North of Norway, the Andøya rocket range near the Tromsø EISCAT UHF radar is particularly well designed for such ambitious experiments. The SvalRak launch site in Ny-Ålesund at Svalbard, with its proximity to the EISCAT Svalbard Radar (ESR), is a great alternative as well.

4.1.2 A bit of theory: the proton transport modelling issue

After the first theoretical background for emission lines established by Chamberlain (1957) and Omholt (1956) who derived for the first time the expression for magnetic horizontal profiles, Eather and Burrows (1966) computed the hydrogen line profiles in a dipole field. They introduced the magnetic mirroring effect and

²⁹ With the well-known formula of the classical Doppler-Fizeau shift: $\lambda = \lambda_0 (1 + \frac{v}{c})$ where v is the line-of-sight velocity of the moving source, λ the shifted wavelength observed and λ_0 the unshifted reference line.

showed that in this case a redshift component would be expected, soon to be clearly identified in the spectra.

The quantitative treatment of (H^+, H) precipitation began at the same time with Monte Carlo simulations (Davidson, 1965) which were able to characterize the transverse spreading of an initial proton beam due to the charge-exchange processes, as shown in Fig. 4-1 (*left*). Following Eather (1967*a* and 1967*b*) and Edgar *et al.* (1973, 1975), Henriksen (1979) assumed a plane parallel geometry together with forward scattering: he used the continuous slowing-down approximation (CSD) by introducing a continuous loss function $L(E)$ to account for the energy loss of a wide stream of precipitating protons. This approximation is justified by the low energetic losses encountered in a collision with a neutral in comparison to the initial energy of the precipitating particles.

Following these huge steps, proton transport modelling became a major concern of the community in the beginning of the 1980s, and notably when Jasperse & Basu (1982) described the spreading of a proton beam (first put forward by Johnstone [1972] and then Iglesias and Vondrak [1974]) in a single-constituent N_2 atmosphere due to the charge-exchange collisions $H^+ \leftrightarrow H$ (stripping and capture). They solved numerically Boltzmann's classical linear transport equation and computed a correction factor of $\varepsilon \approx 0.75$ due to the spreading effect accounting for the damping along the line of sight of the particle flux computed by the model. This damping factor is valid for an arc 200-*km* wide in latitude under roughly 300 *km* where the excitation/ionisation reactions begin to play a significant role in the spreading of the initial beam.

Before 10 years, Basu *et al.* (1987, 1990, 1993) and Strickland *et al.* (1993) had designed step by step a proto-electron-hydrogen model based on kinetic transport equations through an enhanced numerical scheme. However still no angular redistributions due to either magnetic or collisional mechanisms could be taken into account, which made the confrontation between spectroscopic measurements and the model impossible to perform. In 1993 and though assuming forward scattering, Shen (1993) in his PhD thesis introduced the magnetic mirroring to account for the observed Doppler line red shifts but failed to add collisions. His 1st-order finite difference model was however not confirmed in the following years. Another track was explored at the same time using collision-by-collision degradation Monte Carlo schemes: Kozelov and Ivanov (1992, 1994) studying monoenergetic proton beams and then Lorentzen *et al.* (1998), which allowed dealing with the Doppler profiles and beam spreading effect. Contrary to the continuous slowing down approximations often used in kinetic transport modelling, the Monte Carlo methods assume discrete stochastic energy transfers, ruled by probability laws. Thanks to this method, Synnes *et al.* (1998) calculated the hydrogen line profiles for an arbitrary angle to the magnetic field and the percentage of energetic neutral atoms created in an N_2 atmosphere through charge-exchange collisions.

In 1996, Galand & Lilensten (1997, 1998) solved for the first time the dissipative proton-hydrogen kinetic Boltzmann equation. The resolution consists of an analytical solution of the coupled (H^+, H) system, with the introduction of dissipative forces so that the Boltzmann equation that writes:

$$\frac{\partial f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla_{\mathbf{r}} f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) + \nabla_{\mathbf{v}} \left(\frac{\mathbf{F}}{m} f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) \right) = \mathcal{C}(f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)), \quad (58)$$

could be solved directly as an exponential of matrix. Here, $f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)$ is the distribution function of the protons depending on the position vector \mathbf{r} , the velocity \mathbf{v} , and the time t . \mathcal{C} is the collision operator, related to the local interaction between particles within the Debye length³⁰. They justified the continuous slowing down approximation and added a continuous loss function depending on energy $L(E)$ similar to the electrons': precipitating particles are slowed down in the medium they traverse. Galand & Lilensten (1998) managed in this way to simplify the problem and include angular redistributions of both magnetic (the magnetic mirroring) and collisional origin (thus without the forward scattering approximation). As a main output of the model, hydrogen emission line profiles were computed with both blueshifts and redshifts, which opened up a new era in the understanding and modelling of the entire processes related to proton precipitation. Another result was that magnetic mirroring is shown to be predominant at higher altitudes where the densities are lower, while the collisions play the major role in the redistribution of angles for fluxes at altitudes below 250 km, generating an upward (H^+, H) flux responsible for the red-shifted tail of the line profiles. The beam spreading effect was taken into account through Jasperse & Basu's (1982) correction factor ε .

A wealth of different experimental and theoretic studies have been carried out up to now (Jasperse [1997], Lorentzen [2000], Lummerzheim and Galand [2001], Solomon [2001], Chakrabarti *et al.* [2001], Fang *et al.* [2004], Hubert *et al.* [2004], Galand and Chakrabarti [2006]). A review of proton transport modelling was presented in a JGR special section and can be usefully consulted (Basu *et al.*, 2001). Another combined approach has been attempted by Lilensten *et al.* (1998), taking in turn and manually the outputs of the proton code into the TRANSCAR model to study a proto-electron event. This method is not satisfactory in the way that protons and electrons are completely decoupled, and do not influence each other in return.

³⁰ The Debye length, named after the Dutch physicist Peter Debye (1884–1966) is expressed as: $\lambda_D \equiv \sqrt{\frac{\varepsilon_0 k_B T_e}{e^2 n_e}}$, where k_B is Boltzmann's constant, T_e the electron temperature, e the charge of the electron, and n_e the number density of the electrons. Above a distance of λ_D (out of a volume called the Debye sphere) electric charges can be shielded out by the presence of a cloud of opposite charge: they do not interact with each other, which makes in the end the particles move collectively in the plasma. Typically, the Debye length in the ionosphere is of the order of 1 mm, which ensures the individual behaviour of the particles in the plasma.

I will then propose in the following paragraphs a new theoretical approach coupling the two codes. TRANS4 is the name, as we now have a tool coupling 4 codes in one, a kinetic electron code, a kinetic proton code, a fluid model and a convection model. *En route* to TRANS4:

4.2 The birth of TRANS4: coupling Protons and Electrons, a multi-coupled ionospheric model

Following the study of Moen *et al.* (1998), the motivation to build a self-consistent proton-electron model is clear: no tools have been developed so far which have allowed to deal with protons and electrons at the same time. The need to study combined events has become of major importance to understand quantitatively the effects of energy injection of proton and electronic origin in the upper atmosphere of planets. This new dynamism on the question is not popping up today by mere coincidence: at the very moment when we have in action one of the most comprehensive networks ever available of ground-based and satellite instruments probing simultaneously the ionosphere, the theoretical models accounting for electrons on the one hand and energetic protons on the other hand are reaching a long-sought maturity.

In the next paragraph, I will describe the main contribution of the proto-electron model TRANS4 and its effective construction from the original kinetic models of Lilensten *et al.* (2002) and Galand *et al.* (1998).

4.2.1 Boltzmann's dissipative equation

As briefly explained earlier in the manuscript and in the historical review, the description of proton transport (and by extension that of the suprathermal electrons as well) in the Earth's auroral ionosphere takes as a starting point Boltzmann's dissipative equation:

$$\frac{\partial f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla_{\mathbf{r}} f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) + \nabla_{\mathbf{v}} \cdot \left(\frac{\mathbf{F}}{m} f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) \right) = \left(\frac{\delta f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)}{\delta t} \right)_{coll} = \mathcal{C}(f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)), \quad (59)$$

The (\mathbf{r}, \mathbf{v}) couple of position-velocity vectors represents the six-dimension phase space in which the distribution function $f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)$ of the energetic protons³¹ is immersed. The main condition for such a microscopic kinetic description is that there are many more available states than the number of particles, *i.e.* $h^3 f(\mathbf{r}, \mathbf{v}) \ll 1$. The collision operator $\mathcal{C}(f)$ describes the temporal evolution of $f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)$ under the effect

³¹ The units of $f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)$ is usually $cm^{-6} s^3$.

of binary collisions, in other words the sink due to elastic and inelastic collisions with neutrals. \mathbf{F} is the sum of all external forces undergone by the system, such as the Lorentz force or the thermal heating in the case of the electrons. The difficulty of such an equation lies in the collision term where we need to discriminate between indirect sources (collisions) and direct sources (external sources like precipitation). The indirect sources themselves contain dissipative forces, *e.g.* the friction between suprathermal and ambient electrons ('thermal heating'), which effect is to bring energy to the system by changing the volume element $dV = d^3r d^3v$ of the phase space. Thus, the demonstration of this equation brings in the Jacobian determinant that "resizes" accordingly the volume element³². For the classical non-dissipative Boltzmann equation, the system is conservative: the Jacobian then simply equals 1.

- **Introducing the proton loss function**

By analogy with the thermal heating for the electrons (Stamnes and Rees, 1983), Galand and Lilensten (1996) proposed a new resolution of equation (59), consisting in the introduction of a continuous loss function $L(E)$ as an additional external force:

$$\mathbf{F}_{\text{CSD}} = - n_k L(E) \bar{\mathbf{u}} \quad (60)$$

where according to Miller and Green (1973), $L(E, z) = n_k(z)^{-1} \left(\frac{dE}{d\ell} \right)$.

dE is the average energy lost by a particle (proton or electron) traversing a gas of density n_k on a distance $d\ell$, while moving in a direction $\bar{\mathbf{u}}$. This approximation, known as the Continuous Slowing-Down Approximation (CSDA), is aimed at describing the energetic degradation of protons travelling in the initial neutral gas in terms of a continuous friction.

Technically, the energy degradation which was previously contained in the collision operator can be reinterpreted as an external force appearing in the divergence operator $\nabla_v \left(\frac{\mathbf{F} + \mathbf{F}_{\text{CSD}}}{m} f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) \right)$. Regarding the angular redistribution, it remains in the collision operator so that we decouple angles and energies.

The justification of this physical idea is easy. Galand *et al.* (1997) showed that the average energy loss is negligible compared to the initial incoming energy of the particles. Threshold energy interactions do not occur in this case, which enables to use a continuous degradation scheme for the energy lost during excitation, ionisation, elastic scattering and charge-changing reactions.

³² The *Jacobian matrix* is the matrix of all first-order partial derivatives of a vector-valued function. The *Jacobian* is the determinant of the corresponding squared matrix and, according to the inverse function theorem, as a multiplicative factor, ensures the injectivity when changing from one basis to another.

In the model, we use a loss function relative to a process β between a particle i – proton or H atom – of energy E and a neutral k (Edgar *et al.*, 1973):

$$L_{k,i}^{\beta}(E', \mu' \rightarrow \mu) = W_{k,i}^{\beta}(E', \mu' \rightarrow \mu) \sigma_{k,i}^{\beta}(E') \zeta_{k,i}^{\beta}(E', \mu' \rightarrow \mu) \quad (61)$$

where $\zeta_{k,i}^{\beta}$ represents the phase function which models the angular redistribution of the energetic particle i from μ' to μ during the process β (including charge-changing reactions) with a neutral species k . $W_{k,i}^{\beta}$ and $\sigma_{k,i}^{\beta}$ are the energy loss and the cross sections associated to each mechanism and species.

Finally, the expression of the dissipative force for species i becomes:

$$\mathbf{F}_i = -n_k(s) L_{k,i}^{\beta}(E', \mu' \rightarrow \mu) \bar{\mathbf{u}} \quad (62)$$

Classically, the mechanism of capture (*i.e.* $H^+ + M \rightarrow H^* + M^+$) and stripping (*i.e.* $H + M \rightarrow H^+ + M^* + e^-$) will be labelled as ‘10’ and ‘01’ respectively.

• Underlying hypotheses

As a mirror paragraph to the TRANSCAR kinetic modelling explained in § 1.3.1, it is not useless to examin once again the physical assumptions made, and extend them to the updated TRANS4 model. Indeed, the Boltzmann equation for the (H^+/H , e^-) can be simplified by a few hypotheses, regarding the dimensions and the geometry of the problem:

- ⌘ Plane parallel geometry: The atmosphere is stratified perpendicular to the geomagnetic field lines \mathbf{B} , an assumption usually valid at high latitudes. The result is that we drop two spatial dimensions at the same time to end up with a single scalar s describing the altitude profile along \mathbf{B} .
- ⌘ External forces, such as the macroscopic electric field’s $e \mathbf{E}_M$ or the gravity force $m\mathbf{g}$, are neglected.
- ⌘ The beam spreading effect is taken into account by a damping factor $\varepsilon = 0.75$ computed by Jasperse & Basu (1982) and initially derived from the expressions given by Iglesias & Vondrak (1974).
- ⌘ The steady state is assumed for the fluxes, which means that when a particle is destroyed, another is created to replace its loss, or in other words, the same particle is absorbed *and* produced at each step, particularly useful in the case of charge-changing reaction (Lummerzheim and Lilensten, 1994).

⌘ Continuous Slowing-down Approximation (CSDA): following the method already used for electron transport, Galand *et al.* (1997) introduced this well-verified assumption to deal with the collision operator, now reduced to precipitation sources (electrons, photoelectrons and protoelectrons³³) and absorption/creation of the particles considered through collisions with the neutrals.

For the moment, in the experimental reality, it is impossible to get the distribution function associated to an electron/proton precipitated flux. On the other hand, what we measure effectively by satellite is the incident particle fluxes (§ 6.1.5). We then need to get a proper observable to compare directly the model computations with these measured fluxes.

The passage from the distribution function $f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)$ in $cm^{-6} s^3$ to the observable suprathermal electron/proton fluxes $\Phi(s, E, \mu)$ in $cm^{-2} s^{-1} eV^{-1} sr^{-1}$ is a well-known technique used since the beginning of the 1980s (Stamnes & Rees, 1983). s represents here the space variable along \mathbf{B} , E the energy of the particle considered, and μ the cosine of the pitch angle of the incoming particle.

The variable change can be written in this case:

$$f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) = \frac{m}{v^2} \Phi(s, E, \mu) \quad (63)$$

where the plane parallel geometry is applied ($\mathbf{r} \rightarrow s$ and $\mathbf{v} \rightarrow E, \mu$), together with the stationary assumption (Φ independent of t).

- **Expression of Boltzmann's dissipative transport equation in Φ**

Following Galand *et al.* (1997, 1998), the coupled set of transport equations describing the degradation of a (H^+, H) beam in the Earth's ionosphere under the assumptions developed above, can then be written as:

³³ *i.e.* electrons created by ionisation of neutrals by precipitating protons.

The first term (1) in equation (64) describes the evolution of the flux H^+ along a magnetic line of force. The term (1*m*) relates to the magnetic mirroring depending on H^+ fluxes and pitch angles θ such as $\mu = \cos \theta$. Term (2) introduces the dissipative forces modelling the energy redistributions related to the α reactions encountered with the neutrals k (N_2 , O_2 and O), which can be either excitation (*ee*), ionisation (*ei*) or elastic distribution scattering (*ed*). This term is integrated over all pitch angles μ' .

The production term (3) represents the energy and angular redistributions of the hydrogen flux related to the charge-changing reaction $H + M \rightarrow H^+ + M^* + e^-$ (stripping) where M is a neutral species. On the right-hand member, term (4) describes elastic collisions leading to the annihilation of H^+ . Terms (5) and (6) account for internal sources due to α processes (excitation, ionisation, elastic scattering) and charge-changing reactions. The same comments apply to equation (65) dedicated to hydrogen atoms by replacing H^+ by H . The magnetic mirroring is not present as it does not affect atoms, while the charge-changing reaction is the capture process, that is $H^+ + M \rightarrow H^* + M^+$.

The set of cross sections used for excitation and ionisation in the model are coming from Basu *et al.* (1987). The elastic cross sections for all neutral species are taken from Kozelov & Ivanov (1992), a formula valid for $E > 100$ eV and for N_2 but extended to the other species for want of any more reliable data.

4.2.2 Principles for an analytical solution (Galand *et al.*, 1997)

The analytical solution of Galand & Lilensten (1996) for the set of equations (64–65) lies in the discretization in energy and angle on a two-dimensional grid and then the integration for each altitude of the computed fluxes.

The partial derivatives are first differentiated in energy and angle which transforms the complex set of equations into a much simpler matrix system, which takes the form of a linear first-order differential system:

$$\frac{\partial \Phi}{\partial s} = \mathcal{A} \cdot \Phi + \mathcal{B} \quad (66)$$

The unknown Φ represents the downward or upward fluxes of protons and H atoms on the energy grid and the half-angle grid. The large matrix \mathcal{A} can be rearranged as a sparse³⁴ square matrix of dimensions (nm, nm) , where n is the number of energies and m the number of angles, taking the form:

³⁴ A sparse matrix is a matrix that has relatively few non-zero elements. Therefore it can be sometimes convenient to characterize them as a list of non-zero indexes and associated elements. In French, sparse matrices are referred to as “matrices creuses”.

$$\mathcal{Q} = \begin{pmatrix} \square & & & & 0 \\ \square & \square & & & \\ & \ddots & \ddots & & \\ & & \ddots & \ddots & \\ 0 & & & \square & \square \end{pmatrix} \quad (67)$$

The matrix \mathcal{Q} has then a structure in diagonal and sub-diagonal energy blocks with each energy block having the dimension m . It expresses the energy degradation undergone by protons or H atoms through collisions with the ambient neutrals in the case of no angular redistributions ($\mathfrak{B} = 0$). The vector \mathfrak{B} couples downward and upward fluxes and is referred to as the forcing term: it explicitly depends on the corresponding upward (respectively downward) flux when searching the solution for the downward (respectively upward) flux. For each altitude level, the general solution can then be written as:

$$\Phi(s) = e^{(s-s_0)\mathcal{Q}} \left(\Phi_{s_0} + \mathcal{Q}^{-1} \cdot \mathfrak{B} \right) - \mathcal{Q}^{-1} \cdot \mathfrak{B} \quad (68)$$

The limit condition is that when computing the downward fluxes, Φ_{s_0} is taken as the value of flux at the upper level, and conversely when solving the upward fluxes, Φ_{s_0} is taken as the flux lower level value.

The numerical method of resolution involves the computation of matrix exponentials, an issue that has been addressed for more than 20 years concerning differential linear systems³⁵. Generally speaking, the exponential of a matrix is full even if the matrix itself is sparse. Sidje (1998) built an optimized mathematical algorithm which pertains to the resolution of matrix exponentials; more precisely it calculates the action of a large sparse matrix on an operand vector. In our case, matrices can have typically 1000×1000 elements (for 100 energy levels, 10 angles).

In the end, the profiles of downward and upward (H^+ , H) fluxes can be determined. Several outputs can be then deduced, which will be explained further on in § 4.2.4, as they are closely related to the coupling procedure in TRANS4. A few mechanisms now need be described, which will ultimately pave the way for the modelling of hydrogen Balmer lines (§ 4.2.5).

³⁵ Sparse matrices have been for instance used in equations governing the evolution and dynamics of populations, in harmonics issues in electromagnetism, or in evaluating performances in computer engineering.

4.2.3 The magnetic mirroring effect and collisional angular redistributions

- **Magnetic mirroring**

The mirroring effect (term $1m$ in equation [64]) is one of the predominant mechanisms in the effective trapping of particles in the outer ionosphere, populating a region called the Van Allen belts. It can arise when a longitudinal gradient appears in the magnetic field, and such is the case for the geomagnetic field when moving closer to the Earth (Fig. 4-2).

When looking at the equations of motion of a charged particle (proton or electron) immersed in a magnetic field, one can find physical quantities that remain constant in time over the particle's path. Such a constant of the motion is called an *adiabatic invariant* noted \mathcal{J} , which most general formulation follows Poincaré's definition:

$$\mathcal{J} = \oint_{\mathcal{C}(t)} \mathbf{p} \, d\mathbf{r} \quad (69)$$

where all the points on the closed curve $\mathcal{C}(t)$ in phase-space (momentum $\mathbf{p} = m \mathbf{v}$, \mathbf{r}) move according to the equations of motion.

The starting point of the mirroring effect is the convergence of magnetic field lines ($\text{div } \mathbf{B} = 0$) due to a gradient in the magnetic field. It can be shown that the magnetic moment μ_{mag} , given by the expression:

$$\mu_{mag} = \frac{m v_{\perp}^2}{2B} = I \quad (70)$$

is an adiabatic invariant for the motion of a particle at a velocity v_{\perp} perpendicular to a magnetic field line, also called the *first adiabatic invariant* I .

It tells that the more the magnetic field decreases, *i.e.* when a particle is moving away from Earth (point (1) on Fig. 4-2), the more v_{\perp} slackens up, which makes the Larmor gyroradius of the particles increase accordingly.

A second invariant rules the longitudinal motion (*second invariant* J) and is defined by (Fig. 4-2, *left*):

$$J = \oint m v_{\parallel} \, ds \quad (71)$$

A third conservation law steps in to close the conditions, which is the energy conservation stating that:

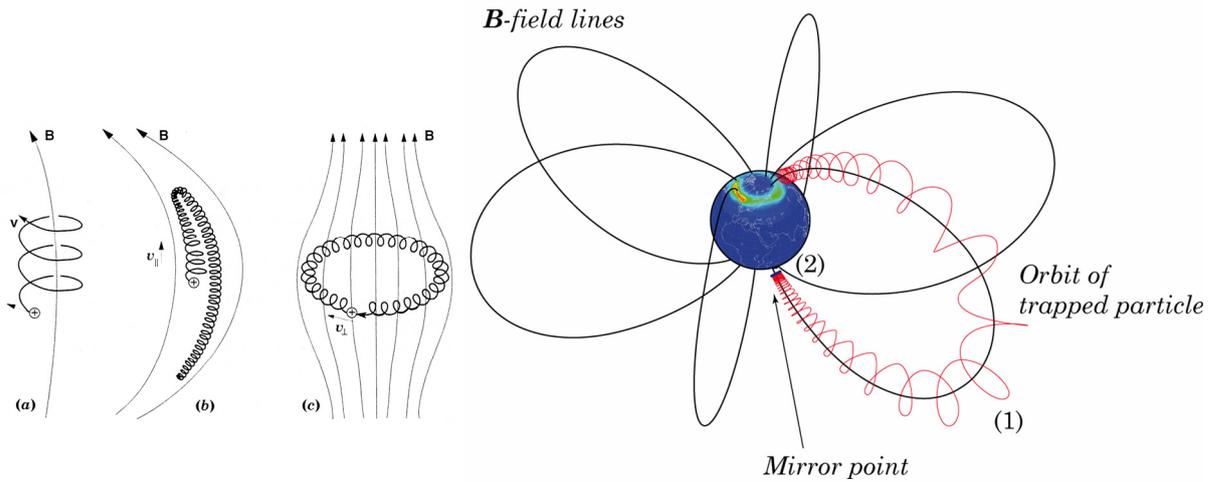


Fig. 4-2 – Orbit of magnetically trapped particle in the geomagnetic field (right) and illustration of the three types of periodic motion in a magnetic field (left, after Fälthammar, 1999). When a charged particle intersects the geomagnetic field with a grazing pitch angle θ (1), it can penetrate deeply in the ionosphere. Spiralling about the B -field lines, the particle is then experiencing a stronger B value as it goes deeper in the ionosphere (2). At the so-called mirror point (in blue), it can be reflected from one hemisphere to another, until collisions in the lower dense ionosphere destroys this fragile equilibrium. On the right side, gyration (a), longitudinal (b) and azimuthal (c) drifts are sketched, each related to an adiabatic invariant (see text).

$$E = \frac{1}{2} m v^2 = \frac{1}{2} m (v_{\perp}^2 + v_{\parallel}^2) \quad (72)$$

Combining equation (70) and equation (72), we can see that when B is increasing, v_{\perp} increases as well (1st invariant). Accordingly, owing to the energy conservation, v_{\parallel} must decrease. At a certain location called the mirror point (point (2) on Fig. 4-2), $v_{\parallel} = 0$, the particle cannot go further down into the ionosphere because all the longitudinal motion has been converted to gyration motion. If a collision occurs, the balance is broken and the particle has no other choice than to go up again along the line to the other hemisphere. The mirror point acts as if the particles were reflected from one hemisphere to the other, after being stopped by the convergence of magnetic field lines forming an impassable “bottleneck”.

Electrons are going deeper into the ionosphere than protons for same pitch-angles and initial energies: the mirroring mechanism is particularly effective for protons at altitudes above 250 km.

In 1960, Northrop & Teller (1960) showed that a third flux invariant could be conserved concerning the azimuthal drift of the particles (Fig. 4-2, left). This invariant, noted K , states that the total magnetic flux Φ_m enclosed by a drift surface

(due to the precession of particles around the Earth) is constant during motion, modulating the motion of Van Allen belts, so that:

$$K \simeq e \oint A_\varphi ds = e \Phi_m \quad (73)$$

where A_φ is the magnetic vector potential³⁶. Φ_m is only constant in the case where the magnetic field varies on time-scales much longer than the drift period, which is likely to be true when the magnetosphere is relatively quiescent, *i.e.* when there are no geomagnetic storms in progress. Indeed, the mean azimuthal drift period for energetic protons and electrons is of the order of an hour, which makes this invariant seldom verified in magnetospheric plasma.

The mirroring effect is very much influenced by the angle at which the particle is penetrating the magnetic field lines. Some short considerations can help us put some constraints on the pitch-angle distribution, provided that $v_\perp = v \sin \theta$. For downward fluxes, the corresponding pitch-angles are larger than $\pi/2$. The strongest magnetic field B_{max} that the particle can penetrate into is given by the condition that $\theta = \pi/2$ (the particle turns around):

$$\frac{mv^2 \sin^2 \theta}{2B} = \frac{mv^2}{2B_{max}}, \quad i.e. \quad B_{max} = B/\sin^2 \theta. \quad (74)$$

Conversely, this means that if the magnetic mirror field has the maximum field strength, it can trap all particles having a pitch angle so that:

$$\theta_{min} > \sin^{-1}(\sqrt{B_{min}/B_{max}}) \quad (75)$$

defining a so-called *loss cone* separating trapped from non-trapped particles. Particles which pitch-angle lies inside the loss cone will precipitate in the ionosphere and traverse the mirror point without seeing it. To get protons down in the ionosphere, we have then a compromise between a small enough pitch-angle to penetrate deep into the ionosphere and a big enough one to match the loss cone specifications.

In a general form, the mirror effect acts higher in altitude where the mean free path $l = \frac{1}{\sum_k n_k \sigma_k^E(E)}$ for each particle is important enough. Below 300 km, the densities are higher and collisions play the major role in the redistribution of angles: the magnetic mirroring becomes negligible in front of other processes. Kozelov (1993) investigated with a Monte Carlo method the precipitation of monoenergetic isotropic

³⁶ The azimuthal vector potential is defined as: $p_\varphi = mv_\varphi + e A_\varphi$.

protons, spanning from 1 to 100 keV , and the variation of the pitch-angle of hydrogen atoms with regards to the geometry of the geomagnetic field. He concluded that the magnetic mirroring could be efficient at lower altitudes, and that field geometry mechanisms on the hydrogen atoms could have a significant influence on the upward flux.

In the code, the magnetic mirroring term can be simplified assuming that B is the dipolar magnetic field:

$$\frac{1}{B} \frac{dB}{ds} = \frac{-3 |\sin \delta|}{R_{\otimes} + z} \quad (76)$$

where R_{\otimes} is Earth's radius and z the altitude in the ionosphere. δ is the dip angle, *i.e.* the angle between the magnetic field and the horizontal. It varies less than 0.8° from 90 to 700 km in the auroral zone.

As soon as 1974, Søråas (1974) showed up-flowing particles at altitudes where geometric effects and magnetic mirroring were thought to be negligible ($< 200 km$), which called for a new mechanism to be considered in the generation of low-altitude upward fluxes, namely angular redistribution of collisional origin.

- **A note on collisional angular redistributions**

At altitudes less than 200 km in Earth's ionosphere, energy losses are performed mainly through ionisation and excitation. A lot of measurements are available on differential cross sections (Van Zyl *et al.* [1978], Newman *et al.* [1986], Gao *et al.* [1990]). They showed that angular redistributions occur in charge conservation as well as in charge-changing reactions while the phase function varies with the energy of the incident particle, angular redistributions becoming more important with decreasing energies. In a first approximation, following these results, we can assume that the angular redistribution is negligible above 1 keV . Thus, the angular redistributions are applied in the proton solver of TRANS4 below 1 keV while forward scattering is assumed above this threshold.

The phase function is taken equal to the screened Rutherford formula for electrons (Stamnes, 1980). We assume a scattering angle of $\mathcal{G} = \mu\mu' + \sqrt{1 - \mu'^2} \sqrt{1 - \mu^2} \cos(\varphi - \varphi')$, where μ and μ' are the cosine of the before- and after-collision pitch angles, φ and φ' are azimuthal angles before and after collision. Then the phase function can be written:

$$\xi(\cos \mathcal{G}) = \frac{4\varepsilon(1 + \varepsilon)}{(1 + 2\varepsilon - \cos \mathcal{G})^2} \quad (77)$$

ε , called the 'phase shift', is an energy-dependent screening parameter, which value is assumed to be constant below 1 keV , with $\varepsilon = 1 \times 10^{-3}$ (Galand *et al.*, 1998).

To study the effect of such a parameter ε , it is possible to increase the energy threshold under which angular redistributions are taken into account: this idea will be exploited in our discussion in § 6.2.1. Other parameterizations for the phase function can be chosen, namely Maxwellian distributions with an adjustable standard deviation σ_{sd} (comprised between 0 and 1), in order to illustrate specifically the impact of angular redistributions on the Balmer line spectra, regarding the deviation to the forward scattering approximation.

- **Beam spreading**

Beam spreading appears when charge-exchange collisions with atmospheric constituents create energetic neutral hydrogen atoms, resulting in a broadening of the initial relatively collimated beam of protons.

Using probabilistic considerations, Johnstone (1972) and then Iglesias & Vondrak (1974) computed expressions for the atmospheric spreading on the flux and angular distribution of protons in a homogeneous auroral arc situated at an altitude of 300 km. The main assumption is that the horizontal spreading is determined by the length of atmosphere traversed by the first hydrogen atom created, or in other words the length of the first neutral ‘segment’ of the incident particle trajectory. They calculated the angular distribution of an initially isotropic proton beam and its conversion to an auroral arc of given width.

As explained before, the beam spreading is taken into account in TRANS4 as a damping factor applied to the input (H^+, H) fluxes following the recommendation of Jasperse & Basu (1982). For an auroral arc of infinite extent in the east-west direction and of width Δ in the north-south direction, they derived the sought correction factor. At first order we have:

$$\varepsilon(E, \mu) \simeq \frac{2}{\pi} \int_0^{\pi/2} d\varphi \left(1 - \frac{m}{m - 1 + \exp\left(\frac{\Delta}{2H} \cot \theta \sec \varphi\right)} \right). \quad (78)$$

$m \equiv \sigma^{10}(E)/\sigma^{01}(E)$, μ the cosine of the incoming proton pitch-angle θ and H the atmospheric scale height. The hydrogen atom travelled a certain distance before being stripped of its electron at Cartesian coordinates (x, y) , with $\tan \varphi = x/y$. For a latitudinal width of 200 km, and a scale height of 60 km at an altitude of 300 km, they found that $\varepsilon = 0.75$. This approach however underestimates the fluxes at higher altitudes (above 300 km), an issue which calls for improvements in the future in our code.

Recently, Jasperse (1997) made some inquiries about the spreading effect using matched asymptotic expansions³⁷ and Fourier transforms to get approached analytical solutions for the Boltzmann kinetic equations. He concluded that the proton beam begins to spread significantly at altitudes between 280 and 400 *km*. His method can be an interesting starting point if we want to take into account rigorously the attenuation along the centre of the beam, though his solution is intrinsically bound to the way he solved the equations. Quantification of the spreading effect remains an important topic in the scientific community, both for Monte Carlo (Fang *et al.*, 2004) and kinetic formalism investigations.

4.2.4 Coupling electrons with protons

The coupling of the two codes leading to the birth of a new enhanced model is detailed in this paragraph.

Two main couplings between the proton transport and the electron code have been performed, one through the source function of the protoelectrons, expressed in $cm^{-3} s^{-1} eV^{-1}$, the other through ionization rates, in $cm^{-3} s^{-1}$ (Fig. 4-3). A lot of effort has been cast on the stability, the synchronicity and the optimization of TRANS4, which I will thoroughly develop later on in a dedicated paragraph (*cf.* Chapitre 5).

The outputs of MSIS-90 thermospheric model as well as those of the IGRF geomagnetic field model are first transmitted to the proton part through the electron part. The protons are running on a specific adjustable altitude (100 altitude boxes), angle (typically 10 boxes) and energy grid (usually 200 energy boxes).

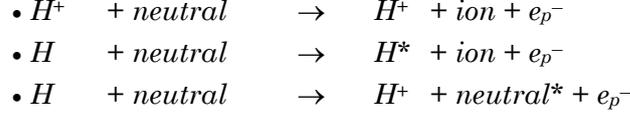
In TRANSCAR, as explained earlier (§ 1.3.1), the Boltzmann equation for suprathermal electrons had the form:

$$\mu \frac{\partial \Phi_e(z, E, \mu)}{\partial \tau(z, E)} = - \Phi_e(z, E, \mu) + sf(z, E, \mu) + g(\Phi_e(z, E, \mu)) \quad (79)$$

where g is a function of the electron suprathermal electron flux Φ_e gathering all internal processes and reactions. Φ_e is expressed in $cm^{-2} s^{-1} eV^{-1} sr^{-1}$. The source function $sf(z, E, \mu)$ has the dimension of a flux and is related to photoelectrons, electron precipitation and in our case electrons created by proton precipitation, which I call ‘protoelectrons’.

³⁷ Called in French *développements asymptotiques raccordés*. This perturbation method, first proposed by Van Dyke (1964) is used in many problems involving fluid mechanics and wave propagation. It is structured in boundary layers where upper differential orders cannot be neglected. Two expansion series must then be developed and matched, one inside and one outside this boundary layer where second-order terms are negligible.

We need then to compute this source function for the protoelectrons. The reactions to be considered here are the following:



The proton part yields a volumic source function S_v for the protoelectrons created by (H^+, H) ionizing fluxes, expressed in $cm^{-3} s^{-1} eV^{-1}$ (Basu *et al.*, 1993):

$$\begin{aligned}
 S_v(z, E_e) = & \sum_{j=P, H} \sum_k n_k(z) \int dE' \sigma_{k,j}^{ion}(E') f_a(E', E_e) \int d\mu' \Phi_j(z, E', \mu') \\
 & + \sum_k n_k(z) \int dE' \sigma_k^{01}(E') f_b(E', E_e) \int d\mu' \Phi_H(z, E', \mu')
 \end{aligned} \quad (80)$$

where the first term is due to ionisation processes with incoming mixed proton-hydrogen fluxes, and the second term due to stripping reactions originating from the degradation of the hydrogen fluxes. E' is the energy of the (H^+, H) couple and E_e is the corresponding energy of the protoelectrons. The functions f_a and f_b are functions introduced by Basu *et al.* (1993) to characterize the differential cross sections pertaining to ionisation and stripping respectively. For 1 MeV incoming particles, $f_a(E', E_e) \rightarrow 1/E^2$.

The final passage to a source function in $cm^{-2} s^{-1} eV^{-1} sr^{-1}$ directly pluggable into the electron code is done by computing:

$$sf(z, E, \mu) = \frac{1}{4\pi} \frac{S_v(z, E)}{\sum_k \sum_\alpha n_k \sigma_k^\alpha + L(E)} \quad (81)$$

when assuming an isotropic distribution for the protoelectrons.

A second output of the proton part that has to be directly related to the ion production rates in $cm^{-3} s^{-1}$, which is straightforwardly computed so that:

$$P_k(z) = 2\pi n_k(z) \sum_{j=H^+, H} \int d\mu \int \sigma_{ion}^{k,j}(E) \Phi_j(z, E, \mu) dE \quad (82)$$

Finally, the total ion productions computed by TRANS4 are updated and include the effect of photoelectrons, secondary photoelectrons, electron precipitation and protoelectrons.

The TRANS4 numerical code is dynamically coupled: it means that proton precipitation is influencing the electron productions and that in return, through the

heating rates and ionization rates given to the fluid part, electron densities and temperatures modify the inputs of the model in a dynamical way (Fig. 4-3). It is not just stationary codes put together in a row, but a true coupling which evolves to a global equilibrium, through densities and temperatures.

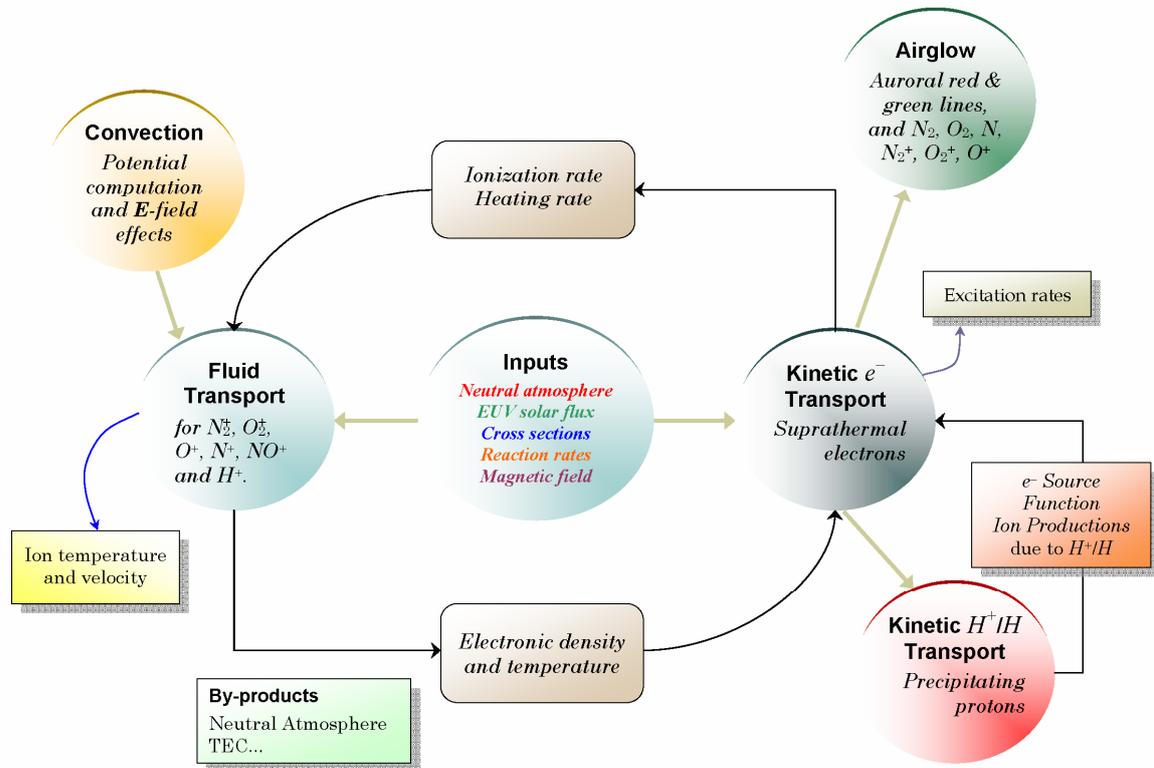


Fig. 4-3 – TRANS4 numerical code: protons and electron kinetic transport are coupled through the protoelectron source function and ion productions, while the neutral atmosphere is transmitted to the kinetic part through the electron part.

One of the capabilities of the proton part is to include angular redistributions of magnetic and collisional origin, which are at the origin of the red-shifted component of the spectral Balmer lines. The ambition from the modelling is now to get the emission Balmer line profiles in order to compare directly with the spectrometric data.

4.2.5 Computing the hydrogen emission line zenith profiles

Very tritely, the H_α and H_β lines belonging to the Balmer series are emitted when a hydrogen atom relaxes from an excited upper level to a lower metastable level. The emitted wavelengths λ_0^α for H_α corresponds to the transition ($n = 3 \rightarrow n = 2$) and equals 656.28 nm, while for H_β , λ_0^β equals 486.14 nm for the level transition ($4 \rightarrow 2$).

To compute the magnetic zenith Doppler profiles of any of these emissions, we need to transform by a change of variable the (H^+, H) fluxes yielded by TRANS4 from the previous computations. As we saw it, particle fluxes $\Phi_i(s, E, \mu)$ are discretized over altitude ranges s , energies E and cosines of pitch angle μ . The $H_{\alpha, \beta}$ emission rates are simply expressed as:

$$\eta_{em}(s, E, \mu) = 2\pi \sum_k \sum_{i=H^+, H} n_k(s) \sigma_{k,i}^{em}(E) \Phi_i(s, E, \mu) \quad (83)$$

with $\sigma_{k,i}^{em}$ the cross sections for the emission of H_α or H_β after a hydrogen atom was excited by a collision between a species i (either H or H^+) with a neutral species k . The emission cross sections for collisions of protons and hydrogen with N_2 and O_2 are taken from Van Zyl & Neumann (1980) for low-energy distributions (0.03–3 keV), while at higher energies, we took the data of Yousif *et al.* (1986). Following Strickland *et al.* (1993), we assume that the emission cross sections for collisions with O are 0.7 of the corresponding O_2 cross sections. What we want to obtain in the end is the expression of the volume emission rate, a function of s , the altitude range along the field, of λ , the wavelength of the energetic neutralized protons, and of v_\perp , the velocity perpendicular to the magnetic field. We will note this output $\eta_{vol}^{em}(s, \lambda, v_\perp)$ having units $cm^{-3} s^{-1} nm^{-1} (cm/s)^{-1}$. We can then integrate over all dv_\perp to produce the integrated Doppler zenith profile of the hydrogen line, expressed in $cm^{-3} s^{-1} nm^{-1}$:

$$\mathcal{D}(s, \lambda) = \int \eta_{vol}^{em}(s, \lambda, v_\perp) dv_\perp \quad (84)$$

The norm of the velocity of the incoming hydrogen particles is $v = \sqrt{\frac{2E}{m}}$.

It can be decomposed into a velocity parallel to the magnetic field zenith $v_{||} = \mu v$, and a perpendicular velocity $v_\perp = \sqrt{1 - \mu^2} v$. The Doppler shift formula becomes then:

$$\lambda = \lambda_0 \left(1 - \frac{v_{||}}{c}\right)^{-1} = \lambda_0 \left(1 - \frac{\mu}{c} \sqrt{\frac{2E}{m}}\right)^{-1} \quad (85)$$

The differentiation of $v_{||}$, v_\perp and λ yields the condign change of variables:

$$\left. \begin{aligned} dE &= mv \, dv \\ dv_{\perp} &= \sqrt{1 - \mu^2} \, dv - \frac{\mu v}{\sqrt{1 - \mu^2}} \, d\mu \\ dv_{\parallel} &= \mu \, dv + v \, d\mu \\ d\lambda &= \frac{\lambda_0}{c} \left(1 - \frac{v_{\parallel}}{c}\right)^{-2} \, dv_{\parallel} \end{aligned} \right\} \quad (86)$$

Then, when developing the Jacobian operator for the change of variables, we obtain:

$$dv_{\perp} \, dv_{\parallel} = \frac{v}{\sqrt{1 - \mu^2}} \, dv \, d\mu. \quad (87)$$

In the end, by combining the expressions (86), we can compute the volumic emission rate, expressed in $cm^{-3} \, s^{-1} \, nm^{-1} \, (cm/s)^{-1}$ by:

$$\eta_{vol}^{em}(s, \lambda, v_{\perp}) = \frac{mc}{\lambda_0} \left(1 - \frac{v_{\parallel}}{c}\right)^2 \frac{v_{\perp}}{\sqrt{v_{\parallel}^2 + v_{\perp}^2}} \eta_{em}(s, E, \mu) \quad (88)$$

The numerical resolution is based on the rearrangement of increasing wavelengths in $n \, m/N$ groups of dimension N , where n is the number of levels for the energy grid and m that of the angle grid. N is here an adjustable number, chosen to be typically 100 in order to get a smooth Doppler profile.

This rearrangement is necessary because to each λ are corresponding many (s_i, E_j) couples that need to be sorted out in increasing values. Moreover, at a given pitch-angle, the Doppler shift $\lambda - \lambda_0$ appears to be decreasing with energies. When $\frac{\pi}{2} \leq \theta \leq \pi$, the shifted wavelength becomes less than λ_0 , which corresponds to upward fluxes. All in all, we can compute the Doppler profiles for the two hydrogen Balmer lines H_{α} and H_{β} .

These theoretical developments had among others one specific aim, *i.e.* to compare with ground-based optical measurements. My stay in Svalbard and in Oslo during the winter 2004-2006, under the supervision of Prof. Jøran Moen from the University of Oslo, allowed me to get to know the experimental point of view in terms of calibration and observational sampling, and to optimize the comparison with the TRANS4 model.

Before exploring these issues, we need to test the model and validate it regarding stability and energy conservation. That is what the following paragraph now proposes to address.

Ce chapitre s'est attaché à replacer l'étude des précipitations de protons dans le contexte historique et celui de la recherche actuellement menée, avec le couplage final des codes de transport d'électrons et de protons.

Un aperçu historique des différents modèles physiques utilisés est donné dans un premier paragraphe (§ 4.1).

La deuxième partie de ce chapitre (§ 4.2) propose d'expliquer la naissance du code de modélisation TRANS4, ainsi que le couplage dynamique du modèle TRANSCAR avec le modèle de transport des protons de Galand et al. (1997). Après avoir explicité les hypothèses inhérentes à la modélisation, nous posons les équations couplées régissant le transport de (H^+, H) dans l'ionosphère (§ 4.2.1); elles sont ensuite détaillées membre par membre. Le principe de la résolution analytique de ces équations, basé sur le calcul d'une exponentielle de matrice creuse de grande taille, est brièvement expliqué dans la suite. Le paragraphe 4.2.3 se focalise quant à lui sur le problème des redistributions angulaires d'origine magnétique (miroir magnétique) et collisionnelle. Dans ce dernier cas, nous avons inclus dans le modèle la fonction de redistribution angulaire de Rutherford. L'effet d'étalement du faisceau incident de protons qui dépend de l'altitude, et la difficulté de sa modélisation dans TRANS4 sont par ailleurs soulignés.

L'avant-dernier paragraphe aborde le couplage dynamique proprement dit entre codes de transport d'électrons et code de transport de protons, via la fonction source des protoélectrons et les productions ioniques. Enfin, suivant la procédure de Galand et Lilensten (1996), nous décrivons en détail la modélisation physique des raies Balmer de l'hydrogène qui constituent la signature des précipitations de protons : les profils de raies H_α et H_β sont une des principales sorties du modèle et sont directement comparables aux données des spectrophotomètres.

Chapitre 5

Acceleration and physical validation of Trans4

Contents

5.1 Acceleration of the code	152
5.1.1 Temporization of the protons	153
5.1.2 Convergence criteria for the solving scheme.....	154
5.1.3 Update of the mathematical routines	155
5.2 Validation.....	157
5.2.1 Energy conservation for the proton part	158
5.2.2 Energy conservation for the electron kinetic part	159
5.2.3 Energy loss per electron/ion pair	161

There are several time steps in TRANS4.

The first one is involved in the derivative equation solved in the fluid part for the ion densities. It is typically of the order of 1 s to insure the stabilization. However it can be reduced in certain conditions. As an example, when the sun sets and in the case of very low energy precipitation, we usually go down to only about 1 *ms*.

The second time step represents the periodicity between two calls to the electron kinetic transport. Indeed, in quiet solar conditions and specifically during daytime, the electron production is highly stationary over roughly 5 minutes. It is therefore useless – and even time-consuming – to call the kinetic e^- transport code every second: of course, in case of very hectic external conditions and provided we can feed

the code with highly changing EUV or precipitation fluxes, this second time step must be reduced.

Similarly, the third time step corresponds to the time between two calls to the (H^+,H) kinetic transport code. It may seem natural to have the same periodicity for calling the proton code and the electron code. However, here again, this depends mostly on the stationarity of the initial ionospheric conditions and on our ability to model fast external variations.

Therefore we face 3 time steps, timestep – fluid (Δt_f), timestep – electron (Δt_e) and timestep – proton (Δt_p).

5.1 Acceleration of the code

TRANS4 reaches a balance within 1% of an original 3000-step run after 2000 time steps. From this point on, the conditions for the time steps covered are $\Delta t_e = 1$ s, $\Delta t_f = 1$ s, while $\Delta t_p = 1$ to 100 s depending on the acceleration procedure. With the 3 typical parameters totally synchronized at 1 s, it takes 2400 minutes on the IBM Power3-II computer carlo available at the SSCI pool at Grenoble Observatory, *i.e.* about 40 hours. It is consequently necessary to accelerate the code if we want in the future to build a space weather tool, which can assimilate real data and run in real time.

A few more points need to be clarified. As we are dealing with relative tendencies and influence of factors, we do not need a dramatic accuracy and so we chose for the following tests to use a 1000-step scheme which gives results less than 10% from the reference. If a greater accuracy is required, a 2000-step scheme should be adopted, twice as long however as a 1000-step run.

The energy grid for the proton transport is chosen to be divided into 50 boxes, the altitude grid in 100 boxes and the angle grid in 8 boxes which makes it optimized in terms of time consumption for future test-runs. The number of energy boxes is a critical parameter for the accuracy of the computation, its speed and, we shall see later on, for its validity.

The time steps chosen mean that the densities, temperatures and velocities evolve as fast as the electron and ion productions. The justification of the proton time step's value Δt_p will be addressed in the next paragraph.

Compared to the independent original proton code, the simple fact of using subroutines linked together by common variables passed in arguments accelerated the code by a factor 5 on average. This trick is just a programming trick; we can after that work on the physics itself.

Several means of accelerating the coupled electron/proton transport code are thus considered in the following paragraphs and will be studied in light of density variations.

5.1.1 Temporization of the protons

The first and most evident means of accelerating our program is the “temporized” computation of the proton transport, which is obviously the part in the complete code the most demanding in terms of computation time.

We know that the neutral densities in the atmosphere do not change very much over say a 30-minute period for quiet solar conditions. The coupling of the codes is, as explained earlier, done through these neutral densities given as inputs to the proton part. The approximation will therefore be satisfying if the proton code is called less than before while keeping the proton outputs (source function and productions transmitted to the electron part) the same over a certain period. We choose 100 seconds for a first run, which is a good compromise between accuracy and computation time. Instead of calling the proton part every time we compute the suprathreshold transport of the protoelectrons, we run it every 100 seconds, as we keep in between the same energy injection and productions in the fluid part.

The errors remain in very satisfactory limits (Fig. 5-1, solid line) and the results differ only by a few percent at very low altitudes (100 – 120 km), and even less at higher altitudes (< 0.01 % for $z > 200$ km).

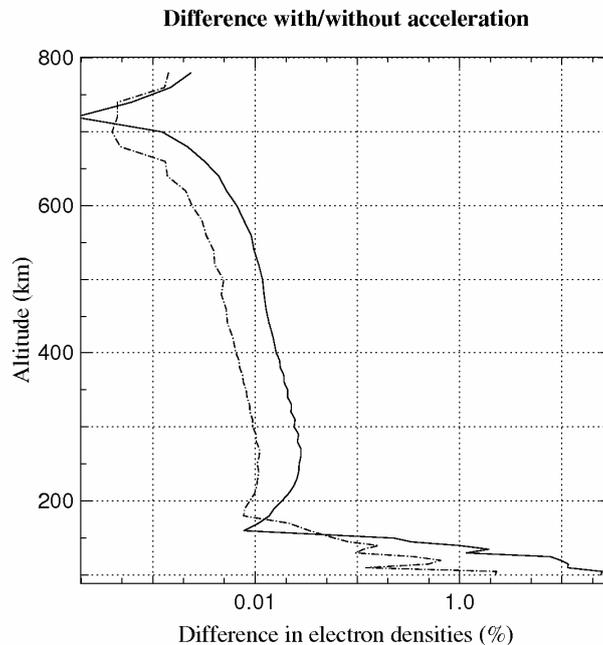


Fig. 5-1 – Differences in % between before and after acceleration for the electron densities computed by the model. The solid line shows the results for a time step for the proton part of 100 s, the dash-dotted line for 300 s.

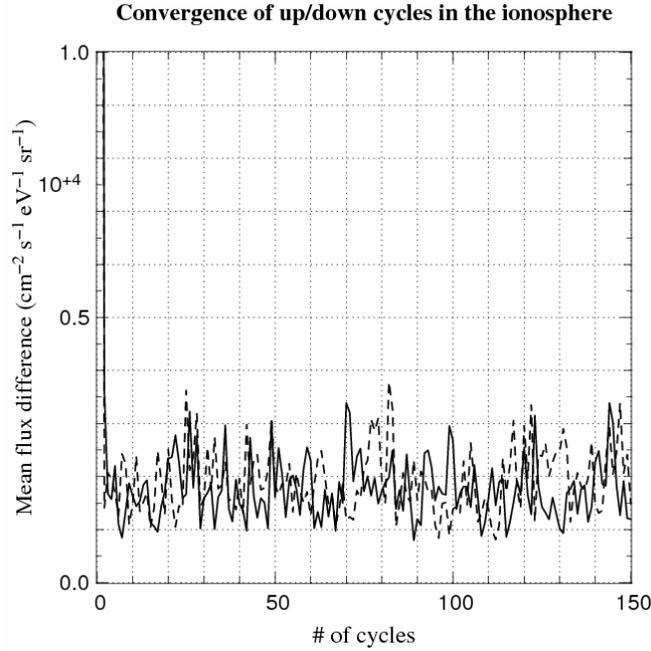


Fig. 5-2 – Mean flux difference $\Delta\bar{F}$ between two computed fluxes (in $\text{cm}^{-2} \text{s}^{-1} \text{eV}^{-1} \text{sr}^{-1}$) over 150 up/down cycles. The dashed line is for the code without optimization, the solid line takes into account the memory of the upward flux from one TRANS4 iteration to another.

The gain of time can be dramatic in certain conditions: if we recalculate the source function and the productions every 100 s, from a mere 1170 minutes for 1000 steps when the proton and electron evolutions are totally synchronised, we go down to 150 minutes, *i.e.* an increase of a factor 8 in speed.

If the frequency of the call to the proton part is smaller, *i.e.* the time step is 300 s (Fig. 5-1, dash-dotted line), the differences are more important on average but still satisfactory as they do not exceed 0.1 % over 150 km. Conversely at lower altitudes, differences climb up to 30%, which makes it too difficult to represent accurately the densities. The execution time gained is ridiculous, and comparable in magnitude to the 100 s time-step.

A time step of 100 s therefore seems reasonable both in term of execution time and accuracy in case of stable conditions (*i.e.* no magnetic activity and stationary precipitation over this characteristic time).

5.1.2 Convergence criteria for the solving scheme

A second way of improving the running speed is to work on the convergence criteria for the resolution of upward/downward (H^+/H) fluxes.

At the first call of the proton code, the boundary condition is such as the downward flux at the top of the ionosphere $\Phi_{\downarrow 0}^{\infty}$ is a pure beam of protons H^+ coming down into the ionosphere, while the upward (H^+/H) flux $\Phi_{\uparrow 0}$ is set to zero. One cycle

is composed of two parts: we first go down the ionosphere computing the downward flux $\Phi_{\downarrow 1}$ and then, when the albedo equals 1, every flux being reflected upwards, we compute the corresponding upward flux $\Phi_{\uparrow 1}$ with the downward condition pertaining to $\Phi_{\downarrow 1}$. The second cycle takes into account this upward flux $\Phi_{\uparrow 1}$ as a condition for the computation of $\Phi_{\downarrow 2}$. And so on...

Through the succession of cycles of up/down flux computation (usually between 4 and 10, typically 8), we manage to find a so-called equilibrium. The convergence is obtained when the difference between two computed up/down fluxes reaches a certain value (in fact a range of values) between two contiguous up/down cycles.

The method no longer keeps the memory of the upward flux computed by these up/down cycles as we call the proton code a second time when the atmosphere has evolved through TRANS4. It means that the dynamical relationship between two runs is not completely maintained through a TRANS4 run involving several calls or iterations to the proton part. A remedy is to keep in memory the upward fluxes $\Phi_{\uparrow 8}$ computed by a first call and then to plug it back as the boundary condition $\Phi_{\uparrow 0}^2 = \Phi_{\uparrow 8}^1$ for the second TRANS4 iteration.

Over 150 cycles, the point is to find when this 'equilibrium' occurs.

In Fig. 5-2, we have plotted the mean difference $\Delta\bar{\Phi}$ between two fluxes for two different runs: the dashed line corresponds to the proton code running solely over 150 cycles without the optimization described above, the solid line includes the effect of the memory of the upward flux in the final computation. We can see that the differences stabilize around (1800 ± 200) flux units for both of them, with the memory-flux solid line lying on average below the dashed line. What interests us is actually the pace at which it achieves this limit, that is the number of cycles needed to reach the stabilization. However, this limit is not very obvious, though the main effect of this memory flux tends to make the oscillations smoother and lower in amplitude. Generally speaking the main value seems to be lowered down a bit in the memory-kept case (from 8 cycles to around 5-6), allowing an improvement on the cycle criterion of a factor $\times 1.25$ to $\times 1.5$ at the most. Thus we have gained at least 25% in computation speed.

5.1.3 Update of the mathematical routines

A last improvement has been made which is to update the mathematical scheme used to solve the sparse-matrix exponential problem from its original version (1996) to a newer optimized version (1998).

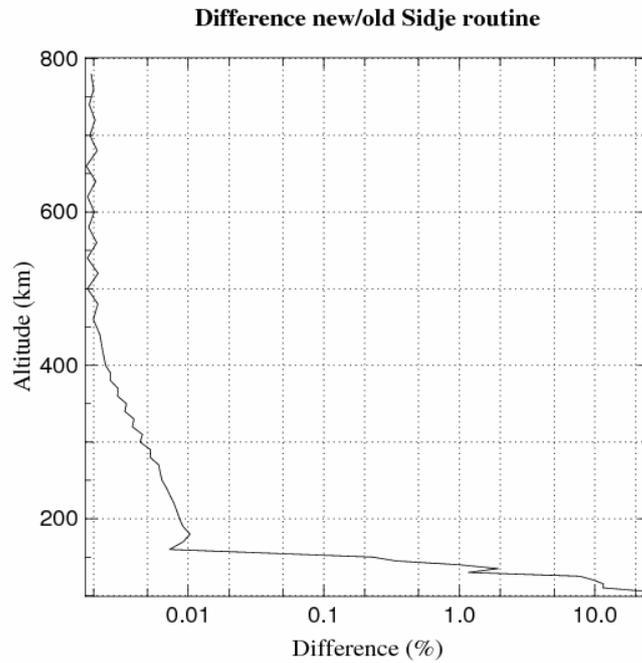


Fig. 5-3 – Relative differences expressed in % experienced in the electron densities computed by the model between the old and the updated routine of Sidje (1996 – 1998). The differences are significant at lower altitudes below.

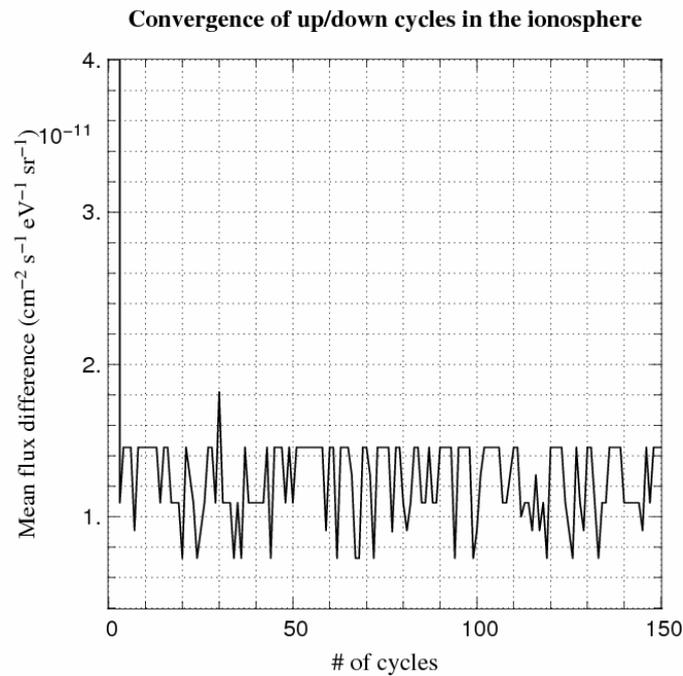


Fig. 5-4 – Mean flux difference ΔF between two computed fluxes (in $\text{cm}^{-2} \text{s}^{-1} \text{eV}^{-1} \text{sr}^{-1}$) over 150 up/down cycles for the updated algorithm of Sidje (1998).

The convergence is then reached dramatically earlier, and after two cycles, the difference between two fluxes is less than 0.1 %, which makes it also faster than the former solving algorithm. The differences experienced in the electron densities show that at low altitudes and up to the density peak, the differences are quite high reaching 25% at 105 *km*, stabilizing at around 10% around the peak: in the updated scheme, densities are overestimated between 100 and 150 *km* in comparison to the older version, while the electron density peak is shifted downwards from 130 *km* to 126 *km*. Higher up in the ionosphere (200 – 800 *km*), the differences are barely perceptible, keeping under the 0.01% all the way up. These results are shown in Fig. 5-3.

A test has been performed on the stability of the new algorithm over 150 cycles for the difference between two fluxes, as shown in Fig. 5-4. We can see that the balance is reached extremely early (already at the second cycle) and that this equilibrium is also very steady over 150 cycles. The new algorithm seems then to be accurate and robust.

Though the convergence is reached in terms of number of cycle before the older version, the computation itself is slower, so that all in all, the gain in speed is not significant for the change of version for the algorithm.

Of all these steps and tests, we shall draw some important conclusions on the handling of the complete code. We keep hereinafter the older version of the routine for reasons of consistency with the results of Galand & Lilensten (1996) and to accelerate better the code concerning the memory criterion. Together with the temporization in case of a quiet geomagnetic activity and the parameter coupling, we are able to accelerate the code by a factor 50.

So that the equilibrium of the entire code is reached whatever subroutine or energy grid is chosen, and instead of the 1000-step scheme taken for the tests above, we will take a 2000-step scheme for TRANS4, which takes approximately 350 minutes (~ 6 hours).

The acceleration part managed to give us a numerically reliable code. But how far can we trust the physical results we get from it? The validation of our model is the next step to be fulfilled. In the Boltzmann formalism, the momentum equations can lead to a physical way to check the model's validity.

In the upcoming paragraph, we will discuss the energetic issues.

5.2 Validation

The energy conservation lies at the heart of the consistency of any transport code. The energy flux injected at the top of the ionosphere Q_0 must be equal to the energy flux deposited into each ionospheric layer through all of the excitation,

ionisation and charge changing processes encountered, labelled Q_d , plus the outgoing energy flux at the top of the ionosphere Q_{up} in case of angular redistributions:

$$Q_0 = Q_d + Q_{up} \quad (89)$$

where Q_0 , Q_d and Q_{up} are expressed in $eV cm^{-2} s^{-1}$.

The expressions of these energy fluxes differ slightly whether one considers the proton energy conservation (proton fluxes are then involved) and the electron energy conservation (three sources have to be taken into account for the suprathermal electron fluxes).

The accuracy of the energy conservation is simply given by $\beta = \frac{Q_0 - Q_{up} - Q_d}{Q_0}$. The energy conservation was verified for the protons solely, then for the electrons.

More fundamentally, the conservation we are talking about is not only a matter of algorithm reaching it numerical equilibrium. The energy conservation is indeed the physical corollary of the invariance of any physical law undergoing a translation of time, one of Physics' basic principles: in other words, the laws of physics stay unchanged across time, which puts a very strong constraint on any modelling effort. If we want to model the physics –the reality– underlying proton and electron precipitation, we have to validate the approach through energy conservation.

5.2.1 Energy conservation for the proton part

Q_0 and Q_{up} in equation (89) can be rewritten in this case as the integral of the energy proton and hydrogen fluxes at the top of the ionosphere over angles and energies:

$$Q_0 = \int \int (\Phi_{\downarrow H^+}(\infty, \mu, E) + \Phi_{\downarrow H}(\infty, \mu, E)) d\mu EdE \quad (90)$$

$$Q_{up} = \int \int (\Phi_{\uparrow H^+}(\infty, \mu, E) + \Phi_{\uparrow H}(\infty, \mu, E)) d\mu EdE \quad (91)$$

The deposition processes due to excitation, ionisation and charge-exchange reactions between energetic particles $j = (H^+, H)$ and the neutrals k are computed by:

$$Q_d = 2\pi \int dz \sum_k n_k(z) \int_{E_{min}}^{E_{max}} dE \int \int d\mu d\mu' \sum_{j=H^+,H} L_k^j(E, \mu' \rightarrow \mu) \Phi_j(z, \mu, E) \quad (92)$$

where $L_k^j = \sum_{pr} W_{k,j}^{pr}(E) \sigma_{k,j}^{pr}(E)$ is the total loss function, in $eV cm^2$, for the reaction between a neutral species k and the energetic species j (either a proton or a hydrogen atom), systematized by the cross section $\sigma_{k,j}^{pr}(E)$ in cm^2 and the energy loss

$W_{kj}^{pr}(E)$ for a process pr (ionisation, excitation, elastic collision and charge exchange reactions) with a neutral k .

A few tests have been performed for the proton part using different energy and angle grids.

- **Influence of the energy and angle grid**

The grid is chosen to contain 100 boxes and in this configuration, the energy conservation spans from 0.3 to 8.6% for a series of runs with Maxwellian distributions of average energy lying between 1 *keV* and 30 *keV*. When we go down to 50 energy boxes, the conservation is poorly achieved, reaching on average 30%. The angle grid has a much smoother impact, which does not affect significantly the precision of the results. 8 angles is a good choice in terms of accuracy and execution speed.

5.2.2 Energy conservation for the electron kinetic part

In this part, the energy conservation is checked for the electron code including photoelectrons and precipitated electrons, updated by the contribution of the photoelectrons through the source function and the ion productions.

In this case, the three members of the equation can be rewritten as:

$$Q_0 = \int_{E_{min}}^{E_{max}} E dE \int d\mu \sum_k n_k(z) \sigma_k(E) sf(z, \mu, E) \quad (93)$$

which corresponds to the first energy momentum of the source function sf (which has here a dimension of a flux, *i.e.* $cm^{-2} s^{-1} eV^{-1} sr^{-1}$) associated either to the photoelectrons or the protoelectrons. For the electron precipitation, Q_0 is straightforwardly computed by taking the integral over energies and angles of the incoming flux at the top of the ionosphere.

E_{min} and E_{max} have to be determined by a thorough investigation of the energy conservation on the boundaries of the energy and altitude grids. The boundaries are then chosen to discard the two lower energies as well as the two lower and higher altitudes — because of the derivatives taken at the boundaries in the distribution equation — which improves greatly the conservation for the protoelectron and precipitating electron sources.

$$Q_d = \int \int_{E_{min}}^{E_{max}} dz dE n_{e^-}(z) L(E) \int d\mu \Phi(z, \mu, E) + \int \int_{E_{min}}^{E_{max}} dz dE \sum_k \sum_{pr} n_k(z) \sigma_k^{pr}(E) E_{th}^{pr} \int d\mu \Phi(z, \mu, E) \quad (94)$$

The first member represents the heating by thermal and fast electrons represented by the loss function (or stopping power) $L(E)$, while the second corresponds to the degradation in the ionosphere of the input energy flux through all excitation and ionisation processes pr , with an energy threshold E_{th}^{pr} . $\Phi(z, \mu, E)$ is the computed degraded flux for a given altitude, energy and angle triptych, after the kinetic transport has been completed. Remains to be expressed the energy escaping the ionosphere, *i.e.* the upward energy flow, which is simply the integral of the upward flux over energies and angles:

$$Q_{up} = \int_{E_{min}}^{E_{max}} E dE \int d\mu \Phi_{\uparrow}(\infty, \mu, E) \quad (95)$$

where $\Phi_{\uparrow}(\infty, \mu, E)$ is the electron upward flux at the top of the ionosphere.

- **Energy and altitude grid for the electron part**

The altitude grid was chosen to include 55 points spanning from 90 *km* to 780 *km*, which has given very stable results over a great number of runs.

By contrast, and as much as for the proton code, the choice of the energy grid for the degradation cross sections is a crucial point. Indeed, the stability and the real accuracy of the final results directly depend on its choice. We have found that the best choice for our present tests was 60 boxes, spanning from 0.5 *eV* to 10 *keV*.

Six cases have been studied for the energy conservation, corresponding to the contribution of photoelectrons, protoelectrons and electron precipitation combined together or not. The final results in terms of electron and neutral densities are very sensitive to the initial conditions of the run of TRANS4, *i.e.* the input file must be chosen carefully. An input file, loaded into the file DATCAR, contains a particular run's output result given at equilibrium such as neutral densities, ion densities and temperatures which are necessary for TRANS4 to begin the computations.

On average, the energy conservation is observed within 1 to 7% for the electron precipitation for Maxwellians centred on $E_0 = 1$ to 20 *keV*.

For the protoelectron contribution only, the absolute percentage reaches values between 3 and 60%, over a series of runs involving Maxwellian distributions with a mean energy between 2 *keV* and 30 *keV*. Generally speaking, the more the Maxwellian is centred at high energy, the better the energy conservation. In the accelerated code context, we must note that the computation of the energy conservation drifts away between each call to the proton part. Indeed, the source function stays the same over a 100 *s*, but the neutral densities at the origin of its original computation can change significantly so that the agreement between the two is changed. We see a systematic decrease in β until it reaches the 100th TRANS4 iteration (see Table 1). When the overall code has reached its equilibrium, the energy conservation is observed at less than 10% whatever the energy.

Table 1 – Energy conservation for different input proton distributions with mean energy E_0 . A negative sign in β means that some input energy has not been degraded into the ionosphere.

Mean energy of the proton Maxwellian E_0	β 1 st iteration	β 50 th iteration	β 100 th iteration	Trans4 at Equilibrium
2 keV	129%	59.5%	57.2%	~ 7%
5 keV	103%	24.6%	22.8%	~ 5%
10 keV	70%	5.5%	3.6%	~ 1%
15 keV	56%	-3.8%	-5.3%	~ -2%
20 keV	47%	-7.7%	-9.0	~ -3%

When taking as inputs the contribution of protoelectrons and precipitating electrons at the same time, the energy conservation is well handled, and β reaches values down to 8% on average, decreasing slowly as the numerical convergence builds up.

In all cases, the more we reach a balance in the overall densities, the better the energy conservations.

5.2.3 Energy loss per electron-ion pair

The average energy loss per electron-ion pair W_e , expressed in $eV/pair$, represents the energy expended in the creation of an electron/ion pair. We can write:

$$W_e = \frac{E_{input}}{\# e-ion \text{ pairs}} = \frac{Q_d}{\int \sum_k P_k(z) dz} = \frac{Q_0 - Q_{up}}{\int \sum_k P_k(z) dz} \quad (96)$$

It can be computed either by using the degraded energy flux or the expression of the input energy flux minus the output flux. In the case of precipitating electrons and protons, Khare (1970), Edgar (1973), later backed up by Kozelov and Ivanov (1994), showed that the average energy loss for N_2 should be around 37 eV. We found here that the energy loss per electron-ion pair remains at $(38.5 \pm 1.5) eV$ when electron precipitation is taken into account.

Concerning the proton part, the energy conservation is very well maintained over the different input spectra. Galand (1996) showed that for a grid angle of 200 steps, it should be less than 3%: here, for a better compromise between accuracy and execution speed, 100 boxes for the proton energy grid is shown to be enough. The energy conservation is in this latter case of the order of 5% on average, which is

enough when considering that the accuracy for the electron part's energy conservation is typically around 6-7%.

This study showed us how the continuous loss approximation is difficult to handle especially at low energies where the frictions are prominent. The energy conservation is not so well verified by the protoelectron contribution, depending on the distribution but reaches 3% for typical high-energy spectra. What is crucial is the overall equilibrium TRANS4 has managed to reach, in which case the energies are very homogeneous over all types of energy spectra.

Deux types d'études préliminaires à la comparaison aux données ont été effectués pour le modèle TRANS4 dans ce chapitre. Chacune a fait l'objet d'un paragraphe séparé.

La première étude est numérique et concerne l'accélération et la stabilisation du code électrons/protons. Nous montrons que de manière générale, le calcul des précipitations de protons ralentit considérablement TRANS4. Deux stratégies d'accélération sont adoptées :

– une accélération numérique d'abord, à travers l'optimisation des routines de calcul, et le passage par paramètre des variables calculées dans TRANS4.

– une accélération liée à la physique de l'ionosphère ensuite. Plusieurs axes sont ici choisis : la temporisation du calcul des protons correspondant à sa synchronisation avec le calcul des électrons, et une modification du critère de convergence sur les flux remontants/descendants, qui permet de prendre en compte comme condition initiale les flux remontants calculés par TRANS4 au pas temporel précédent.

Toutes stratégies confondues, nous gagnons ainsi un facteur 40 pour le temps d'exécution effectif de TRANS4, ce qui permet de rendre complètement opérationnel le couplage des deux codes de transport cinétique.

La deuxième étude concerne le critère physique de la conservation de l'énergie qui nous a permis de valider TRANS4. La conservation de l'énergie pour la partie protons est observée à moins de 8% quelle que soit la distribution initiale du flux de protons. La partie électrons obtient des valeurs similaires (de 1 à 7%) lorsque seules les précipitations électroniques sont prises en compte. L'ajout de la contribution des protoélectrons dégrade de manière importante la conservation de l'énergie, qui monte alors jusqu'à 50% pour des flux de basse énergie à la 100^e itération. Il est alors indispensable de faire tourner TRANS4 à l'équilibre des concentrations, notamment électronique et neutre, pour obtenir une conservation satisfaisante de l'énergie. Dans ce dernier cas, les conservations atteignent en moyenne 4% et nous retombons sur les valeurs trouvées pour les précipitations électroniques seules. Un dernier point à compléter est le calcul de l'énergie perdue dans la création d'une paire électron/ion. Nous obtenons ici pour la partie protons ainsi que pour la partie électrons des résultats proches des valeurs mesurées en laboratoire.

Chapitre 6

Study of the event 22-01-2004: a coordinated ground-based/satellite comparison

A capital mistake is to theorize before one has data.
Sir Arthur Conan Doyle, *The adventures of Sherlock Holmes*.

Contents

6.1 Geophysical description of the event and data processing	166
6.1.1 Geographic overview	166
6.1.2 Solar and geophysical conditions	167
6.1.3 Coordinations: a geomagnetic and physical point of view	168
6.1.4 The ESR run	170
6.1.5 The DMSP F13 pass over Svalbard: a description of the particle fluxes	176
6.1.6 The Ebert-Fastie spectrometer data: the H α and H β lines	179
6.2 Comparison between measurements and computations.....	186
6.2.1 Optical data: modelled parameterization of the impact of protons	187
6.2.2 Comparison to radar data and validation of the approach	201
6.2.3 A refined description of the ionosphere	209

The TRANS4 code was described in detail in chapters 4 and 5. Now is the time of the confrontation of our model with real physical data.

Finding a coordinated ground-based/satellite event is always a difficult problem, in terms of data availability and quality and in terms of accuracy of the actual

coordination. What we want to achieve is to compare the (e^- , H^+) model TRANS4 to a real proto-electron event. What we need for that is particle fluxes recorded at the top of the ionosphere and electron density profiles together with Doppler spectra measured from the ground.

Prof. Jøran Moen and the team in Oslo and Svalbard (Drs. Dag Lorentzen and Kjellmar Oksavik) have been precisely working on such an event, which had the advantage of having an international rocket campaign going on in Svalbard, the SERSIO rocket campaign³⁸. The EISCAT Svalbard Radar and a set of spectrometers in Longyearbyen (Adventdalen) and Ny-Ålesund (west of Longyearbyen) were then ready to run and prepared for the rocket launch, which was incidentally chosen to be in coordination with the DMSP-F13 spacecraft and the NOAA15 and NOAA16 satellites.

The detailed description of this event in a physical and a geomagnetic point of view is proposed in § 6.1. Data processing for both DMSP and spectrometric measurements is explained and performed. Then it will be time to compare the protoelectron outputs of the model with the data, which will be the aim of § 6.2.

6.1 Geophysical description of the event and data processing

6.1.1 Geographic overview

The event chosen as a case study occurred on the 22nd of January 2004 within half an hour about 08:45 UT at Svalbard, Norway. Svalbard is situated in the cusp at 78° of geographic latitude, 16° of longitude: apart from being the northernmost inhabited place in the world, it is the perfect region to study direct precipitation of solar-wind particles, as the magnetic field lines have the property to be open to the magnetospheric mantle. In geophysical terms, this region is called the *polar cusp*. On the other hand, as the night is permanent at this time of the year (the polar night), spectrometers can routinely observe the usual auroral lines (red and green oxygen lines) as well as the hydrogen Balmer lines, the well-known signatures of proton precipitation in the ionosphere. For the day considered here however, the sky was partially veiled by high-altitude clouds, which decreased the overall quality of the spectra obtained in terms of intensity and dispersion.

³⁸ The Svalbard EISCAT Rocket Study of Ion Outflows is an experiment contributed by Dartmouth College, Cornell University, Universities of Oslo and Svalbard (UNIS), Nagoya University and University of Leicester (<http://www.dartmouth.edu/~aurora/sersio.html>). The rocket campaign's goal was to get an insight of the mechanism creating the drift at the origin of ion up/outflows in the dayside cusp-cleft region. SERSIO was launched January 22, 2004 at 08:57 UT from Ny-Ålesund, Svalbard.

6.1.2 Solar and geophysical conditions

Day 22 was one of the most active days in January 2004. Though the solar activity was already well advanced in the decreasing part of its eleven-year cycle after the peaks in 2000-2001, the geophysical conditions were rated from active to very active at middle and high latitudes on Earth. Two C-class CMEs, hurled into space near sunspot 540 and oriented in the Earth's direction, were observed by SOHO in less than 48 hours prior to the measurements: a stream of fast solar-wind energetic particles ($\sim 700 \text{ km s}^{-1}$) then unleashed a geomagnetic substorm which began to develop at 01:30 UT on 22-01-2004 (strong $B_z > 0$ of $\sim 20 \text{ nT}$).

In front of the Earth's bowshock, between 00:00 UT and 10:00 UT, the ACE spacecraft (http://www.srl.caltech.edu/ACE/ASC/view_browser_data.html, Chiu *et al.* [1998]), orbiting about the L1 libration point in the solar-wind upstream of the Earth, showed interplanetary magnetic field conditions typical of lobe reconnection configurations, with B_z mostly positive and strong $B_y < 0$, which lasted for the entire period considered here.

We can see that the CME reached ACE's orbit at around 01:00 UT, when the solar-wind (SW) velocity is jumping abruptly from 450 to nearly 700 km s^{-1} . For a velocity comprised between 400 and 700 km s^{-1} , it takes for the energetic particles between 30 minutes and one hour to reach the Earth. Several B_z -negative episodes appeared between 05:00 and 08:00 UT, lasting half an hour on average, which may be correlated with variations in the ground-based magnetograms.

At 08:00 UT, a strong B_z -negative flow was recorded by ACE, which was responsible for the strong perturbation of the geomagnetic field seen in the Longyearbyen magnetogram one hour later. At the same time, all-sky cameras and spectrometers recorded large enhancements in precipitation fluxes while the red and green emission line intensities increased by factors up to 3, a tendency observed as well for H_α spectra: one of the strongest proton showers in ten years was in action.

As seen on Fig. 6-1 (*right*), the magnetograms, recorded at Longyearbyen, Ny-Ålesund and Tromsø, and maintained at the Tromsø Geophysical Observatory (<http://geo.phys.uit.no/geomag.html>), showed very sharp variations of all three magnetic components from 01:30 UT throughout the day with a very fast variation around 09:00 UT. The decimetric solar index $f_{10.7}$ equalled 130, a result of the significant increase in the solar activity from the beginning of the month. The magnetic planetary index showed huge variations over a few days before the D-day: it culminated to $A_p = 130$ at 09:00 UT with a daily average of 60.

Because the event took place during the winter, barely no photoionisation was present (the solar zenith angle was $\chi = 98^\circ$), except at higher altitudes ($> 170 \text{ km}$). As its intensity is very weak compared to the very intense particle precipitation, photoionisation is neglected in the following study.

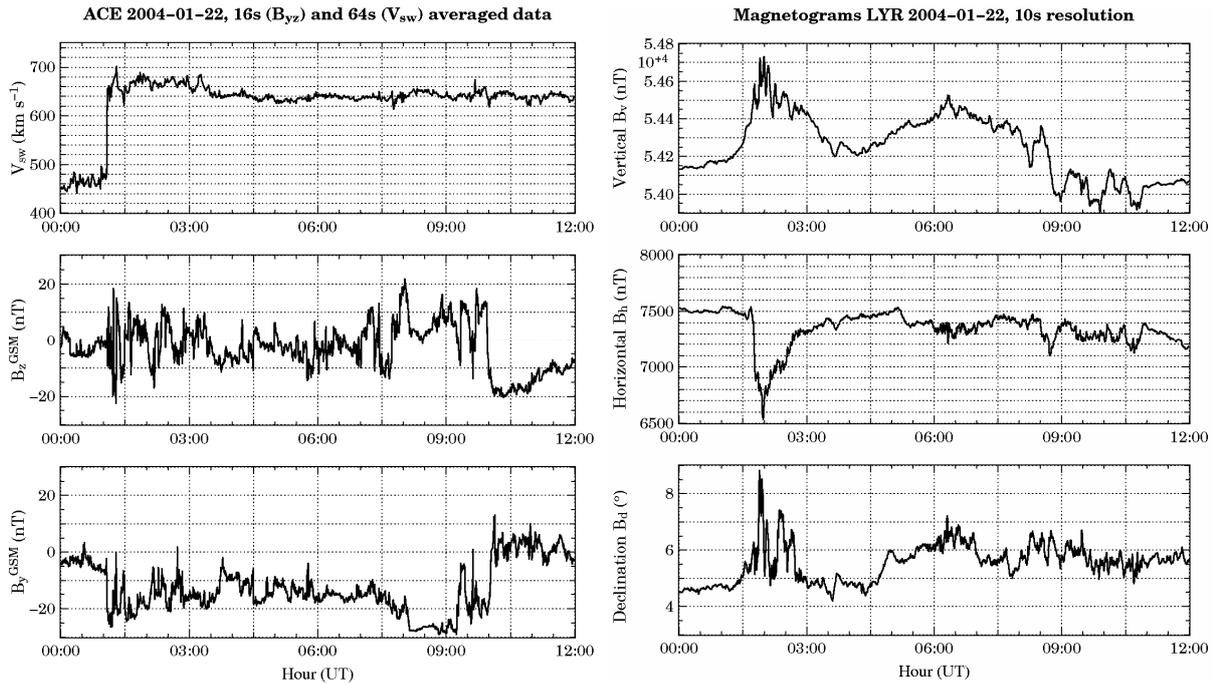


Fig. 6-1 – ACE 16-s interplanetary magnetic field IMF data in nT in GSM coordinates between 02:30 UT and 10:00 UT (left) and magnetogram recorded at Longyearbyen on 22-01-2004 at a 10s resolution (right). The first magnetic perturbation is recorded at 01:30 UT, then a lot of magnetic disturbances are in action throughout the morning, with a particular emphasis in the 06:00–10:00 UT time range. B-field declination in the E-W direction (B_d) expressed in degrees, horizontal in the N-S direction (B_h) and vertical (B_v) components are plotted in nT versus acquisition time in UT.

6.1.3 Coordinations: a geomagnetic and physical point of view

The first parameter to determine is where and when the magnetic coordination occurs. This rather simple idea leads to a recurrent problem concerning the spatial and temporal accuracy of the coordination itself. The Fig. 6-2 below shows the field of view of the all-sky imager situated in Ny-Ålesund (geographic $78.92^\circ N$, $11.95^\circ E$) centred on the oxygen red line at 630.0 nm projected at 250 km for 08:44 UT, in which we have superimposed the DMSP flight path over Svalbard across time and the ESR beam versus altitudes. The particle fluxes measured at one point by DMSP are representative of the energy input at the origin of densities and temperatures measured by the Svalbard EISCAT radar at 600 km of altitude, the radar beam and the satellite sensors simultaneously recording within a time span of 15 s around 08:45:10 UT.

Physically speaking, the measured particle fluxes must be magnetically linked with the ESR probing region. What is obvious is that the auroral activity encountered straight above the ESR is very different from the one below the satellite's trail.

In a model such as TRANS4, this can become a very difficult task to match the density profiles measured by EISCAT, as the latter ones are not a simple stack of interlinked layers but an independent slice of layers linked together by macroscopic processes such as the convection or the neutral winds.

In the following paragraphs, the ESR data, the DMSP fluxes and the spectrometric data only are commented, while the other satellite measurements which are part of the rocket campaign itself are not considered.

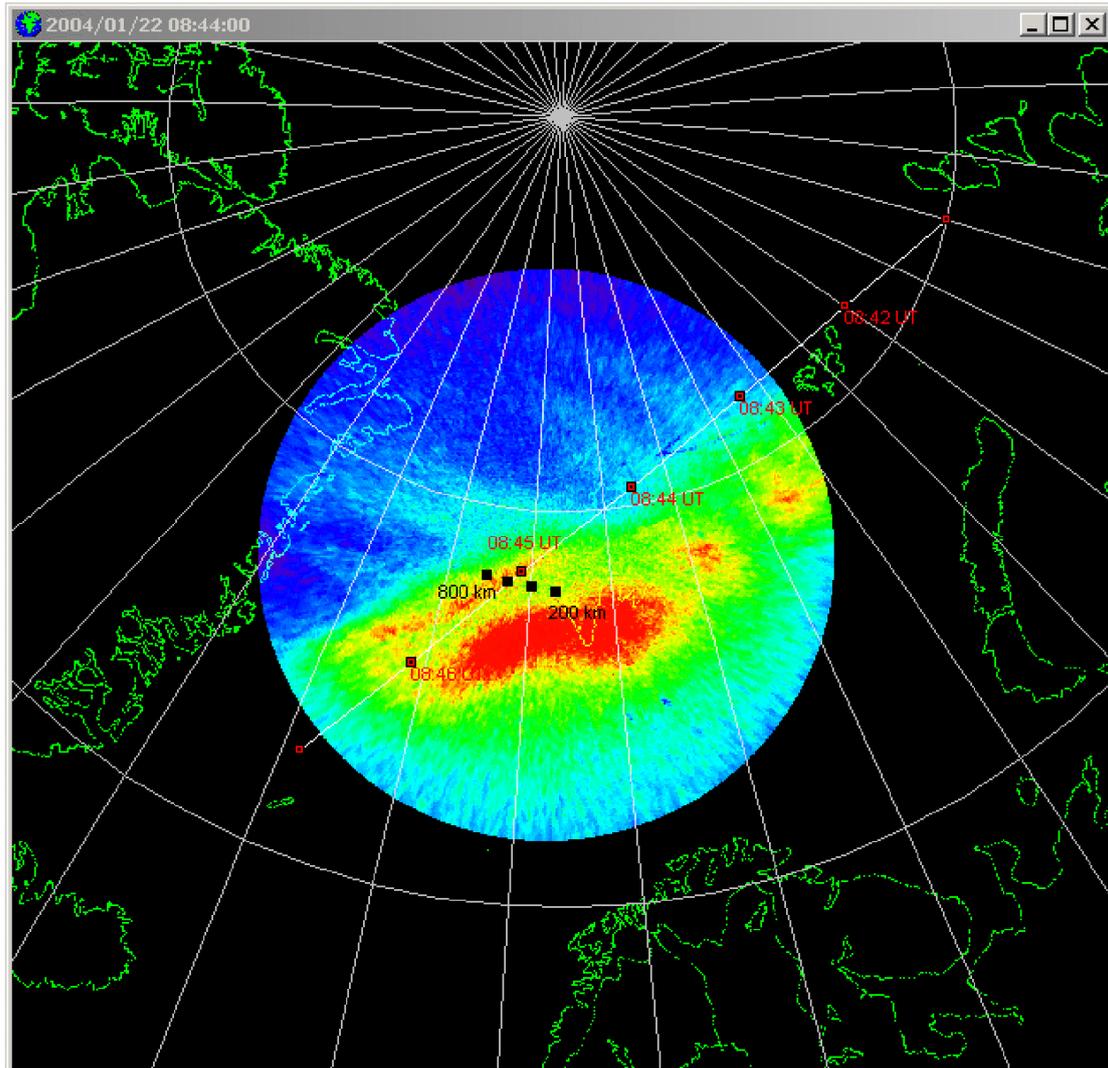


Fig. 6-2 – 630.0 nm all-sky image from the UiO camera in Ny-Ålesund projected at 250 km for 08:44 UT. The DMSP F13 satellite tracks are superimposed in red markers, white path, while the beam projection of the ESR 32m is in black markers. We have plotted the time passage of DMSP along its trajectory, and the probing altitudes of the ESR along its beam. The intensity of the red line is ranging from high (red) to low (light blue).

6.1.4 The ESR run

The EISCAT Svalbard Radar (ESR) is situated at ($78.15^{\circ}N$, $16.03^{\circ}E$) of geographic latitude/longitude, near the town of Longyearbyen, in the Arctic Ocean, Norway, *i.e.* ($75.27^{\circ}N$, $11.95^{\circ}E$) of magnetic coordinates. The ESR facility was finished to be built in 2000, and is composed of two antennae (emitter/receiver), one fixed dish 42-meter wide and aligned along the \mathbf{B} -field, the other antenna being steerable and 32 meters in width.

The original data recorded by the ESR run on 22-01-2004 show multiple occurrences of Naturally Enhanced Ion Acoustic Lines (NEIAL) which corrupt the standard EISCAT analysis (performed by the software GUIDAP³⁹ for all EISCAT IS radars) in the topside ionosphere. Dr. Yasunobu Ogawa (Nagoya University, Japan) processed the data with a special technique, expounded thoroughly in Ogawa (2002), so that they became exploitable.

As stated above, the 42-meter fixed antenna looked along the magnetic field (azimuth 181° , elevation 81.6°), while the 32-meter steerable dish looked 70.8° of elevation to the west (261.1° of azimuth) of Longyearbyen. The configurations of the two radars one to the other are sketched in Fig. 6-3.

The actual time of the coordination is, as we saw it, 08:45 UT (black lines in Fig. 6-4): for the 42-*m* antenna, it corresponds to a very quiet period in terms of electron density, which has no obvious structures through all of the altitude profile. This remark is also valid with the 32-*m* results which are very similar to those of the 42-*m* dish for the densities and the ion temperatures.

In both cases, this period is preceding a much active one where electron densities gradually build up to $10^{11} m^{-3}$ with a main peak situated around 300 *km*, then spreading higher up in altitudes. At the coordination point, the *e*-ion temperatures are significantly high, with very high ion temperatures recorded below 400 *km* ($T_i \sim 3000 K$) in comparison to the electron temperatures ($T_e \sim 1500 K$ at 300 *km* altitude). To these bursts of ion temperatures, depletions in densities are almost always associated, which is a crucial piece of information when interpreting the underlying physical mechanisms.

What seems clear when looking at the ESR plots is the transition from different origins in the profiles: profiles could indeed come from different origins and shall be understood as a combination of processes. Thus several assumptions must be made to account for this depletion in densities, one related to patch segmentation in the polar cap, the other linked with frictional heating. The latter will be explained in detail below.

³⁹ Grand Unified Incoherent Scatter Design and Analysis Package.

• **Frictional heating or patches?**

High T_i can be interpreted as an evidence of the presence of high electric fields in the lower ionosphere. The link between ion temperatures and the electric field is indeed well known: this is called *frictional heating* and is sometimes identified, by a misuse of language, with Joule heating, though physically this identity occurs in a steady-state case (*e.g.* Cole [1971], Banks [1973], Brekke and Kamide [1996]).

As I mentioned, the mechanism that lies at the heart of this heating is the electric field. The \mathbf{E} -field component perpendicular to the magnetic field \mathbf{E}_\perp makes the ions drift with respect to the fixed neutrals (when no neutral winds are encountered). These convection electric fields are then responsible for the emergence of Pedersen currents. In turn, due to the effect of collisions between species, these currents lead to a frictional heating, because collisions put a limitation on the drift velocities, and convert some of the drift energy into thermal energy.

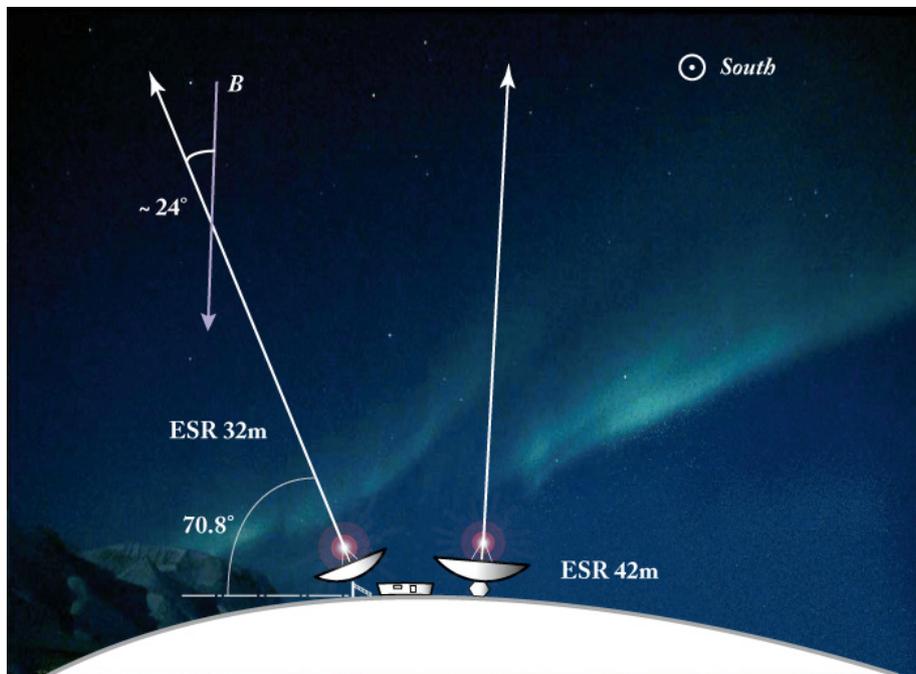
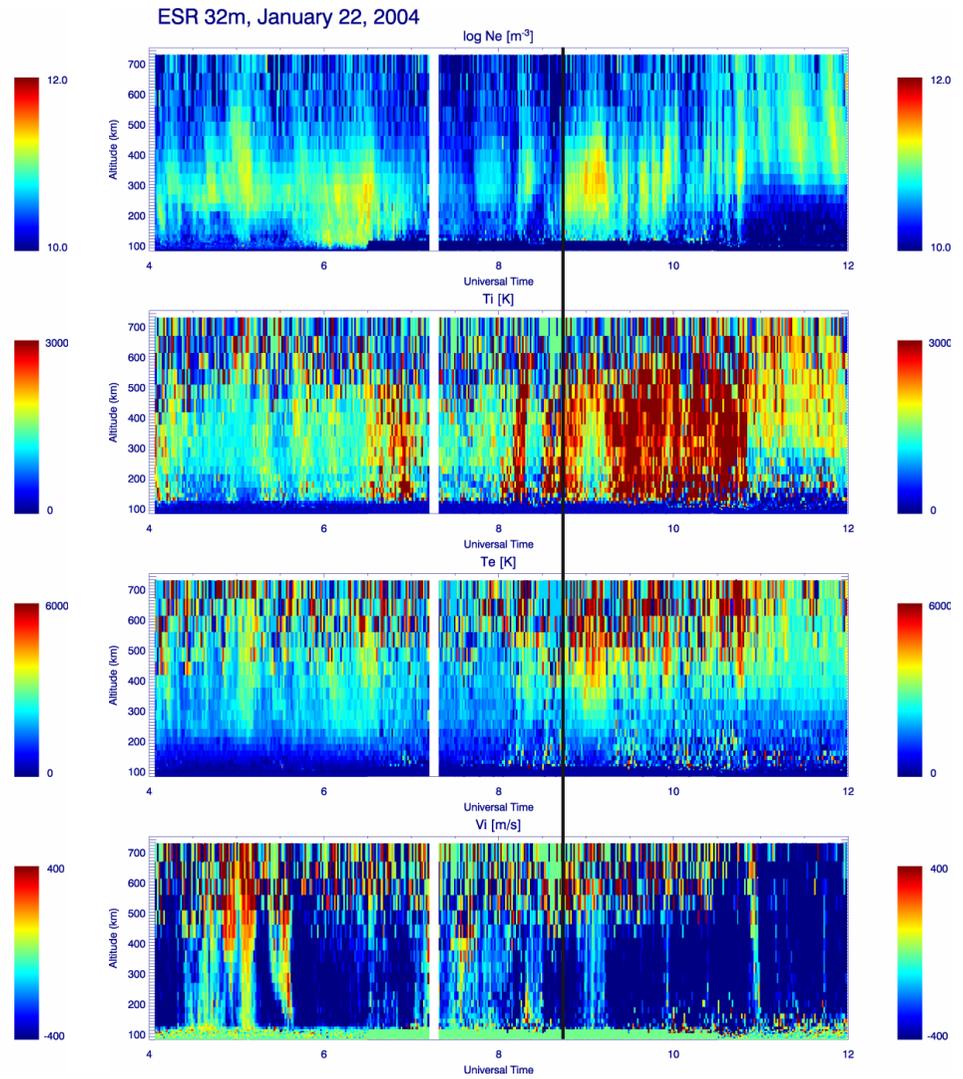
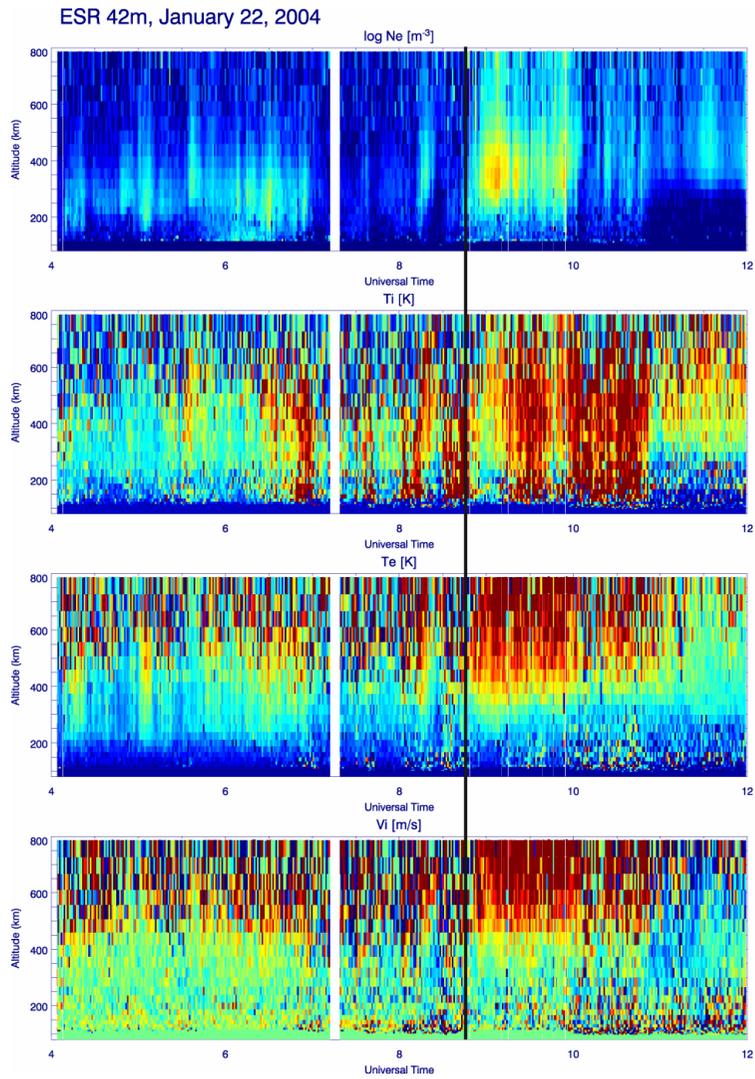


Fig. 6-3 – Configuration of the two ESR radars with respect to the magnetic field lines viewed from the geographic south. The 32 steerable antenna was looking westward.

Fig. 6-4 opposite – ESR parameter altitude profiles averaged over 128 s versus acquisition time (UT) on 22-01-2004. The left-hand figure shows the results given by the 42-m fixed antenna, the right-hand figure the results of the 32-m. While the 42-m dish was looking field-aligned, the 32-m antenna was looking at 70.8° of elevation and 261.1 of azimuth (West direction). From top to bottom, we can see the electron density profiles, the ion and electron temperature profiles, and finally the ion velocity profiles with strong positive values accounting for ions moving away from the radar. The DMSP coordination occurs around 08:45 UT, marked by a black line.

CHAPITRE 6 - 6.1 - GEOPHYSICAL DESCRIPTION OF THE EVENT AND DATA PROCESSING



The heating rate for the ions $\dot{Q}_i = (\partial Q_i / \partial t)$ is under steady state conditions directly proportional to the Pedersen conductivity σ_P . Indeed, following the molecular theory (Tanenbaum, 1973), if we assume that the force per unit mass on the ions due to collisions with neutrals is proportional to the velocity difference between the two species ($v_i - v_n$), the rate of frictional heating (expressed in $erg\ cm^{-3}\ s^{-1}$) is:

$$\dot{Q}_i = n_i \frac{m_i m_n}{m_i + m_n} v_{in} (v_i - v_n)^2 \quad (97)$$

where n_i is the ion density, m_i the ion mass and v_{in} the effective ion-neutral collision frequency in s^{-1} . v_i and v_n are the ion and neutral velocities in the Earth's fixed frame of reference (Banks and Kockarts, 1973).

From the equation of motion for the ions, the relative drift velocity under the influence of an electric field is given by the relationship:

$$m_i \frac{dv_i}{dt} = e (\mathbf{E} + \mathbf{v}_i \times \mathbf{B}) - m_i v_{in} (v_i - v_n) \quad (98)$$

Under stationary conditions, $dv_i/dt = 0$ and it becomes in the reference frame moving with the neutral wind, *i.e.* under the influence of the electric field $\mathbf{E}' = \mathbf{E} + \mathbf{v}_n \times \mathbf{B}$:

$$(v_i - v_n) = \frac{e (\mathbf{E} + \mathbf{v}_i \times \mathbf{B})}{m_i v_{in}} \quad \Leftrightarrow \quad (v_i - v_n) = \frac{e (\mathbf{E}' + (v_i - v_n) \times \mathbf{B})}{m_i v_{in}} \quad (99)$$

After introducing the gyration motion of the ions about the magnetic lines of force, at the cyclotron frequency $\Omega_i = \frac{eB}{m_i}$, we square equation (99), which can be rewritten as:

$$v_{in} (v_i - v_n) - \Omega_i / B (v_i - v_n) \times \mathbf{B} = \frac{\Omega_i \mathbf{E}'}{B} \quad \Leftrightarrow \quad (v_i - v_n)^2 = \frac{\Omega_i^2}{(\Omega_i^2 + v_{in}^2)} \frac{E'^2}{B^2} \quad (100)$$

By substituting (100) into (97), we finally obtain:

$$\dot{Q}_i = n_i \frac{m_i m_n}{m_i + m_n} v_{in} \frac{\Omega_i^2}{(\Omega_i^2 + v_{in}^2)} \frac{E'^2}{B^2} = \frac{m_n}{m_i + m_n} n_i m_i \frac{v_{in} \Omega_i^2}{B^2 (\Omega_i^2 + v_{in}^2)} E'^2 \quad (101)$$

We can then reinterpret the heating rate as the Pedersen current \mathbf{j} flowing along the electric field perpendicular component with a conductivity σ_P responsible of the effective ion heating:

$$\dot{Q}_i \propto \mathbf{j} \cdot \mathbf{E}' = \sigma_P E'^2 \quad (102)$$

This expression of the Pedersen conductivity is valid in the E -region where we can neglect the collisions between electrons and the neutral gas. Therefore, in a steady-state situation, the frictional heating due to collisions with the neutrals is exactly equivalent to a Joule heating due to the ionospheric current \mathbf{j} in presence of the electric field \mathbf{E} .

The ion temperature associated to this mechanism is by the same reasoning:

$$T_i = T_n + \frac{m_n}{3k_B} (v_i - v_n)^2 \quad (103)$$

which shows that ion motions induced by electromagnetic forces result in general in an ion temperature increase above the local neutral temperature. This expression assumes that this heating process is very rapid with respect to inelastic energy processes (e^- recombination, chemical heating, etc.), making it therefore valid in the E- and F-region only.

Following this increase, the frictional heating rate due to a significant \mathbf{E} -field can be so large at high latitudes that the ion temperature even exceeds the electron temperature (usually we have $T_e > T_i > T_n$). This Joule heating can be important above about 130 km, *i.e.* both in upper E- and F-regions (Schlegel and St.-Maurice, 1981).

Here at low altitudes, we observe temperatures having the configuration $T_i > T_e > T_n$ which confirms that strong \mathbf{E} -fields are in action. We will see that the study of the event with TRANS4, when comparing to the ESR data, will lead us to an estimation of the intensity of the \mathbf{E} -fields present in the ionosphere.

This evidence of the presence of strong \mathbf{E} -fields is also shored up by the ion upflows already mentioned above, studied specifically by the Nagoya University team. One of the mechanisms leading to ion upflows is a consequence of the Joule heating at lower altitudes. T_i increases, isotropically-heated ion distributions (~ 0.1 – 0.5 eV) can emerge, which allows pressure gradients to grow: ions must flow upwards to get back to a new equilibrium scale height (Jones *et al.*, 1992; Wahlund *et al.*, 1992). These high upward velocities are present in the ESR recording, especially on the 42-m data, from 08:45 to 10:15 UT.

The adding of electric-field is dramatic on ion temperatures –we have just seen it– but on electron densities as well. Indeed, the reaction constant rate of many reactions involving species such as N_2 and O^+ , the dominant species at low altitudes, strongly depends on the value of T_i . The temperature reaction for $O^+ + N_2 \rightarrow NO^+ + N$ is $T_R = \frac{T_i + T_n}{2}$, and eventually we end up with the very reactive and big molecular ion NO^+ . Thus a direct correlation exists between ion temperatures increases and electron density depletions, which is a typical feature in the ESR 32-m data we underlined previously.

This reaction can be highly favoured in the F -region, and as NO^+ densities are growing, the recombination with electrons becomes very powerful: an ionospheric trough in the F layer can form in a very short time delay. For instance, the TRANS4 model shows that electron densities affected at the origin by a 65 mV/m E -field⁴⁰ can decrease by a factor 4 to 5 in the F -peak regions below 200 km in comparison to unaffected densities.

- **The data**

In Fig. 6-5, we plot the ESR electron densities and the ion/electron temperatures for the time span covered 08:35-08:55 UT with a 128 s resolution: these radar samplings are relevant for the ionospheric conditions the satellite encounters and reflect the dynamism of the precipitation event.

As stated earlier however, another hypothesis has to be considered here, related to polar cap patch dynamics (Lockwood *et al.*, 2005 and references therein), which could account for the pulsed structures observed in the densities. The patch hypothesis is indeed consistent with transport from the South of EUV-produced plasma into the polar cap, following pulses in the reconnection configuration at the magnetopause.

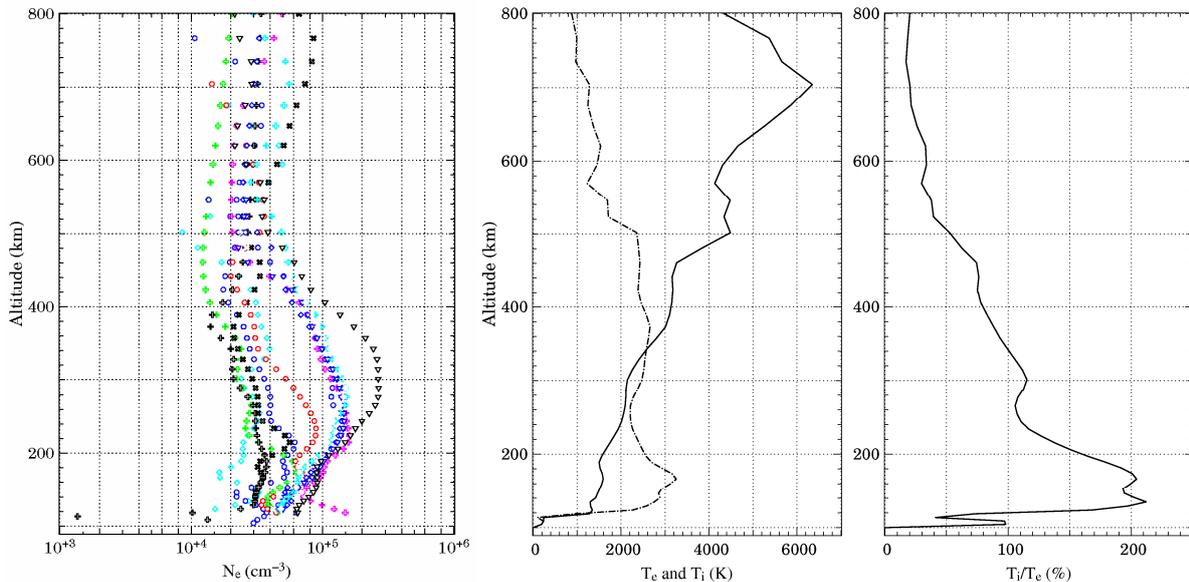


Fig. 6-5 – Electron densities in cm^{-3} and ion/electron temperatures in K as measured by the ESR 32 m radar between 08:35 and 08:55 UT with a 128-s integration (left). Each form/colour density couple represents a profile measured at a particular time. The time-averaged ion (solid line) and electron temperatures (dashed line) are plotted on the right, together with the ratio T_i/T_e .

⁴⁰ Strong E -fields in the ionosphere usually range from 40 to 100 mV/m .

Triggered by intense electric fields (say 65 mV/m), such a patch can move at a velocity $v \sim 100 \text{ m s}^{-1}$ and can lead to increased densities associated with low T_e , which is observed here. To corroborate such an assumption, the convection maps of SuperDarn would have been of precious help. However, these radars, situated in Finland and Iceland, have only a few minutes of data over Svalbard that day around 08:45 UT and rely only on a modelled convection map which reflects very badly the physical reality. The lack of convection data from SuperDarn is not surprising considering the very strong proton precipitation occurring that day.

Energetic protons can generate huge ionization cells in the D/E region that will absorb the HF and VHF signal before it gets to the ionosphere over Svalbard, and consequently the radars will get no back echoes.

To represent the complexity of this event, both assumptions, patches and frictional heating, have to be taken into account here: all in all the frictional heating seems to play the major part between 08:00 and 10:00 UT, while the patches could be responsible of the fine structure of the density/temperature profiles recorded by the ESR.

6.1.5 The DMSP F13 pass over Svalbard: a description of the particle fluxes

The Defense Meteorological Satellite Program (DMSP) operated by the Air Force is a programme involving numerous spacecraft orbiting the Earth since the 1960s in Sun-synchronous near-polar orbits. DMSP F13 was launched in 1995 in a 800 km -altitude orbit and carries among other instruments a precipitating electron and ion spectrometer SSJ/4 sampling data in the range 30 eV – 30 keV . DMSP F13 satellite passed in the ESR beam at 08:45:10 UT. The coordinates of the spacecraft were geographic latitude 77.5° and longitude 9.4° , which made it more than 6° in longitude away from the ESR location, *i.e.* roughly 150 km at this latitude⁴¹ when projected at an altitude of 100 km . This is also why the DMSP precipitating fluxes cannot be precisely representative of the ionosphere right over the ESR.

⁴¹ Considering φ_1 and φ_2 are the geographic latitudes and $\Delta\delta$ is the difference between the longitudes, the distance between two points on a sphere of radius R_\oplus is given by $d = R_\oplus \text{acos}(\sin \varphi_1 \sin \varphi_2 + \cos \varphi_1 \cos \varphi_2 \cos \Delta\delta)$.

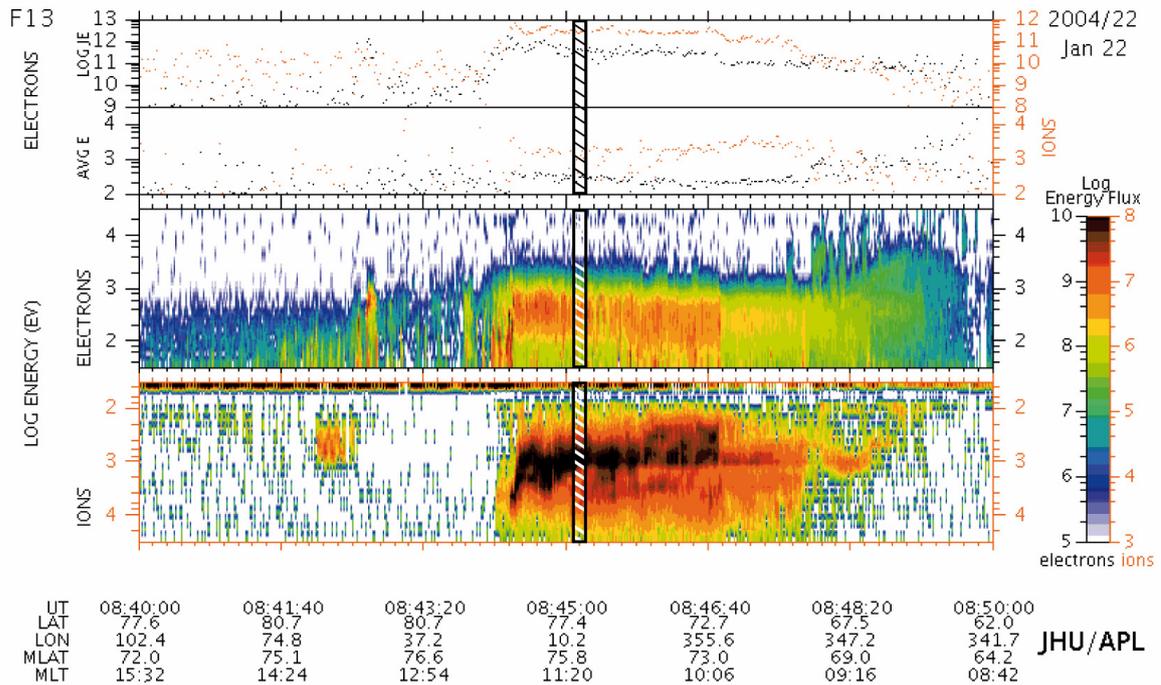


Fig. 6-6 – DMSF F13 particle and flux measurements between 08:40 and 08:50 UT. On the top panel is shown the total logarithmic number flux in $cm^{-2}s^{-1}ster^{-1}$ above the logarithmic average energy in eV for electrons (black) and protons (red). The two bottom panels represent the electron and ion differential energy fluxes ($eV cm^{-2} s^{-1} ster^{-1} eV^{-1}$). For each UT time, a magnetic (prefix 'M') and geographic latitude/longitude pair exists, which shows the satellite trail in the ionosphere. The coordination occurs at 08:45:10 UT, and is shown in black boxes (courtesy of Dr. William Denig, AFRL Space Weather Center of Excellence, USAF, MA, USA).

The ESR conjunction is shown in a white striped line on Fig. 6-6. In this plot provided by Bill Denig from the Air Force Research Laboratory (MA, USA), this period, corresponding to the location of the satellite west of Longyearbyen, is very active: energy fluxes reach a maximum, which we can clearly see on the bottom two panels of the figure. Protons have distributions centred at higher energies (around 2 keV) than for the electrons (centred around 500 eV), however with a lower intensity in general.

We also notice that the electrons are distributed in a much narrower energy range than the protons, from a few tens of eV to 1 keV at the most, while the proton effective energy range spans from a few 100 eV to more than 10 keV. At low energies, the effect of the electrons is very high in comparison to the protons.

The observations of really intense fluxes begin at 08:44:10 UT when the satellite is situated North-East of Svalbard (see also Fig. 6-2). They last over 5 minutes until 08:49:00 UT when the satellite is heading to the South-Western coast of Greenland.

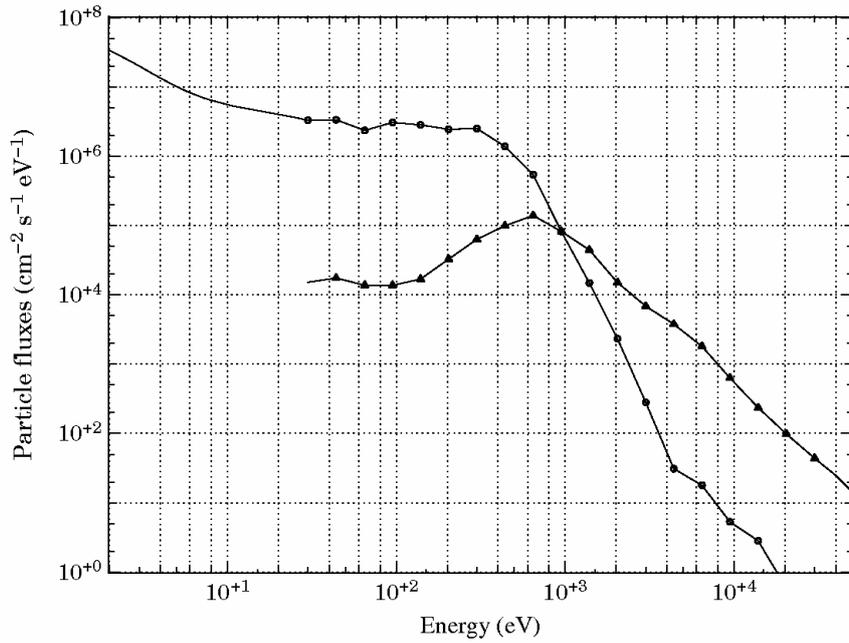


Fig. 6-7 – Differential particle fluxes in $\text{cm}^{-2} \text{s}^{-1} \text{eV}^{-1}$ function of the energy (in keV) and averaged over 30 s between 08:44:55 and 08:45:25 UT as measured by DMSP. In black circles is represented the particle electron flux distribution and in black triangles the proton flux distribution. Though the proton fluxes are at their peak nearly 100 times less intense, their average energy is twice as much, i.e. 1 keV vs 400 eV for the electrons. Each spectrum is extrapolated at high and low energies (black lines), where they show a behaviour very different from a Maxwellian.

In order to take into account the beam spreading effect, the proton fluxes were averaged over 30 s centred on 08:45:10 UT (Fig. 6-7) and extrapolated at low and high energies, i.e. below 30 eV and above 30 keV. Below 30 eV, the shape of the electron spectrum is becoming strongly non-Maxwellian. We use here a shape for the extrapolation increasing slowly with the decreasing energies (of the form $\alpha e^{-\gamma}$) to reach a second maximum at 1 eV, a curve shape correlated by satellite and rocket measurements (Hardy *et al.*, 1985; Winningham & Heikkila, 1974). This average over 30 s was also applied to the electronic distribution for the sake of consistency. This graph allows a much more accurate overview of the fluxes involved. We can then see that two peaks are present in the electron flux distribution, a powerful one at very low energies ($< 10 \text{ eV}$ nearly reaching $10^8 \text{ cm}^{-2} \text{ s}^{-1} \text{ eV}^{-1}$), the other centred around 500 eV reaching $8 \times 10^7 \text{ cm}^{-2} \text{ s}^{-1} \text{ eV}^{-1}$. As mentioned earlier, the protons occupy a wider energy range with a main peak centred around 1 keV, building up to $1.1 \times 10^5 \text{ cm}^{-2} \text{ s}^{-1} \text{ eV}^{-1}$. The total integrated proton energy flux is $1.5 \text{ erg cm}^{-2} \text{ s}^{-1}$ for an average energy of 1 keV.

Above 10 keV however, the contribution of both ions and protons is 10^3 less than at their respective peaks, and will be considered negligible in the study, which will limit the energy grid chosen for TRANS4. This assumption that very high-energy

protons and electrons do not contribute significantly to the densities and temperatures is also confirmed by the model's computations, as no significant changes are encountered throughout a typical altitude profile.

As we see it, in this particular event, protons are much more energetic than the electrons but also a 100 times less in number... which allows thinking that their contribution in terms of electron density peaks might be both important in intensity: as electrons and protons are not creating the ionizing layers at the same altitudes, we should be able to see two distinct electron density peaks, one at lower altitudes, the other higher up in the F region.

6.1.6 The Ebert-Fastie spectrometer data: the H_α and H_β lines

Two Ebert-Fastie spectrometers were running at the time of the coordination, one located at Nordlysstasjonen near Longyearbyen, called Green, the other situated at Ny-Ålesund called Black (Holmes *et al.*, 2006). An Ebert-Fastie spectrometer is a spectrometer using a spherical mirror and a plane grating with curved slits to improve the geometric aberrations and the resolution of the instrument (see Sigernes *et al.*, in preparation). In Fig. 6-8 we can see a sketch of an Ebert-Fastie spectrometer and its main features. The use of mirrors has the advantage of removing the chromatic aberrations, whereas the spectral apparatus enables to reach the diffraction limits within a compact size. When the grating turns, the image of the entrance slit S_1 is scanned across the exit slit S_2 , which output is transferred through a collector lens to a photomultiplier tube P .

The focal length of the Green spectrometer is 1 m and it measures the auroral H_β line, while the Black spectrometer, of focal length 0.5 m, is calibrated for the H_α line and can be cross-calibrated by the 630.0 nm and 636.0 nm red doublet.

Table 2 – Spectrometric information for the two Ebert-Fastie spectrometers running in Adventdalen, Longyearbyen, Svalbard and Ny-Ålesund on 22-01-2004. Each spectrometer is calibrated twice a year in November and in February (see text).

E-F Spectrometer	Focal length (m)	Number of steps N for the motor	Grating ruling density $d = 1/a$ lines/mm	Line of sight	Spectral region λ (Å)	FWHM (Å)	Owner & PI	Location
“Black”	0.5	5000	1200	Magnetic meridian	6280–6620	2.8	UAF ⁴² /UNIS C.S.Deehr	Ny-Ålesund
“Green”	1			Zenith	4820–4920	3.1		Longyearbyen

⁴² Geophysical Institute, University of Alaska, Fairbanks.

The Full Width at Half Maximum (FWHM) of a monochromatic emission line, which corresponds also to the band pass (in other words the spectral interval that may be isolated from the continuum) of the instruments, is around 3 Å for both spectrometers. When looking at the instruments theory, the physical spectra are in fact convolved with the instrumental functions corresponding to the band pass of our instruments, usually a triangle function, a convolution that yields the eventual measured spectra. This function is responsible among others for the broadening of the monochromatic lines, which often ends up with a combination of Lorentzian and Gaussian distributions, called the Voigt profile. Using the same instruments with a band pass of 2.8 to 3.1 Å, Sigernes (1996) showed that the red wings of the spectral lines could be most of the time explained by this instrumental broadening rather than through a physical origin (upward particle fluxes).

The characteristics of each spectrometer considered in this study are summarized in Table 2. The spectrometer data were kindly provided by Jeff Holmes, Dr. Dag Lorentzen and Dr. Fred Sigernes, from the University Centre in Svalbard (UNIS), in charge of the maintenance and scientific exploitation of all optical equipments at the optical station (Nordlysstajonen), Adventdalen. Dr. Boris Kozelov from the Polar Geophysical Institute of Apatity (Murmansk, Russia) provided me with some spectral processing routines and especially for the *OH* identification in the Black spectra.

While in Svalbard for the winter 2004-2005, I helped the UNIS crew calibrate the spectrometers at the end of the observation season in February, which I will summarize below.

- **Wavelength calibration**

This calibration procedure was used to process the raw data from the 22-01-2004 event for both spectrometers. The calibration is a two-step technique, involving wavelength calibration and intensity calibration, the last one being the most difficult to perform, especially in Svalbard's usual harsh weather conditions.

Two calibration chores are needed during the year, one before the season begins in November, the other when it finishes at the end of February.

The first step brings into action the now classical grating equation which our optical arrangement obviously obeys:

$$n \cdot \lambda = a (\sin \alpha + \sin \beta), \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (104)$$

where λ is the wavelength, n the spectral diffraction order, a the grating constant (often given is its inverse value known as the grating ruling density in lines/mm or grooves/mm), α the incident angle and β the diffraction angle.

The first conclusion to draw is that for given angles and groove density, $n \cdot \lambda$ is constant. As a consequence, higher orders of diffraction can appear in the spectral range considered and overlap the lines we are looking for. These higher orders must be cut off by specific filters placed in front of the entrance slits. In our case, $n = 2$, and orders 3 and 4 must be eliminated.

According to Fig. 6-8 (*left*), we can define θ and ϕ as $\alpha = \theta - \phi$ and $\beta = \theta + \phi$. We have to calibrate in wavelength the raw spectrum obtained, which is achieved by using standard emission lamps. Equation (104) can then be rewritten:

$$n \cdot \lambda = 2a \sin \theta \cos \phi, \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (105)$$

Between each step of the high-resolution stepping motor, the grating rotates at a constant angle $\Delta\theta$. Starting to rotate at an angle θ_1 , an arbitrary wavelength λ_i of a particular wavelength region is then given by:

$$\lambda_i = \left(\frac{2a \cos \phi}{n} \right) \sin (\theta_1 + (i - 1) \Delta\theta), \quad i = 1, \dots, N \quad (106)$$

where N is the total number of steps of in this wavelength region. If the angles happen to be different between technical specifications and their value during the measurements, equation (106) above simply becomes:

$$\lambda_i = \left(\frac{2a \cos \phi}{n} \right) \sin (\theta_1 + (i - 1) \zeta \Delta\theta), \quad i = 1, \dots, N \quad (107)$$

λ_i are the calibrated wavelengths under the influence of the ‘true’ start angle θ_1 . $\zeta = \frac{\theta_N - \theta_1}{\theta_N - \theta_1}$ is a calibration factor applied to $\Delta\theta$ corresponding to the normalization between the measured and theoretical manufactured angles.

In our case, we have $\zeta = 1$: the angles measured match the manufacturer specifications. However, depending on the ageing process of the spectrometric system, as well as the external conditions, some adjustments on the spectra themselves might be necessary *a posteriori*. The presence of well-known emission lines in the spectra, such as the red line doublet (630.0 and 636.4 nm) allows in the end to finely recalibrate them using again the grating equation.

The band pass BP of the instrument, defined as the FWHM of the spectral line measured at the exit slit, can be written by differentiating the grating equation with respect to the wavelength and dividing by the focal length f of the instrument so that:

$$BP \equiv \frac{d\lambda}{dx} S_1 = \frac{a \cos(\theta - \phi)}{n \cdot f} S_1 \quad (108)$$

where S_1 is the entrance slit width and $d\lambda/dx$ the linear dispersion.

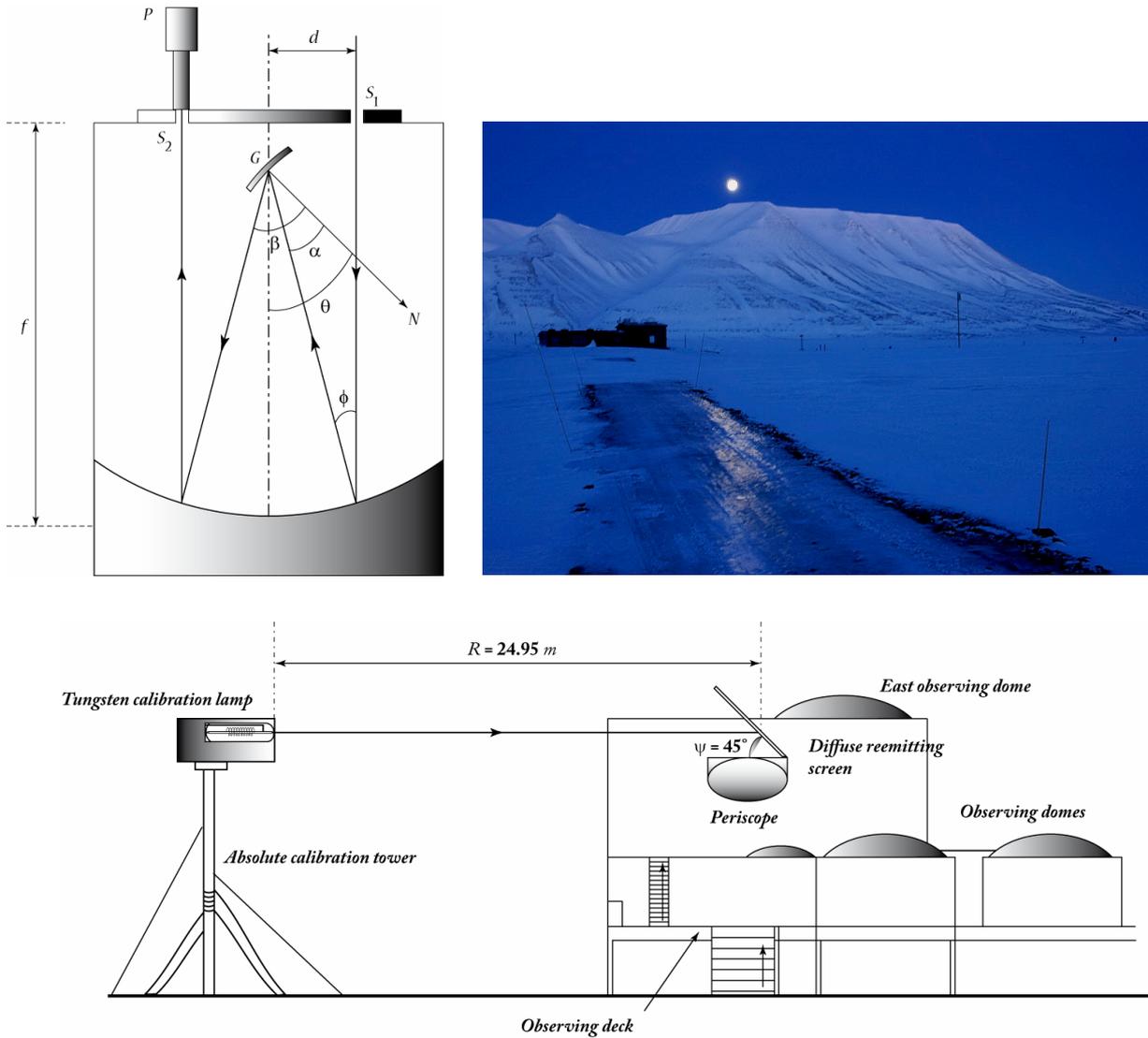


Fig. 6-8 – Ebert-Fastie spectrometric apparatus (top left) and calibration procedure in Adventdalen station (bottom). The picture of Nordlysstasjonnen, looking toward North, was taken on 22nd of February 2005 in Adventdalen valley (CS & MDD). f is the focal length of the spherical concave mirror M . N is the normal to the grating G , θ the grating angle, α the incident angle, β the diffraction angle. d is the half distance between entrance and exit slits S_1 and S_2 , so that $\tan \phi = d/f$. P is the detector (photomultiplier). For the calibration, R represents the distance between the lamp held on a tower and the diffuse reemitting screen oriented at $\psi=45^\circ$, guarantying the uniformity of the radiance.

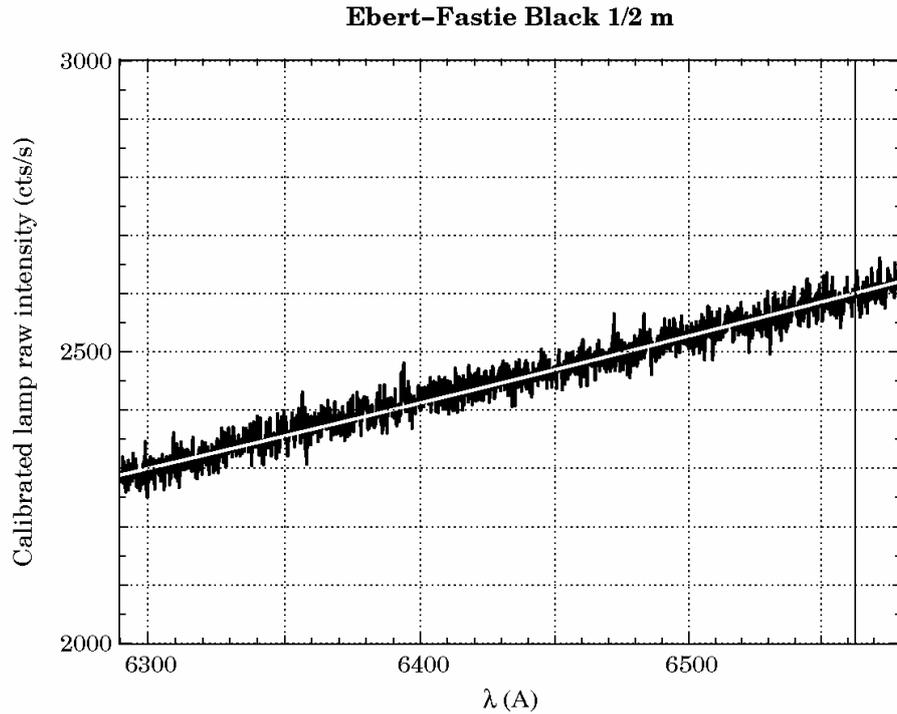


Fig. 6-9 – Raw intensity $C(\lambda)$ in counts/s yielded by the calibration lamp at a distance $R = 24.95$ m away from the diffusely re-emitting screen. The vertical line shows the position of the H_α line at 6562.8 Å. A polynomial fit marked as a white line is used to perform the calibration so that: $C(\lambda) = -1.19 \times 10^{-4} - 3.84 \times 10^{-1} \lambda + 1.19 \times 10^{-4} \lambda^2$.

- **Intensity calibration**

The second step in the overall calibration of the spectrometers is the intensity calibration, shown in Fig. 6-8 (*bottom*).

The intensity calibration in absolute units consists of studying the response of our spectrometer to a Tungsten lamp of known intensity $B_0(\lambda)$ at a distance r . The lamp is a standard FEL 200W Tungsten lamp which emits a line-free continuum in the 250 to 4500 nm region with a nominal colour temperature of 2856 K in normal mode.

We use a diffusely re-emitting screen placed at a distance R away from the lamp, inclined at $\psi = 45^\circ$ to which the spectrometer points, in order to have the most uniformly illuminated surface. This part of the plan is the most difficult as it is very sensitive to the external conditions (wind, frost, bears, etc.) even if every precautions are taken. Thus the intensity $B(\lambda)$ in $R/\text{Å}$ of the screen at a distance R away from the lamp is:

$$B(\lambda) = B_0(\lambda) \left(\frac{r}{R} \right)^2 \cos \psi \quad (109)$$

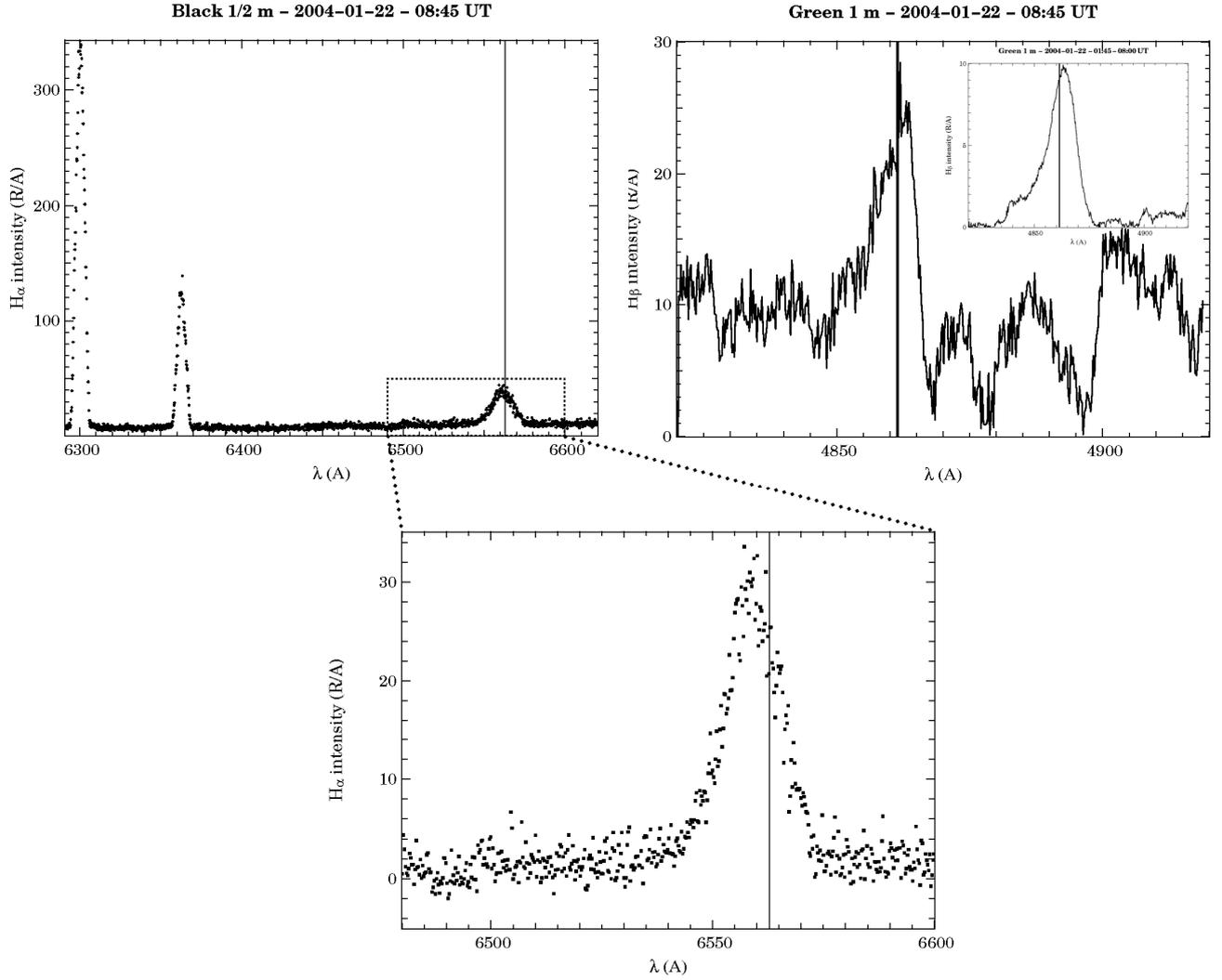


Fig. 6-10 – H_α and H_β spectra plotted in $R/\text{\AA}$ as a function of wavelength. The calibrated H_α line is from the Black spectrometer (top left and bottom), the H_β , which is not calibrated on the figure, is from the Green spectrometer (top right). The bottom figure is a detail of the calibrated H_α line which exhibits a slight blue-shift of 2 \AA . A snapshot of the H_β line is shown as an insert in the top right figure, representing in comparison the average spectrum over 6 hours previous to the time of the coordination. It shows that the measurements at 08:45 UT are very noisy and that the line is very difficult to isolate from the background.

Providing that $C(\lambda)$ corresponds to the intensity produced by the lamp in counts s^{-1} (shown in Fig. 6-9), to which we have subtracted the time-scaled background noise, we finally find the absolute intensity $I(\lambda)$ in $R/\text{\AA}$:

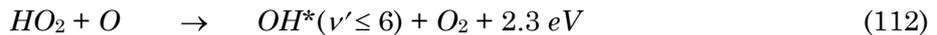
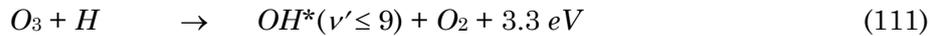
$$I(\lambda) = \frac{B(\lambda)}{C(\lambda)} I_m(\lambda) \quad (110)$$

where $I_m(\lambda)$ is the relative measured intensity of the auroral line in arbitrary units. The calibrated wavelength spectrum in intensity can eventually be produced, which is shown on Fig. 6-8. The last step is to remove the overlapping $OH(6-1)$ system of lines, which finally yields the fully exploitable H_α spectrum (Fig. 6-10).

- **Spectral interpretation**

In Fig. 6-10, I plotted the line intensity in Rayleigh per Ångström ($R/\text{Å}$) function of the wavelengths expressed in Å at 08:45 UT. The spectra have been averaged over 2 cycles of 1 minute each in order to improve the signal to noise ratio. In the left panel, we can see clearly the peaks corresponding to the auroral red doublet at 6300 Å and 6364 Å. Then, around 6560 Å, a broad peak corresponding to the H_α line is seen, testifying a slight Doppler blueshift in the line of 2 Å at the most, *i.e.* a line-of-sight velocity of 100 $km\ s^{-1}$. This shift is really weak in comparison to commonly observed blue shifts reaching 500 $km\ s^{-1}$ (Søraas *et al.*, 1994); this low value is an indication of the soft-energy proton precipitation encountered that day. Moreover an important red shift can be seen, extending almost 10 Å away from the centred wavelength λ_0 , which cannot be attributed only to instrumental broadening.

The first thing to do in order to check the accuracy of the wavelength calibration exposed above is to intercalibrate the spectrum obtained with the red lines thanks to the grating equation. Most of the time, the spectrometer may need a few adjustments if the calibration was done some months before the campaign. The red line doublet, which is not shifted, must fall exactly at 6300.3 Å and 6363.8 Å. This task can be a real pitfall, as the position of the H_α line and its corresponding Doppler shifts both depend on the accuracy of this verification. As the red line is situated far off the H_α line, and in the case of an instrumental wavelength drift, it is sometimes better to recalibrate manually the part of the spectrum around 6500 Å through $OH(6-1)$ rotational bands which show features at 6500, 6580 and 6600 Å. These bands, first discovered by Meinel (1950) in the nightglow spectrum, have been used at the auroral station in Longyearbyen since the beginning of the 1980s (Deehr *et al.*, 1980) to infer the neutral temperature in the upper mesosphere (Kvifte, 1959). The emissions of OH^* arise around 85 km in height from the reactions:



This OH contribution has been subtracted from the H_α line shown in Fig. 6-10 by using a modelled OH spectrum based on Sigernes *et al.* (2003) and described in Holmes *et al.* (in press, 2006).

For the Green spectrometer, the task is harder as no reference line is present in the wavelength range chosen to calibrate the H_β line. The data contain much noise in

the H_β spectrum, where the background level is of the order of the amplitude of the line itself.

The presence of high altitude clouds, which was a big concern throughout the day of study for the coordinated optical measurements when launching the SERSIO rocket, may also play a negative role by deteriorating the H_β line intensities along the line of sight, nearly making it drown into the background. To a certain extent, this meteorological issue may have smeared out emission lines across the sky, while the H_β line would be more scattered than H_α because of its lower leading wavelength (Rayleigh scattering possibly backed up by Mie scattering). In comparison, the fluctuations on the H_α line are very much smoother, so that the actual shape and its structure can be identified and cleansed from its weak overlapping OH features. However in this case, the intensity calibration performed will not be physically representative of what the spectral line intensity really is at ionospheric altitudes, so that the comparison with the model will prove to be impossible in terms of intensity. Moreover, over the period of interest, high background noises were recorded for both emissions and especially for H_β (the intense proton showers recorded may have something to do with it) so that caution must be observed while interpreting quantitatively the data.

6.2 Comparison between measurements and computations

The data exposed in the last paragraph have been prepared and formatted in such a way that immediate comparisons can be performed. The present part proposes to give an overview of the results and to show the power of the TRANS4 model in gaining some quantitative information about the studied event. These results must be taken as preliminary for the Balmer lines spectra as the spectrometric data are stained with great uncertainties.

As showed before, the interest of having optical data in addition to the radar measurements to deal with is to intercalibrate the model and the measurements. Starting from this point, the model then allows to access non-measurable parameters such as the densities, productions, distribution functions, heating rates, relative impact of magnetic mirroring versus collisions.

This multi-instrumental technique is especially designed for our case where the radars are probing a region at low altitudes which can not be representative of the region where particle fluxes are measured by the DMSP satellite. Low-altitude density profiles yielded by TRANS4 will be then different from what the ESR actually measured.

Unfortunately, the last cross-calibration part could not be done precisely as intensities recorded by spectrometers could not be calibrated due to the cloud coverage. Nevertheless, in order to show the code's ability to deal with complex proto-electron events, a preliminary comparison between computed spectra and real spectra is presented. We will then focus on the ESR data, while a last paragraph will be devoted to the supplementary outputs of the model and what it tells on our event in terms of ion and electron productions.

6.2.1 Optical data: modelled parameterization of the impact of protons

- H_α and H_β integrated zenith spectral profiles

We investigate here the effects of the angular redistributions on the overall shape of the spectral lines. Several cases are studied, involving no angular redistributions, magnetic mirroring effects, angular redistributions due to elastic scattering and combined magnetic/collisional angular redistributions.

Angular redistributions will affect the red-shifted part of the spectrum, while the blue-shifted peak's position will be unchanged, because it arises from sole downward (H^+ , H) fluxes. However the peak intensities will change according to the upward supplementary contribution involved, observing a slight decrease as the impact of angular redistributions becomes more important. In the event we are studying, collisions will obviously play an important role since the energies involved in the main precipitation episode are mild, a sensitivity aspect already pointed out in previous works, either experimental (Gao *et al.*, 1990) or theoretical (Basu *et al.* [1993], Galand *et al.* [1998]). Laboratory measurements on differential cross sections showed as well the energy dependence of angular redistributions (Fleischmann *et al.* [1967], Newman *et al.* [1986]). The sensitivity that the model allows concerning these parameters will be investigated through the use of different angular redistribution functions (Maxwellian and Rutherford cross section) for charge-changing reactions and elastic scattering. The magnetic mirroring issue will be also addressed, though its contribution is expected to be weak for incoming proton fluxes with an isotropic angular distribution, which is assumed to be the case here (see the early work of Bagariatskii [1958a, 1958b] and the recent confirmation of Galand *et al.* [1998]).

Let us note that weak Doppler shifts, *i.e.* wavelengths close to the characteristic wavelength λ_0 , correspond to precipitating or up-flowing particles with a pitch angle near 90° : these particles arrive at nearly right angles to the magnetic field. Similarly, the weaker the energy of the emitting particle (the weaker the line-of-sight velocity), the closer to λ_0 the emitted photon will be, resulting in a lower observed Doppler shift. Thus, at a given pitch angle, a particle of lower energy will correspond to a fainter Doppler shift.

Let us remember also that the input proton fluxes are taken from DMSP at 08:45 UT on 22-01-2004: they have an average energy of 1 keV with a flux of $1.5 \text{ erg cm}^{-2} \text{ s}^{-1}$, i.e. $9.34 \times 10^{11} \text{ eV cm}^{-2} \text{ s}^{-1}$.

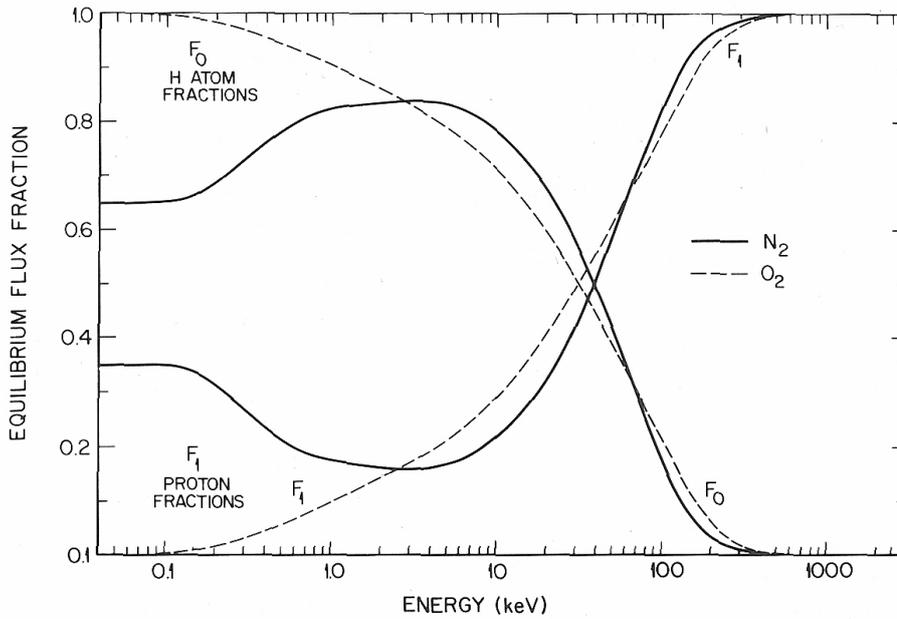
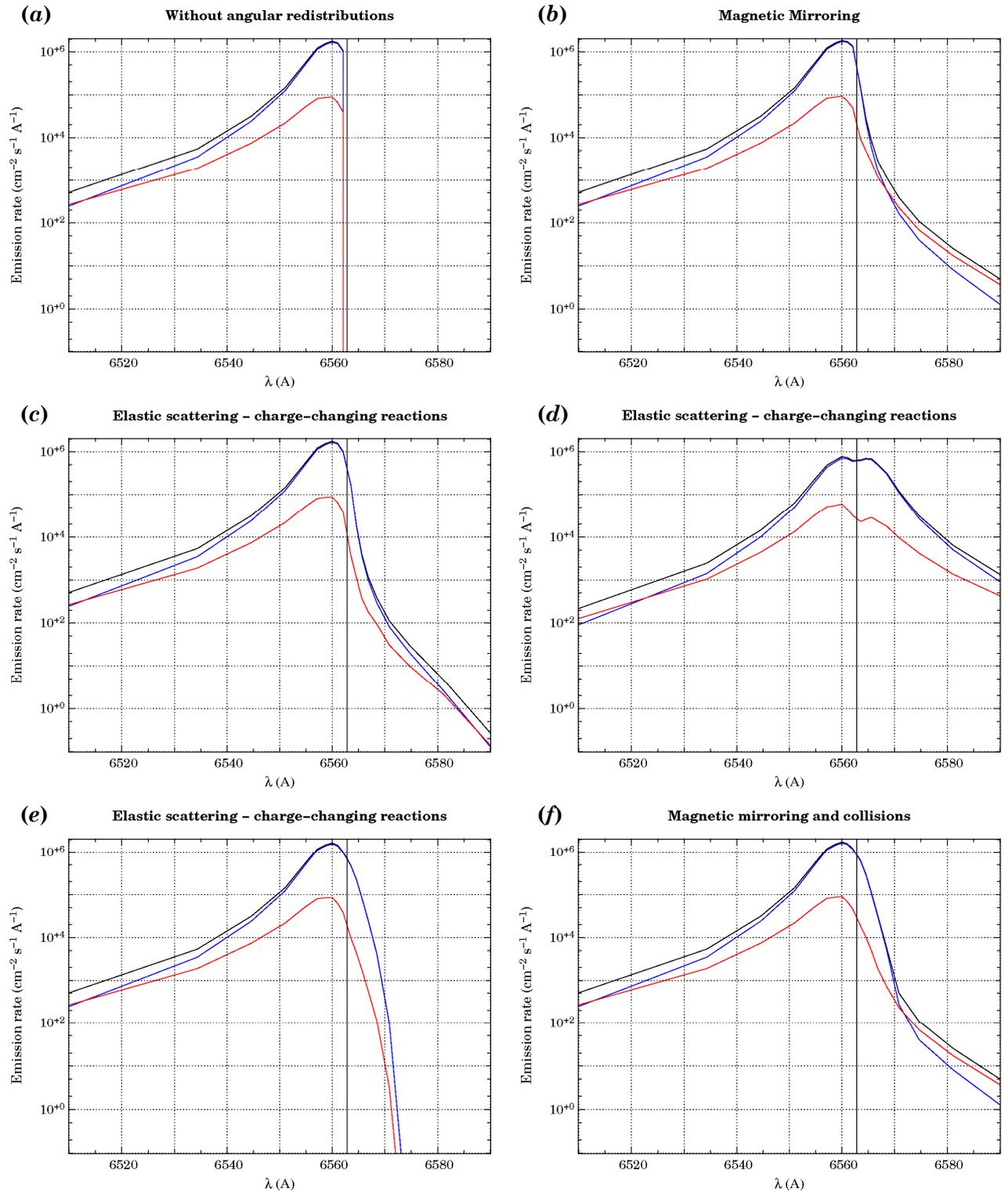


Fig. 6-11 – Partition between protons and hydrogen atoms in a charge equilibrated beam for each neutral species N_2 and O_2 as a function of energy. (after Van Zyl, 1978).

Fig. 6-12 opposite – H_α spectra computed by TRANS4 with initial DMSP proton fluxes, drawn together with the centred wavelength $\lambda_0 = 6562.8 \text{ \AA}$. In blue is shown the hydrogen flux contribution to the overall integrated emission rate in black, in red that of the proton fluxes. On panel (a), the results without angular redistributions of magnetic or collisional origins are shown. Only a 3- \AA blue-shifted peak is seen. Panel (b): with magnetic mirroring, a narrow red-shifted tail appears which extends to a few Ångströms off the centred wavelength. Panels (c) and (d): collisional angular redistributions make the line more symmetric. Here different configurations are shown for both phase functions of elastic and charge-changing scattering: Maxwellians with successively $\sigma = 0.05$ (c) and $\sigma = 0.20$ (d), and the more accurate approach of Rutherford (e). The spreading of the line with increasing angular scattering is clearly visible. Panel (f): combined contributions for magnetic mirroring effects and elastic scattering using Rutherford formula.



The neutral atmosphere is given by the model MSIS-90 (Hedin, 1991) and O densities are divided by 2 to be more representative of a high latitude thermosphere (Lilensten *et al.*, 1996).

Without angular redistribution of magnetic and collisional origin

The spectrum, plotted in Fig. 6-12 (a), is quite simple: no redshift is observed, while the blue-shifted peak is situated around 2.8 \AA short of the centred line with an intensity reaching $2 \times 10^6 \text{ cm}^{-2} \text{ s}^{-1} \text{ \AA}^{-1}$. This blue shift corresponds to a parallel velocity of 127 km s^{-1} , which is very slow in comparison to Doppler shifts commonly measured in proton events, reaching velocities up to three times as large (*e.g.* Søråas *et al.* [1974], Lanchester *et al.* [2003]). This first comment is consistent with the spectral shifts recorded from the ground in Ny-Ålesund and explained in § 6.1.6. Incoming protons of low mean energies ($\sim 1 \text{ keV}$) precipitating at the top of the ionosphere are responsible for such slight Doppler shifts, as already shown by the DMSP differential particle fluxes.

As the proton fluxes are contributing on average less than the hydrogen fluxes to the overall emission rate, and at the peak around 6560 \AA , they are only responsible for 5% of the total emission rate. However this tendency inclines to diminish at large Doppler shifts (30 \AA) where the proton fluxes become larger than the hydrogen ones, resulting in a majority contribution of precipitating H^+ that have then been neutralized. This phenomenon comes intrinsically from the distribution of equilibrium charge fractions for H^+ and H , which states the proportion of each charge state function of the energy. They are simply expressed as the ratio between electron capture cross sections (respectively ionization-stripping) and the total charge-changing collision cross section for each species N_2 , O_2 or O noted j (see *e.g.* Rees, 1982):

$$\phi_{H^+}^j = \frac{\sigma_{10}^j(E)}{\sigma_{10}^j(E) + \sigma_{01}^j(E)} \quad (113)$$

$$\phi_H^j = \frac{\sigma_{01}^j(E)}{\sigma_{10}^j(E) + \sigma_{01}^j(E)} \quad (114)$$

These definitions express that as long as energy losses remain small (which is the case at higher altitudes), charge exchange reactions (*i.e.* capture in our case) will be creating hydrogen atoms out of the initial pure proton beam, the two species then reaching a balance represented by the fractions $\phi_{H^+}^j$ and ϕ_H^j , plotted in Fig. 6-11.

At low energy, hydrogen atoms will be dominating the composition, while protons will be the major species above a few tens of keV . This preliminary remark

will remain true for the following paragraphs involving angular redistributions and will be examined in the case of collisional angular redistributions.

Impact of magnetic mirroring on spectral line profiles and altitude of mirror point

The magnetic mirroring effect, by reflecting charged particles upwards, enables the spectral distribution to get a red-shifted tail (Fig. 6-12 (b)). The computed intensity drops sharply near the centred wavelength (around $10^3 \text{ cm}^{-2} \text{ s}^{-1} \text{ \AA}^{-1}$), and then, more gradually, extends further down away from it. If fitted by a Gaussian-type distribution following the method explained in Lummerzheim & Galand (2001), the full width at half maximum on the red side reaches 2 \AA , a value inside the instrumental broadening, while on the blue side, it climbs up to 10 \AA . When we look at the spectra recorded at Ny-Ålesund for our investigation event, we can see clearly the red wing of the line, which is almost symmetric, with a $9\text{-}\text{\AA}$ wide red tail at half maximum. This confirms that the magnetic mirroring cannot explain solely the shapes observed for the H_α line, a remark to be linked with the region where the magnetic mirroring becomes effective: it mainly acts at higher altitudes, converting particle having high pitch angles to particles with lower pitch angles, hence the change of slope in the spectral distribution on the red side (Lorentzen *et al.* [1998], Kozelov [1993]).

The upward fluxes are generated by magnetic mirroring at higher altitudes, typically in the upper F_1 region and, for 10 keV protons, are well above the energy deposition region usually situated between 110 and 130 km , where the main blue-shifted peak of the Balmer lines occurs induced by downward fluxes. In our case, the mean energies involved are much smaller (1 keV with a large high energy tail as shown on DMSP records, Fig. 6-7) and the energy deposition peak is occurring between 140 and 150 km , which makes it more sensitive to magnetic mirroring effects (Fig. 6-13, *bottom*). For an isotropic initial distribution, the penetration depth for 1 keV protons precipitating in the ionosphere is typically around 150 km , which coincides with the altitude computed by TRANS4 where magnetic mirroring begins to act. As a preliminary conclusion from the model, we can indeed see on Fig. 6-13 that the effect of upward fluxes arising from magnetic reflection becomes significant at the deposition peak and makes the red-shifted tail grow with increasing altitudes: from 140 km up to 600 km , the magnetic mirroring populates preferentially the higher wavelengths, and the volume emission rate reaches $10^{-7} \text{ cm}^{-3} \text{ s}^{-1} \text{ \AA}^{-1}$ at 6570 \AA .

In comparison, at the same Doppler shift, the volume emission rate at 128 km already drops down to $10^{-8} \text{ cm}^{-3} \text{ s}^{-1} \text{ \AA}^{-1}$, while it becomes completely negligible below due to the complete absorption of proton fluxes at these altitudes.

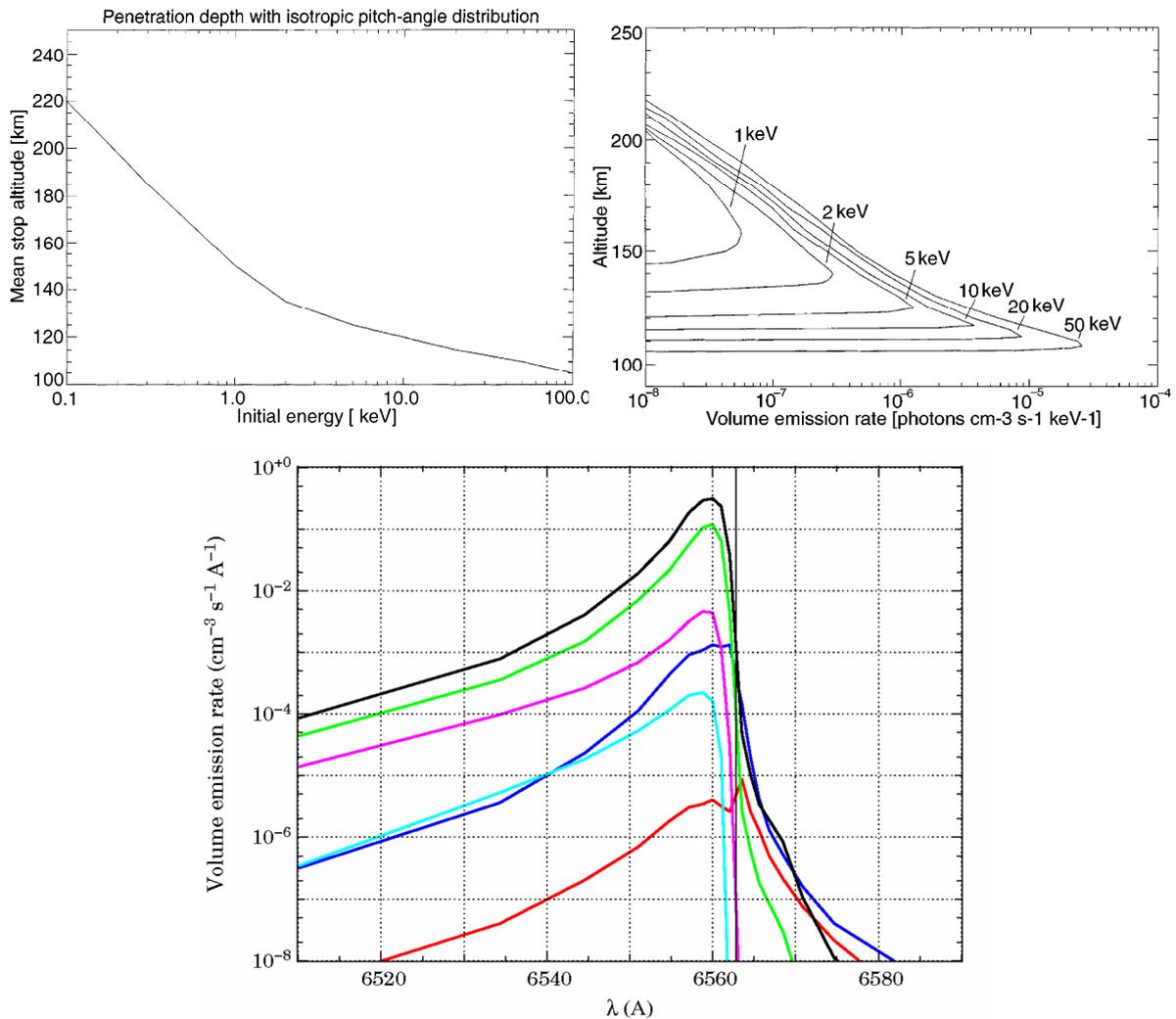


Fig. 6-13 – Penetration depth of auroral proton/hydrogen particles (top left) and volume emission rate versus altitude (top right), for protons with 1, 2, 5, 10, 20 and 50 keV initial energy using the collision-by-collision Monte Carlo scheme (after Lorentzen, 1996). The bottom figure shows the volume emission rates in cm⁻³ s⁻¹ Å⁻¹ computed by TRANS4 with the magnetic mirroring at 107 km (cyan), 114 km (magenta), 128 km (green), 138 km (black), 250 km (blue) and 600 km (red). The effective maximum emission is encountered at around 140 km, which is consistent with particles of mean energy ranging between 1 and 2 keV. Only magnetic mirroring effects are considered here.

With the increasing altitude, two peaks on either sides of λ_0 are appearing: for 90° pitch-angles, *i.e.* near λ_0 , both high and low energies are contributing to the emission rates.

But, when the altitude increases, so do the high energy fluxes, which become predominant over low-energy ones above 200 km: these high-energy fluxes are responsible for an overall enhancement of the emission, a raise particularly visible

near λ_0 where in contrast only low-energy fluxes are contributing to the emission rates, experiencing a sudden drop in intensity.

We must also notice that high red shifts are created by high-energy particles having low pitch angles, a consequence of the propagation of upward fluxes in the upper part of the ionosphere: the larger the red shifts, the more the emission is produced at high altitudes.

However, to account for more symmetric shapes for the observed spectral line which the magnetic mirroring cannot explain, we will now turn to the study of the effect of collisions on the overall shape of the lines, as shown in Fig. 6-12.

Study of collisions for charge-changing and elastic collision reactions

A few cases have been considered (Fig. 6-12, (c), (d) and (e)) in order to show the influence of collisional angular redistributions on the shape of spectral lines, which will serve as groundwork for the comparison between data and the model exposed in the next paragraph.

Not surprisingly, the shape of the lines can become dramatically sensitive to collisional redistributions, which seem to play a larger role than the magnetic mirroring. In fact a real modulation of the red-shifted part can be performed and is very much dependent on the phase functions chosen to account for this mechanism, an issue already addressed in § 4.2.3.

A Maxwellian distribution with a standard deviation σ ranging between 5% and 20% was first chosen and the results are shown in Fig. 6-12 (c) and (d). The red-shifted tail broadens significantly between the two cases, from a couple of Å to 7 Å, a value that equates approximately the blue-shifted part of the line. For $\sigma = 5\%$ on the left part, the full width at half maximum on the right side is comparable to that of the mirroring effect, *i.e.* 1 to 2 Å. In comparison, this value can extend up to 8 Å in the extreme case of a Maxwellian of $\sigma = 20\%$ (Fig. 6-12 (d)), which indicates that when choosing a wide angular redistribution due to collisions, computed Doppler shifts can become consistent with the measurements: the first conclusion to draw is that, compared to magnetic mirroring, collisional angular redistributions play the major role at least at low Doppler shifts in the creation of the observed spectrum, a remark that was previously put forward to account for H_β lines (Lanchester *et al.*, 2003). The line can become in this case completely symmetric, with a second peak appearing at longer wavelengths near 6565 Å. Here again, this is an indication that strong fluxes are generated by particles having frequently changed pitch-angles and energies because of the increasing number of collisions at low altitudes, while at λ_0 , only a few particles remain unchanged.

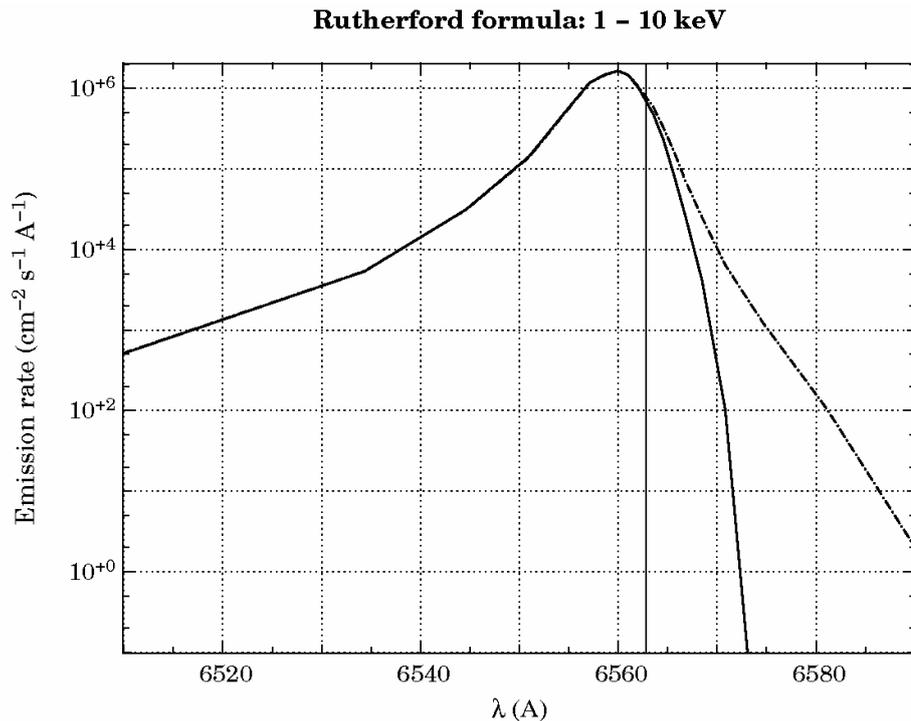


Fig. 6-14 – H_α emission rate Doppler profile computed for collisional angular redistributions applied successively below 1 keV (solid line) and below 10 keV (dash-dotted line). One can see the red wing extend significantly in amplitude when angular redistributions below a higher threshold are included.

All in all, the angular redistribution due to collisions appears to isotropise the fluxes in the lower ionosphere, while at high altitudes, changes in pitch angles and energy occur less often because of the decreasing atmospheric density.

These results shed a bit more light on what was explained at the beginning of § 6.2: soft protons are more likely to be sensitive to collisions, hence the choice of the phase function that remains a crucial issue. If we increase the number of angles accessible for a given incoming particle colliding with a neutral species, both proton and hydrogen upward fluxes generated will be strongly enhanced, and especially since collision cross sections (and charge-changing reaction cross sections even more so) remain high under 10 keV.

The Rutherford phase function (Fig. 6-12, (e)) was chosen in the next paragraphs, in order to account for the collisional mechanisms more accurately than our step-by-step Maxwellian estimate, but this last approach has also its drawbacks. Indeed, we must point out the necessity for future laboratory investigations to quantify the energy dependence of the Rutherford phase function, more precisely of the ε parameter, which is still unknown for particles such as protons and hydrogen atoms.

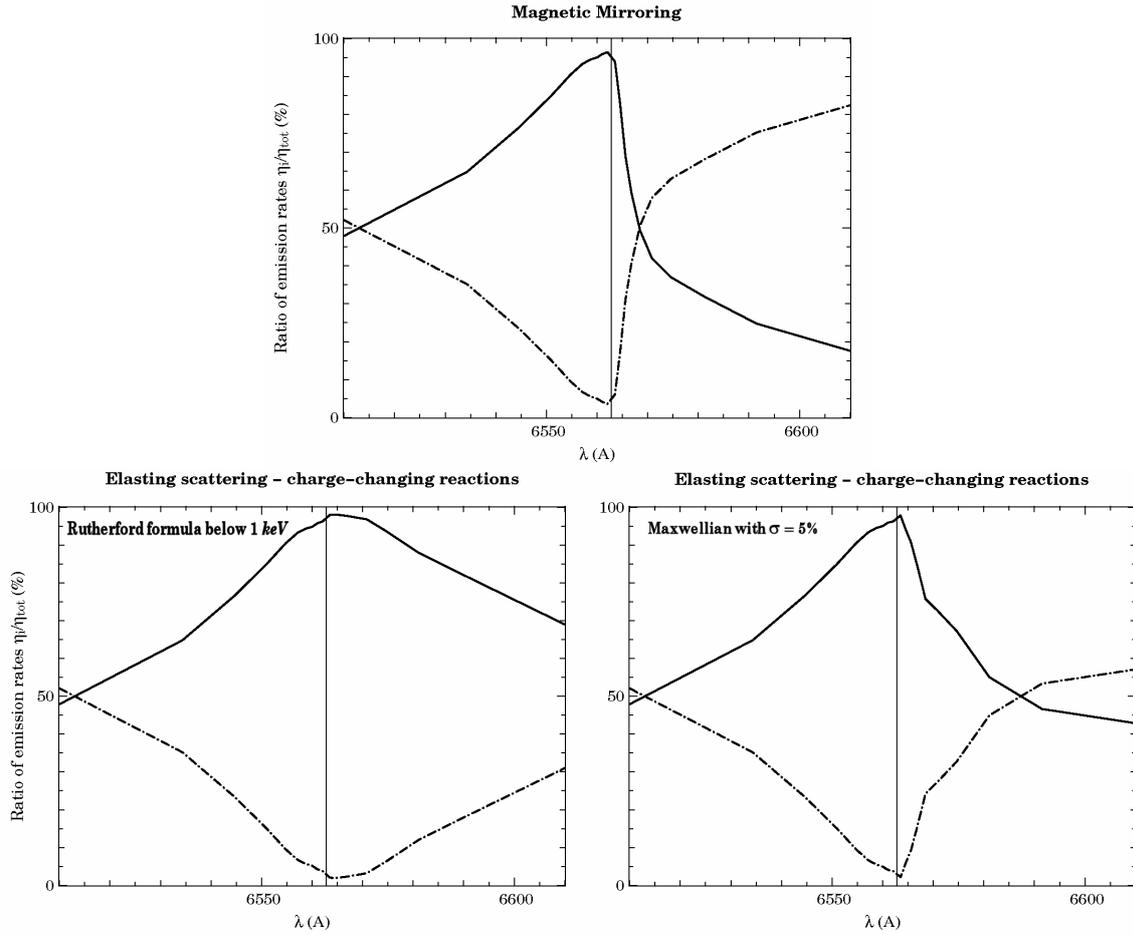


Fig. 6-15 – Ratio of emission rates computed by TRANS4 for magnetic mirroring conditions (top) and for a phase function describing the angular redistributions encountered in charge-changing reactions and elastic collisions: the Rutherford formula (bottom left) and a Maxwellian distribution ($\sigma = 5\%$, bottom right) are used. The solid line represents the ratio η_H / η_{tot} , where η_H is the emission rate produced by a hydrogen atom excited by precipitating hydrogen atoms. Similarly, the dash-dotted line is the ratio η_{H^+} / η_{tot} , where η_{H^+} is the emission rate produced by a H atom excited by precipitating protons.

Forward scattering is assumed for particles having energies above 1 keV, but this limit may be extended to higher energies depending on the event chosen. This physical limit will modulate the extent of the red wing to higher energies as shown in Fig. 6-14 for a threshold of 10 keV instead. The blue part of the spectrum is unchanged but the red wing is more raised which confirms the sensitivity of the results to the Rutherford parameter. Including redistributions at high energies can have a dramatic effect and may change also the position of the peak in the case of high energy protons precipitating. This was already emphasized in Lanchester *et al.* (2003) in the case of H_β , and we can now extend these conclusions to H_α .

Fig. 6-15 shows the ratio of emission rates related to the separate contributions of proton and hydrogen fluxes in the excitation of hydrogen atoms responsible for the

emitted wavelength. We see the evolution of these contributions when two different phase functions, one taken out from Rutherford's formula (redistributions below 1 keV), the other being a Maxwellian of $\sigma = 5\%$. In the Rutherford angular redistribution, protons and hydrogen atoms contribute equally at very high red and blueshifts (respectively at around 6620 Å and 6515 Å), as for the Maxwellian redistribution, this tendency goes down to lower Doppler shifts: contributions become equal at 6585 Å. The proton flux becomes higher at high Doppler shifts, *i.e.* at higher energies, which is consistent with the charge fractions in a charge-equilibrated beam (H^+ predominant at high energies, H at lower energies, Fig. 6-11).

Combined effects and detail of the impact of (H, H^+) fluxes on the overall distribution

In light of the preceding collisional study, we are quantitatively comparing in this paragraph the spectral data presented in § 6.1.6 with the model's outputs including the magnetic mirroring and Rutherford collisional angular redistributions (Fig. 6-12, (f)). The results of this comparison is shown in Fig. 6-17. So as to take into account the spectrometer's resolution, the profiles produced by the models are convolved with the instrumental function which is taken as a triangle function with different widths at half maximum, spanning from the nominal FWHM listed in Table 2 (around 3 Å) to larger values (8 Å). By degrading artificially the resolution of the instrument, we will show that the model can reproduce the measurements very well.

The discrepancies observed between the model and the measurements were at first a real issue, and I had to go back to the experimental side of the event. What could be the origin of such a discrepancy? Riddles in the dark. What was the factor that couldn't be mastered by any means and that is not related to a physical process occurring in the ionosphere? The weather is; and the experimenters present that day at Svalbard confirmed this first suggestion. The big unknown is of course the intensity of the cloud coverage, and as previously emphasized, intensity calibrations and background subtraction are much sensitive to these uncertainties. Line profiles are spreading while the background can be increased a lot. That is exactly what happens with H_β before and during our observation times: Fig. 6-10 is in this way the epitome of low-atmosphere effects combined with a proper ionospheric disturbance. We finally end up with so high a background that the line can be barely identified, which makes it impossible to use straightforwardly.

Therefore, the calibrated intensity shown in Fig. 6-10 is by no means a precise intensity calibration (the units $R/\text{Å}$ cannot be taken directly for comparisons with the model). The issues linked with the calibration should be solved by Jeff Holmes and Fred Sigernes (UNIS, Svalbard) in the next winter time when the spectrometer will be recalibrated before the opening season.

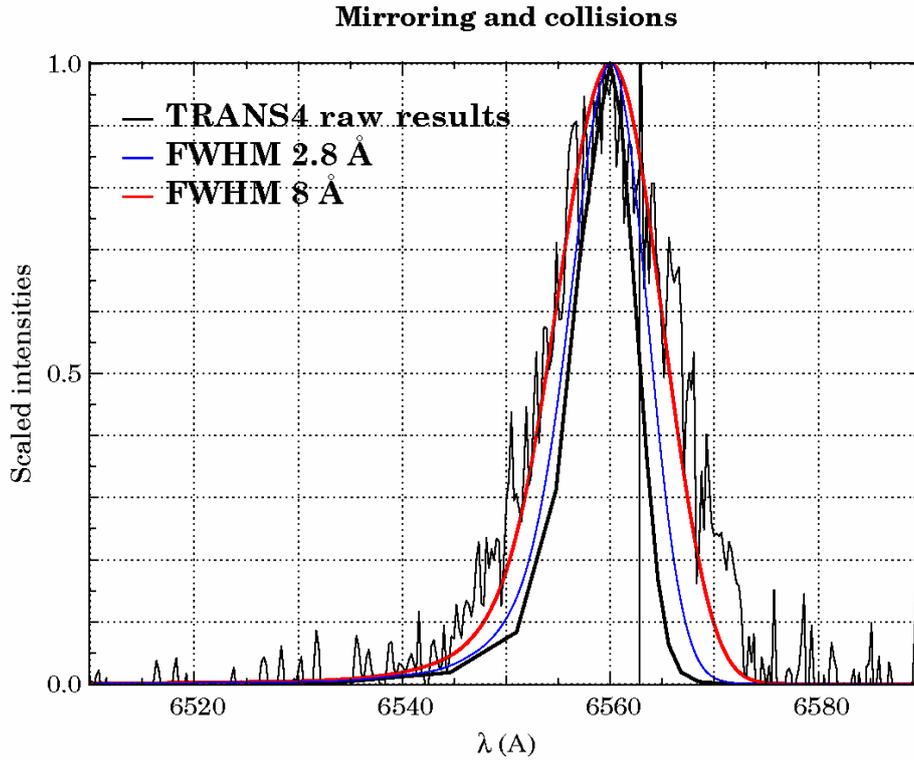


Fig. 6-16 – *First out-of-the-box comparison between spectral data recorded at Ny-Ålesund (discontinuous line) and the model (black line). A triangle function of $FWHM = 2.8 \text{ \AA}$ was first chosen for the instrumental function, which was then convolved with the raw results from the model: the resulting intensity is drawn in blue. When using a triangle function of $FWHM = 8 \text{ \AA}$, the model yields the resulting line intensity which is drawn in red, matching the measurements quite well.*

Our hearts in our boots, we have to forget the intensity as a reliable parameter in this context. Thus, in the next paragraphs, all line spectra have been scaled to unity in order to make comparisons full of sense, which, if not consistent in amplitude, keeps at least the physical shape of the lines.

In Fig. 6-16, we present the first comparison between the model, drawn in black solid line, including angular redistributions (magnetic mirroring and Rutherford scattering applied below 1 keV) and the spectral intensity recorded by the Black spectrometer (thin shaky line). The model is convolved with the instrumental function, a triangle function of successive FWHM equal to 2.8 \AA (blue line) and 8 \AA (red line). As regards the width of the distribution, the unconvolved profile is not matching the measured profile very well. The narrow nominal profile of the Black spectrometer cannot explain by itself the differences observed. The red *O* lines (at roughly 250 km) are thin and we are approaching in their case the resolution of the instrument of 2.8 \AA , which rules out the instrumental cause for the dispersion observed.

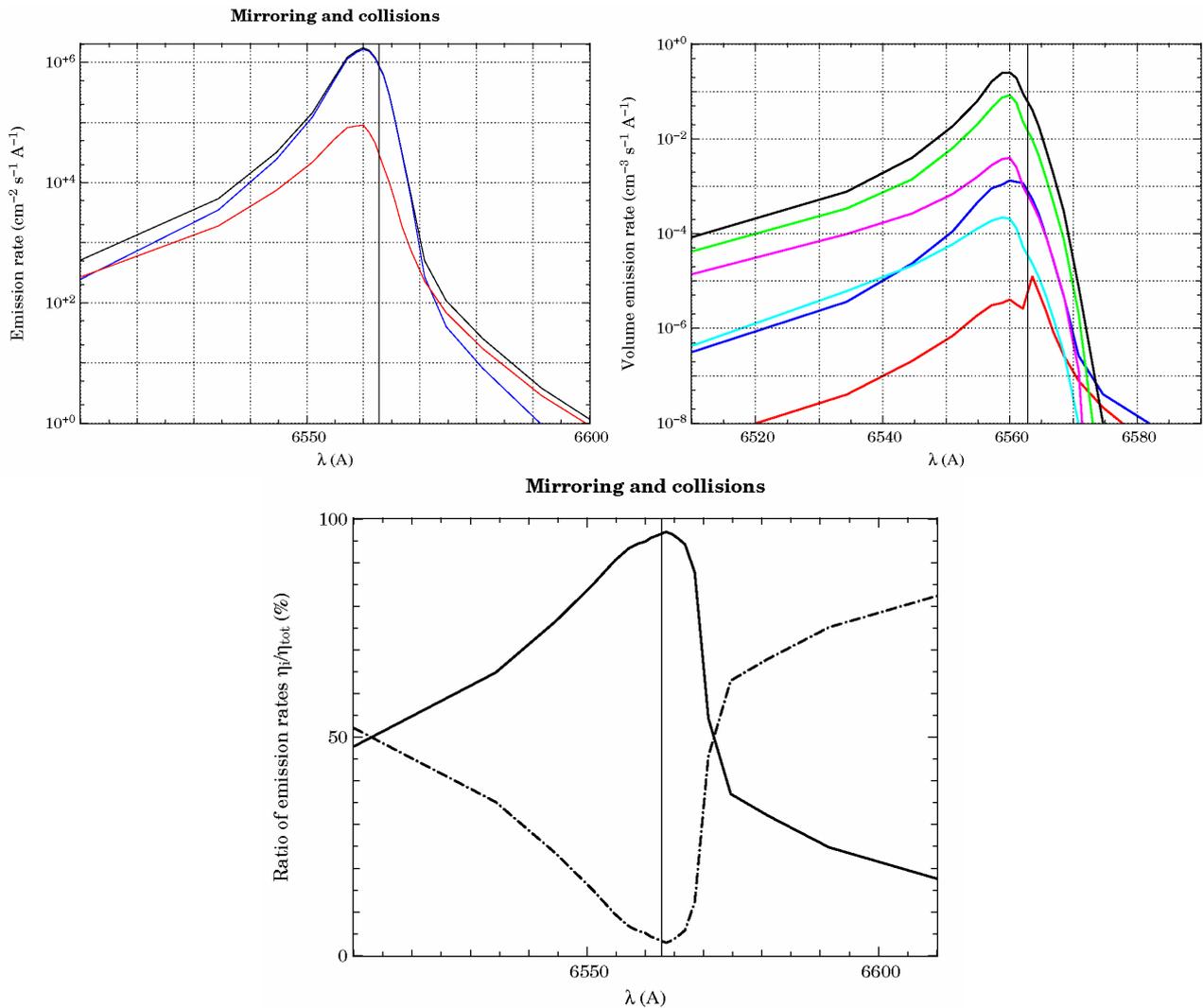


Fig. 6-17 – H_α spectra yielded by TRANS4 when taking into account angular redistributions of both magnetic collisional origins under Rutherford's approximation for the phase function. The top left figure shows H_α emission rate function of the wavelengths, the top right figure the detail of altitude contributions to the volume emission rate. The same colour code as in Fig. 6-13 is used 107 km (cyan), 114 km (magenta), 128 km (green), 138 km (black), 250 km (blue) and 600 km (red). In the bottom figure, the ratio of the contributions of proton (dash-dot) and hydrogen (solid line) to the total H_α emission rate are plotted.

In the case of hydrogen lines, which are occurring at much lower altitudes, we have to increase substantially the width of the instrumental function to get profiles similar to those recorded by the instrument. We have degraded artificially the resolution of the instrument, but most important, we still keep a piece of information on the shape of the distribution itself. This trick can be interpreted as an estimate of the meteorological impact on the ionosphere.

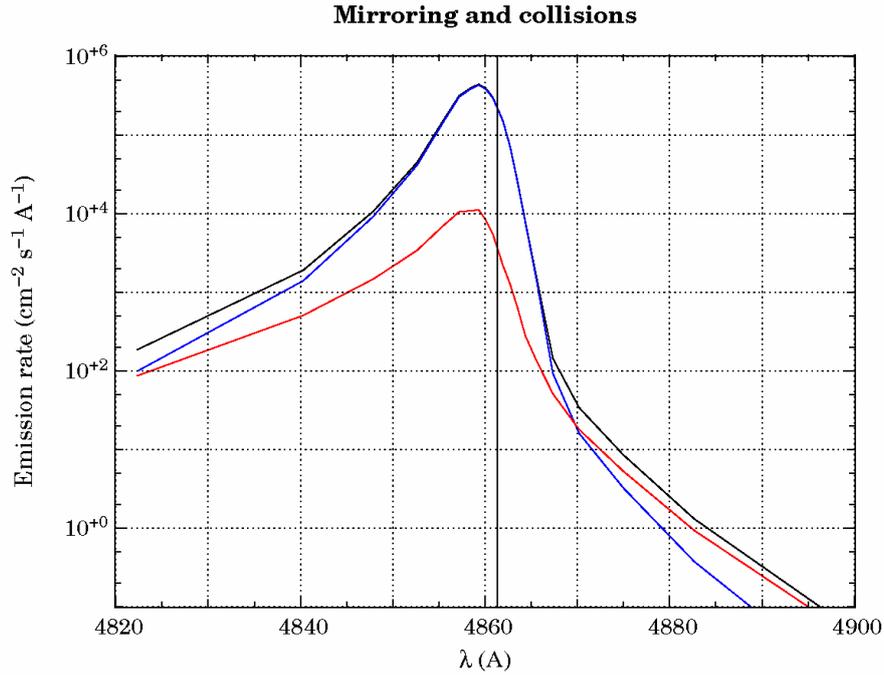


Fig. 6-18 – H_β emission rates including angular redistributions of magnetic and collisional origins. In blue we plotted as usual the hydrogen contribution to the emission, and in red the proton contribution.

We end up with a *seeing*-like appreciation of the event in terms of observational quality for the H_α line. We get a resolution equivalent to a Gaussian of standard deviation 8 \AA , *i.e.* almost 5 \AA more than the theoretical spectral resolution of the instrument. This is large, but still exploitable through our modelling, which gives a precise prediction of the shape of the wings of the spectral line and therefore on the energy/pitch angle parameterization of the particles responsible for the emission.

For the first time then, we can see the TRANS4 model as a weather indicator which allows retrieving the primary shape of the line if it had not been disturbed by the clouds, and to interpret it physically.

The main results of our approach are illustrated in Fig. 6-17, where emission rates and volume emission rates for given altitudes are plotted. Magnetic mirroring and Rutherford collisional redistributions are taken into account: we can see clearly the superposition of both contributions on the top right plot, separately explained in the previous paragraphs.

Magnetic mirroring becomes important at higher altitudes and is particularly significant at high Doppler shifts, while the angular distributions due to elastic and charge-changing reactions reach their full power at lower altitudes and for redshifts comprised between 1 and 8 \AA .

The ratios of emission rates drawn in Fig. 6-17 (*bottom*) are illustrating well this double impact and can be seen as a spicy “melange” of magnetic and collisional redistributions previously depicted in Fig. 6-15: the red wing reveals a greater

impact of hydrogen atoms at low red-shifts like in the Rutherford scattering case. For higher red shifts, the protons take the most important part in the emission, rather matching the conclusions that were drawn in the magnetic mirroring case.

Preliminary results for H_β

Following the validation of our approach in terms of angular redistributions and spectral widths, we show in Fig. 6-18 the emission rates expressed in $cm^{-2} s^{-1} \text{Å}^{-1}$ for H_β . The overall intensity is smaller than for H_α by a factor 2, which is consistent with the preliminary model exposed in Galand (1996). Both collisions and magnetic mirroring are easily seen in the plot, the former at lower redshifts the latter at higher ones. These results have now to be confronted to the experimental test, an issue I must work on with regards to other spectrometers available in Svalbard (see next paragraph).

• Limitations and future improvements

Several limitations to this approach, which were mentioned earlier, have to be put forward. Firstly, the cloud coverage that day did not allow us to retrieve the absolute intensities recorded by the Ebert-Fastie spectrometers, which clamps down on our initial ambition to calibrate *a posteriori* the model at low altitudes with the spectral data. The main effect of Rayleigh scattering is to dampen the intensities effectively measured and to broaden the peaks, which makes it another physical phenomenon to take into account in the modelling that is completely independent from the instrument's capability of separating lines.

A second issue deals with the spatial and temporal variability of precipitation, which was very dynamic at the time of the coordination. A good indication of the state of the ionosphere and its link with macroscopic phenomena would have been given by the convection patterns measured from SuperDarn; however no reliable data is available for this day. Our model is then unable to model the precipitation event. The use of averages in flux and optical data as inputs to TRANS4 was then a means chosen to keep the statistical validity of the comparison between our model and the data.

A third issue concerns the proper wavelength calibration of the optical instruments for this particular day, which can be greatly improved in light of the data reduction that has to be performed before and after the event for future comparison. My calibration work on the Black spectrometer data showed moreover that the spectrometer is undergoing a significant non-linear drift in wavelengths, an issue that is being addressed at the moment at the Auroral Station. Cross calibration cannot be performed precisely with the red line doublet because it is situated too far away from the H_α line. The solution of using *OH* bands to do it is not very satisfactory as their main features of the (6-1) band are not well identified in the spectrum.

Some improvements are still possible for a more in-depth investigation, especially on the H_β line, though this line is more sensitive to the Rayleigh scattering. The Auroral Station has in this frame a high-resolution spectrometer available, called a HiTIES⁴³, run by the University of Southampton (P.I. Dr. Betty Lanchester) and calibrated for the H_β line (Lanchester *et al.*, 2003). It examines the line in the magnetic zenith at a resolution of 1.3 \AA with a 60 s sampling, allowing long duration exposures and a very good signal-to-noise ratio. Some contacts have been made in this way, and better H_β data may become available in the very next future.

After the optical part and the first comparisons presented, we need now to turn to the radar data and to see if we can model the density and temperature profiles measured by ESR, two parameters that are part of the standard sets of physical outputs yielded by the incoherent scatter analysis. This is the ultimate part of our talk.

6.2.2 Comparison to radar data and validation of the approach

This part is dedicated to the comparison with ESR data, namely electron densities and ion and electron temperatures. I will show that, in order to explain the data, convection electric fields have to be taken into account in the model as I theoretically explained it in § 6.1.4, though the lack of convection maps for instance from SuperDarn remains striking. This puts another limitation on our approach; nonetheless a lot can be inferred from the simple assumption that consists in adding manually the intensity of the electric field, which I will show the impact on the density profiles and temperatures. A wisp of our model's preliminary results will be presented in the end concerning ion densities and productions, which will round off the third act before the end of the play itself.

Before getting straight into the discussion, it is not useless to remember the geomagnetic configuration of the ESR beam, which was expounded in more details in § 6.1.3. The beam of the 32-m antenna was inclined at 70.8° to the west, intercepting 150 km away the DMSP satellite measuring the precipitating electron and proton fluxes at an altitude of 800 km . The all sky camera centred on the red line (Fig. 6-2) is also showing that conditions here and there were quite different: less intense precipitation was occurring above ESR in comparison to those measured by the satellite, take as an input to the model. We are then expecting lower measured densities in the E region than what the model gives: we will see that our modelled densities are matching exactly this scenario.

⁴³ High Throughput Imaging Echelle Spectrograph, see Chakrabarti *et al.* (2001).

• **The ESR measured electron densities and temperatures**

In Fig. 6-19, we plotted the electron density height profiles produced by the model in the case of combined electron-proton precipitation versus the electron densities recorded by ESR and averaged here over 20 minutes of sampling. This mean value is then representative of the ionospheric conditions around the coordination time at 08:45 UT while the DMSP satellite was at 800 km. The ESR error bars are drawn at altitudes higher than 300 km.

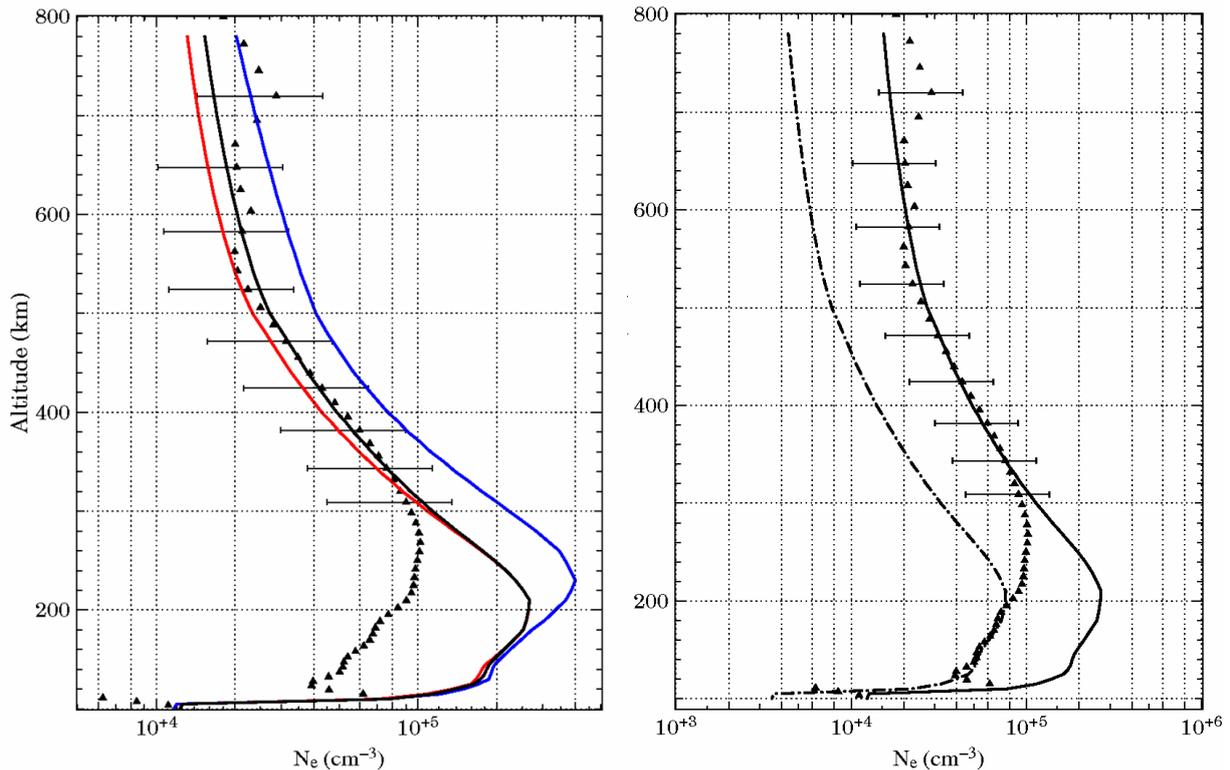


Fig. 6-19 – Density profiles computed by TRANS4 under 3 different convection electric field conditions (left) and compared to 20-minute averaged densities measured by ESR (triangles). In blue is plotted the densities corresponding to $E = 20$ mV/m, in black $E = 65$ mV/m and in red $E = 80$ mV/m. Error bars are also represented above 300 km where uncertainties become large. The figure on the right represents the 65 mV/m densities drawn with a solid line. The best match between the model and the experimental data is occurring between 300 and 800 km. The dash-dotted line are the densities divided by 3, which enables to match the ESR measurements at low altitudes.

Assumptions: a first approach to electric fields

The contributions of different electric fields, spanning from 20 mV/m to 80 mV/m, to the overall electron densities is clearly seen. As we noted before (§ 6.1.4), we expect first a drop in the densities in the F region due to the favoured presence of the very reactive radical NO^+ . The importance of NO^+ up to very high altitudes will find a justification later on when studying the repartition of ion species

in the ionosphere. For 20 mV/m electric fields, densities reach their peak at 240 km , with values up to $5 \times 10^5 \text{ cm}^{-3}$.

For higher electric fields, the peak tend to decrease in altitude as most of NO^+ are encountered in the upper F₁ region, from 240 km to 210 km , a tendency that seems to mark time with growing intensity since no differences are seen between densities computed with 65 and 80 mV/m . The peak values drop down by a factor 2 from $5 \times 10^5 \text{ cm}^{-3}$ to $2.5 \times 10^5 \text{ cm}^{-3}$ when changing from 20 to 65 mV/m .

Higher up, this deviation stabilizes. Differences become significant again between 65 and 80 mV/m at higher altitudes which is consistent with a NO^+ layer moving to higher heights when the electric field is increasing. The results with $E = 65 \text{ mV/m}$ seem to be the best to model the ESR data in terms of amplitude and shape: though below 250 km the computed densities are larger than measured densities by a factor 3, a perfect match is found between 300 and 800 km . This difference is no surprise: as emphasized in the description of the data, we expect the model to be accurate ideally at 600 km because the electron and proton fluxes recorded by DMSF are representative of the region probed by EISCAT at this altitude. Below that and especially in the first few hundred kilometres along the ESR beam, we are geographically and magnetically far from the conditions traversed by the satellite and this is another proof that conditions were quite different from one probed region to another. On the all sky cameras, we saw that the region probed at 100 km by the ESR beam was probably much quieter than the upper regions. This also confirmed by the model and, as shown in Fig. 6-19 (*right*), a factor 3 in electron densities is required at low altitude to account for the data. The shape of the densities at the peak are then very well reproduced, which indicates that we have taken into account the correct parameters such as electric field and geomagnetic activity. We already showed that the electric field through the frictional heating has an impact first on temperatures and then on densities: we will now focus on ion and electron temperatures and see how we can validate the overall value of the electric field in our case study.

Electron and ion temperatures

The temperature profiles for ions and electrons are plotted in Fig. 6-20 for each electric field, 20 mV/m (blue), 65 mV/m (black) and 80 mV/m (red). The main differences are seen for the ion temperature. The low-altitude data showed a large increase from a few 100 K to more than 3000 K , which obviously cannot be reproduced by a quasi nonexistent electric field. Only large E -fields can account for altitude profiles up to 400 km , which confirms our preliminary analysis on densities. At higher altitudes however, the model diverge from the data, which can be explained by the ESR poor ion temperature sampling and the frequent errors in the standard GUISDAP analysis: the average cannot recover from this bias and we get underestimated measured profiles. The huge discrepancies observed above 600 km is

an indication of the structure of the ionosphere which is stratified in independent layers coming from different origins: we must remember that the model gets a sample profile overhead Svalbard and not along the ESR beam itself: it would suppose to know the conditions straight above every point in the beam, which is currently impossible to access.

The growth of the ion temperatures at higher altitudes is mainly due to the diffusion of minor species in the ionospheric gas (mostly composed of O^+), a diffusion which becomes important in the upper F region, making the ion temperatures grow very fast until they decrease again higher up in the ionosphere (usually $< 3000 \text{ km}$) because of the reduced number of species. This is the origin of the polar wind, first confirmed experimentally by Hoffman (1970)⁴⁴, which consists mainly of electrons, H^+ , He^+ and O^+ ions escaping from the polar ionosphere and moving along geomagnetic field lines. It arises classically from ambipolar electric fields created by the slight charge separation between electrons and the major ion O^+ : ions are accelerated upwards in order to achieve charge neutrality with the faster upflowing electrons (see the review of Ganguli, 1996). Because of the polar wind, most of the magnetospheric O^+ ions originate in the polar cap ionosphere. Moreover, this diffusion can be greatly enhanced by the presence of convection electric fields, resulting in a fast-growing ion temperature at altitudes above the F region, which is the case in our event.

Computed electron temperatures vary much less in comparison, and not linearly: all three temperatures corresponding to the three different electric fields end up very close to each other and inside the radar uncertainties above 300 km . The difficulty of modelling temperatures lies intrinsically in the state of the ionosphere which was varying extremely fast in comparison to densities: in a few minutes' time, all kinds of temperature values were observed which literally fills the graph in Fig. 6-21.

In this context, the best physical idea of the state of the ionosphere is given by an average over 20 minutes, but this gives only an idea. A parameter which is not so much sensitive to these huge variations is the ratio T_i/T_e , also plotted in Fig. 6-21. For each couple of profiles (T_i, T_e) at one particular time, the ratio allows to point the regions where electric fields become important. Two regions can be highlighted: when $T_i > T_e$, which is the case below roughly 400 km on average in ESR data, electric fields are playing a significant role; when $T_i < T_e$, *i.e.* above 400 km , the dynamics of the ionosphere is mainly lead by kinetic vertical mechanisms where no frictional heating occurs. The main features are modelled correctly by both 80 mV/m and 65 mV/m electric fields; the latter one reaches moreover a very good agreement between 150 and 400 km .

⁴⁴ By the way, let's remember doubly-charged ions... Apart from the polar wind, Hoffman discovered also O^{++} ions thanks to the very same satellite Explorer 31 (§ 1.1). Interesting shortcut, isn't it?

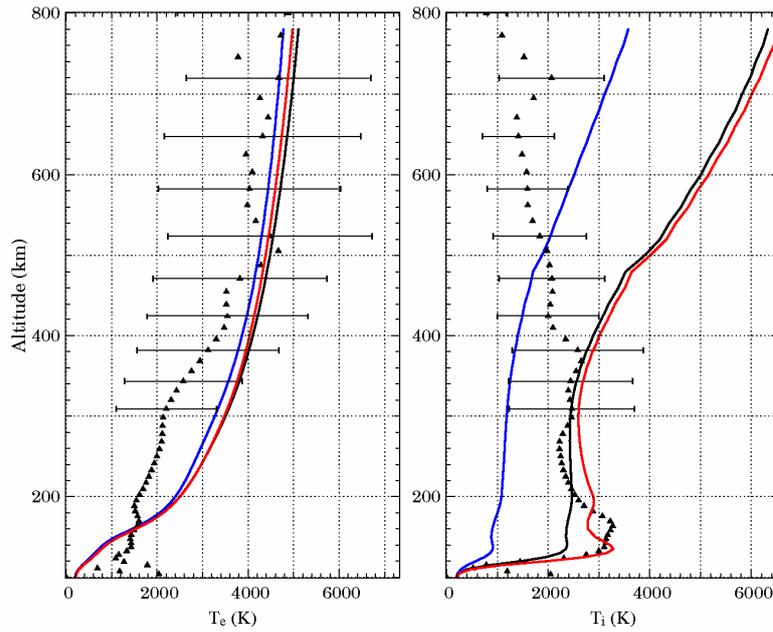


Fig. 6-20 – Electron and ion temperature altitude profiles in K computed by the model and compared to the ESR data averaged over 20 minutes in black triangles (see figure below for complete legend). Error bars for the ESR data are drawn above 300 km.

Eiscat ESR - 22-01-2004 - 08:35 UT - 08:55 UT

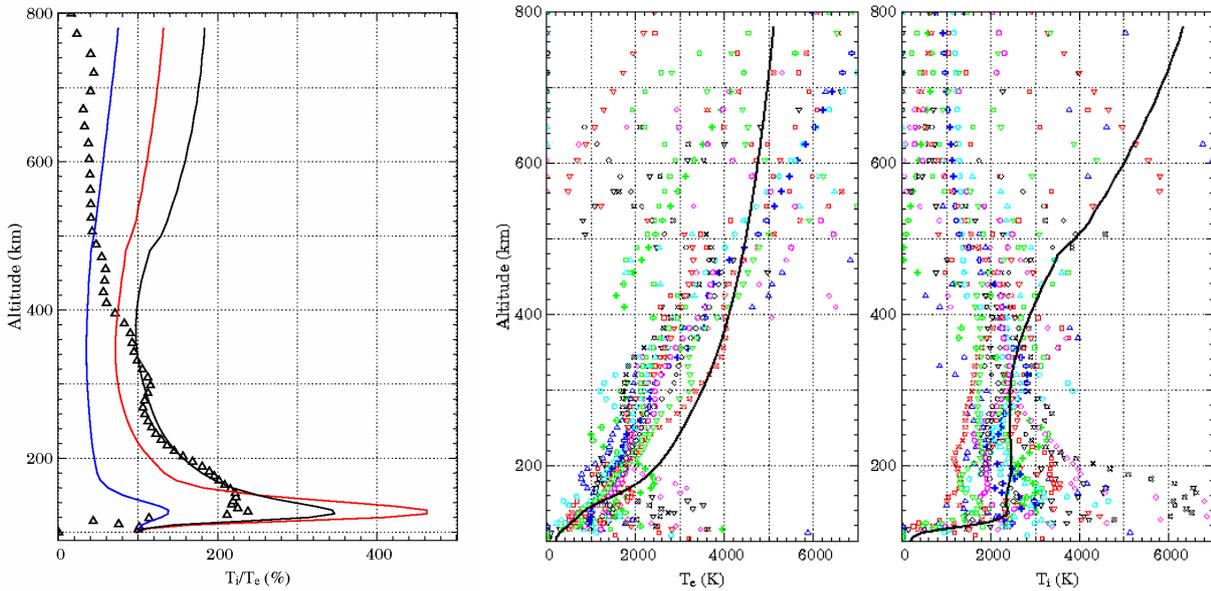


Fig. 6-21 – Ratio of ion to electron temperatures T_i/T_e in % given by the model as compared to the original ratio of temperatures computed from ESR data (left, black triangles). The blue curve represents the model's calculations when we add a 20 mV/m electric field. The black line is for $E = 65$ mV/m and the red line for $E = 80$ mV/m. The limit at 100% occurs when $T_i = T_e$. Above this limit, $T_i > T_e$. The figure on the right shows the dispersion (especially at high altitudes) of ion and electron temperatures measured by ESR between 08:35 UT and 08:55 UT with the computed TRANS4 profiles superimposed in black solid line.

Above this limit, ion and electron temperatures have similar values and the ratio grows slowly for both curves with altitudes but the 80 mV/m E -field seems to be more accurate until 500 km . At higher altitudes, according to ESR data, electric fields play a negligible role and T_i becomes only a fraction of T_e in amplitude: at 800 km , T_i represents roughly 15 % of T_e . This ratio is as a matter of fact better modelled by a 20 mV/m E -field.

The binary vision of two layers with high and low electric fields corresponding to low and high altitudes respectively modelling best the data must then be refined. Along a field-line however, the same electric fields are in action.

Three layers seem now to coexist within the EISCAT beam, one in the E and F regions best modelled by strong electric fields (65 mV/m) acting on the denser part of the ionosphere and spanning from 100 to 400 km , a higher region between 400 and 500 km where even stronger fields can exist and finally a high-altitude layer where barely no electric fields are in action, situated above 500 km .

This new picture is supported by our previous comments on electron densities. Moreover, it highlights the fact that the discrepancies encountered for densities at low altitudes are most certainly due to the initial conditions such as atmospheric densities and precipitated fluxes, and not so much on internal ionospheric mechanisms such as the frictional heating.

We showed that, as a middle value, electric fields of 65 mV/m were in action to match the densities and temperatures measured by the EISCAT ESR on 22-01-2004 prior to the SERSIO rocket launch. In the following paragraphs, the computations use this value as a forcing of the average electric field in TRANS4.

- **The protons unveiled: a few details on the proton contribution**

What is the sole impact of the protons in terms of densities and productions? Well, the first coupling parameter is, following the description of the interface between the numerical codes in § 4.2.4, the volumic source function for the protoelectrons, expressed in $cm^{-3} s^{-1} eV^{-1}$. Protoelectrons are produced by collision between a neutral species and a (H, H^+) particle. Their distribution we can see in Fig. 6-22 — a surface plot for each altitudes and energies — and in Fig. 6-23 which represents a slice of the former figure at 300 km with the detail of the contributions of proton fluxes (dash-dotted line) and hydrogen fluxes (solid line).

A sharp peak is encountered at low energies (0.1–20 eV) and low altitudes (110–140 km). The detail of a typical source function at mid altitudes shows that collisions with hydrogen particles are more efficient than the corresponding collisions with protons: indeed, as a supplementary electron can be created through ionisation-stripping of a hydrogen atom, the production rate generated associated to hydrogen fluxes is more important in the energy span covered. This tendency begins to change at higher energies, modulated by proton fluxes and cross sections building up at higher energies with regards to H fluxes.

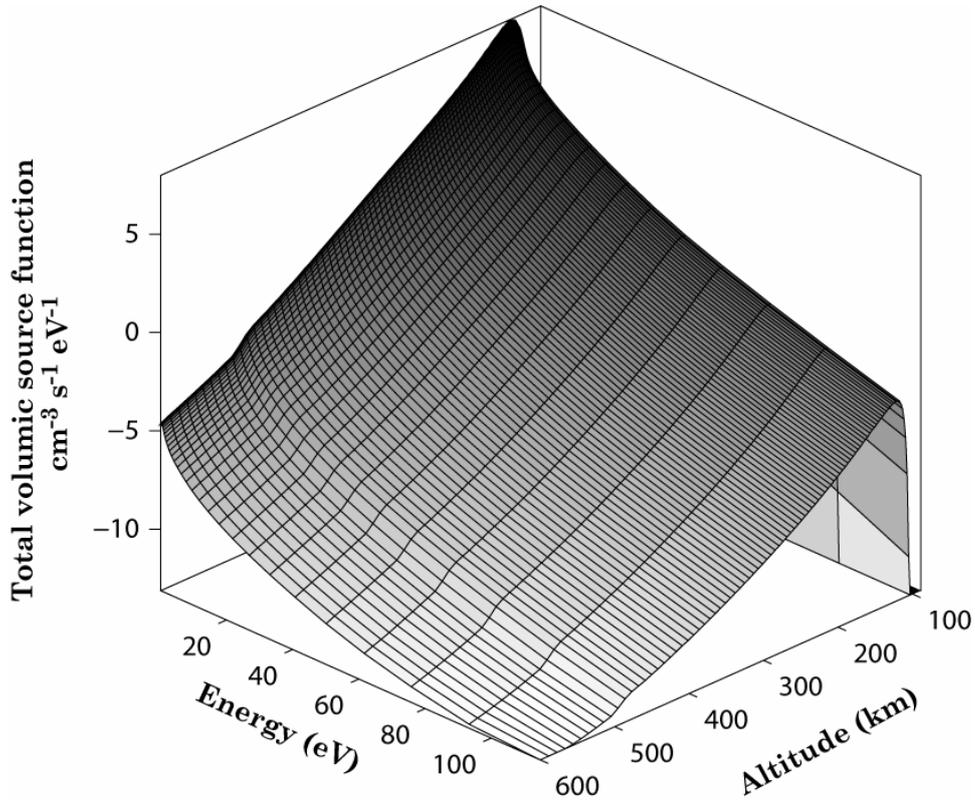


Fig. 6-22 – Typical volumic source function in $\text{cm}^{-3} \text{s}^{-1} \text{eV}^{-1}$ between 100 and 600 km and plotted across energies in the range 0.1-120 eV.

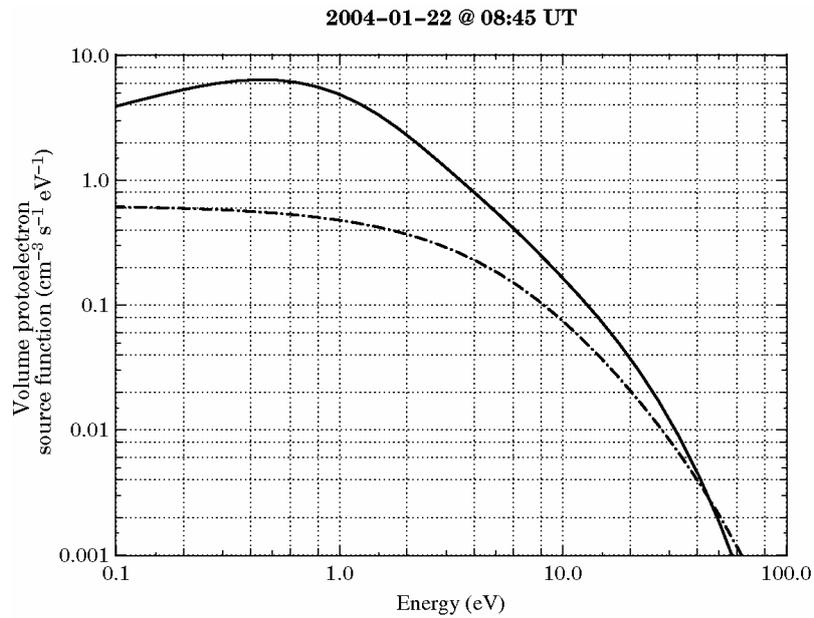


Fig. 6-23 – Volume source function for protoelectrons in $\text{cm}^{-3} \text{s}^{-1} \text{eV}^{-1}$ computed by the model at 300 km. Collisions of neutrals with protons is drawn in dash-dotted line while collisions with hydrogen atoms are in solid line.

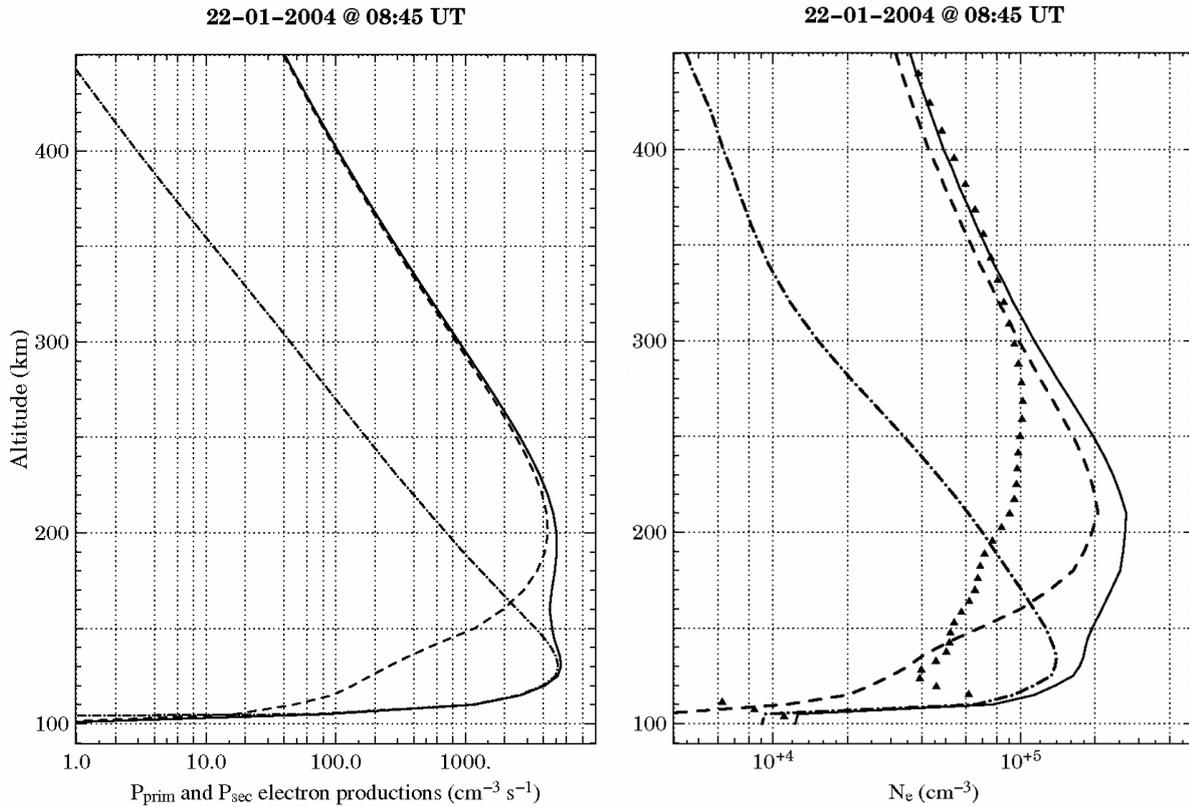


Fig. 6-24 – *Left: Primary and secondary electron production profiles expressed in $\text{cm}^{-3} \text{s}^{-1}$ between 90 and 450 km. Primary productions (dash-dotted line) correspond only to protoelectron productions because no photoionisation is present. Secondary productions correspond to both electron precipitation and degradation of primary protoelectrons (dash line) computed by the kinetic code. The right figure shows the contribution of precipitating electrons (dashed line) and that of the protons (dash-dotted line) in creating electron densities, expressed in cm^{-3} compared to ESR electron densities (black triangles). The total productions and densities are drawn in black solid line.*

We can see also that for 1 keV proton fluxes at the top of the ionosphere, we end up with around 1 eV protoelectrons.

Another interesting feature to observe with the help of TRANS4 is the productions and densities which the protons are responsible for. This point is featured in Fig. 6-24 (*left*): primary productions as well as secondary ones are shown between 100 and 450 km.

Primary proto-electrons are responsible for the low-altitude peak around 140 km, while secondary electrons due both to precipitation and primary suprathermal protoelectrons are creating the second wider peak at 210 km. One can see that the protoelectron productions are even higher than the pure electron contribution from precipitation, reaching $6 \times 10^3 \text{ cm}^{-3} \text{ s}^{-1}$.

The overall shape is barely modified when the fluid part of the model computes the losses to solve the continuity equation: two main peaks are observed, and the F₂-

layer peak becomes more important. Due to the lower location of the protoelectron peak, recombination processes and collisions are more frequent, which eats away a lot of the freshly produced electrons and ions, making the low-altitude peak decrease much more than its high-altitude relative. Above 200 *km*, the proton contribution to the overall electron density reaches 10 to 20%, a conclusion that was already put forward in several publications (*e.g.* Lilensten and Galand, 1998).

After having singularized the protons with regards to the well-known electron contribution, we are now ripe for a little walk among atoms and molecules: what is their respective part in the ionosphere?

6.2.3 A refined description of the ionosphere

- **Productions and densities**

The productions at the origin of the measured densities are sketched below 450 *km* in Fig. 6-25, a profile that is very much alike the ones presented in the first Act. Actually these are typical nightside ion production profiles recorded at high latitude. The main non-chemically produced ions are N_2 and O_2 in the E region, while O becomes the dominant species above 300 *km*. Thermalized H^+ ions are negligible at all altitudes.

What is really interesting is the density profiles, species by species and plotted on the right. They show quite different shapes from the production ones, and we can see clearly the effect of the chemical reactions in the building of concentrations. N_2 becomes only the third to fourth species with altitude in the ionosphere and O is experiencing a huge depletion at low altitudes. Simultaneously, the molecular ion NO^+ becomes the most prominent species between 150 and 400 *km*. The F₁ layer extends then up to 400 *km*, which explains why the frictional heating could still act at these altitudes, as already inferred from our E -field sensitivity discussion of § 6.2.2. The growing concentration of NO^+ is also perfectly consistent with the simultaneous depletion in O^+ and N_2^+ densities in the F region: indeed both species are involved the creation of NO^+ and constitute the main source in the lower ionosphere of this molecular ion through:



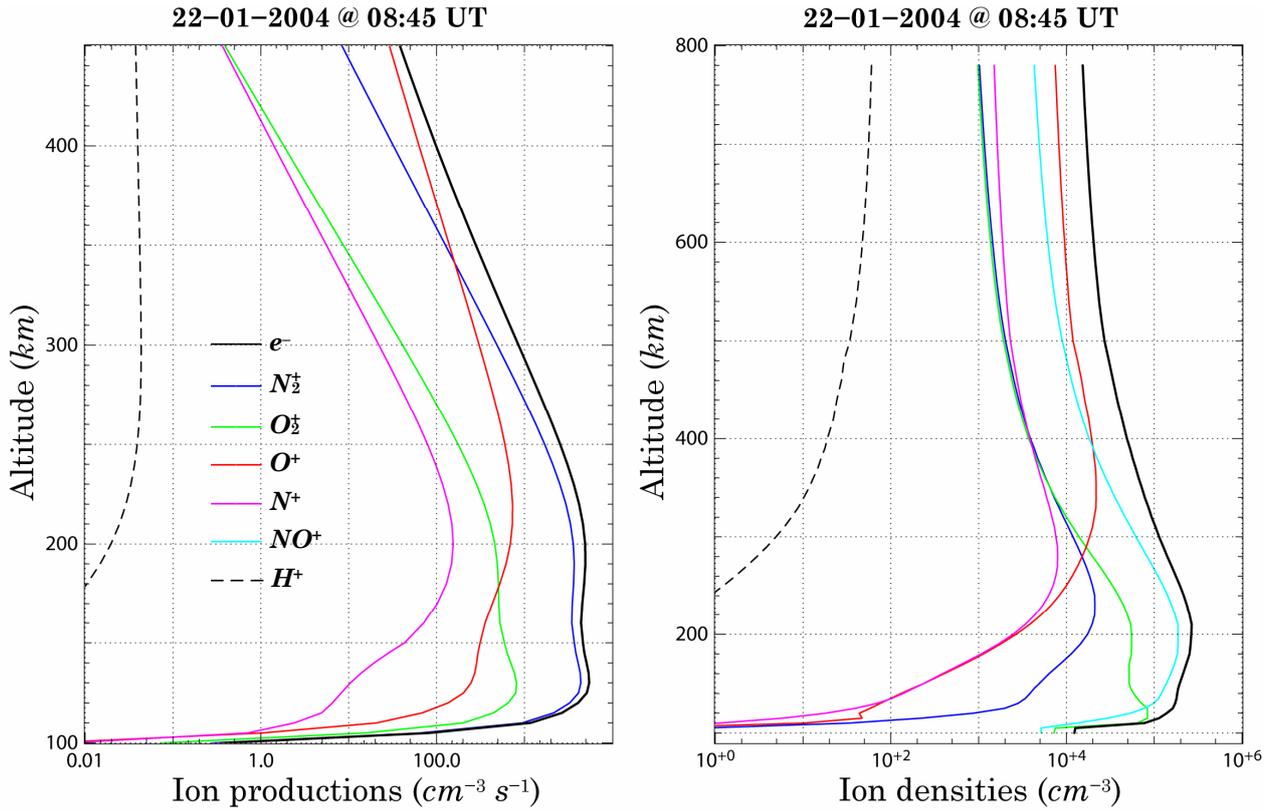


Fig. 6-25 – Left: Ion productions for the major ion species in the ionosphere: N_2^+ (blue), O_2^+ (green), O^+ (red), N^+ (magenta) and H^+ (yellow). The total electron production is drawn in black. Right: Major ion densities yielded by TRANS4 for 22-01-2004: N_2 (blue), O_2^+ (green), O^+ (red), NO^+ (cyan), N^+ (magenta) and H^+ (yellow). The NO^+ layer extends up to 400 km, which corroborates the influence of the frictional heating previously noticed in the discussion on electron densities.

In parallel, it is worthy of note that O_2^+ ions which are not influenced by reactions creating NO^+ remain the first species at very low altitudes, unlike N_2^+ . In these conditions, NO^+ can govern a lot of the dynamics and composition of the ionosphere in a large altitude span, self-sustained by reactions with N_2^+ at lower altitudes and by reactions with O^+ and O in the F_2 region.

As regards O^+ , it remains the second largest species above 300 km, despite the MSIS approximation on O atomic densities.

These comments close our discussion on this first confrontation of TRANS4 with a coordinated event: we need to conclude and draw the perspective for the future concerning the modelling of proto-electron events, which is the object of the last chapter of this manuscript.

Après le couplage de codes de transport, l'accélération et la validation énergétique de TRANS4, nous nous tournons dans ce chapitre vers la comparaison aux données, que nous avons pu mettre en place grâce au travail effectué d'abord à Svalbard, situé dans la calotte polaire nord puis à Oslo dans l'équipe de Physique des Plasmas Spatiaux dirigée par Jøran Moen. Il s'agissait ici de tester TRANS4 dans des conditions réelles et de le confronter aux données mesurées.

Nous nous sommes ainsi intéressés à l'événement du 22-01-2004 à Svalbard, où précipitations de protons et d'électrons étaient particulièrement intenses. L'intérêt résidait également dans la quantité de données instrumentales disponibles grâce à une coordination satellite/sol programmée. C'est donc à la description détaillée des données que nous nous sommes attelés dans un premier temps (§ 6.1) : données géophysiques d'abord (ACE et magnétogrammes), données radar (ESR) et satellite (DMSP) ensuite, données optiques enfin. Au moment où le satellite intercepte le faisceau radar de ESR, vers 08:45 UT, des précipitations de particules intenses mais peu énergétiques pour les protons sont enregistrées par le satellite DMSP. Compte tenu de l'inclinaison du faisceau radar, il est montré que les précipitations mesurées par le satellite sont représentatives des régions sondées à 600 km d'altitude par le radar, ce qui pointe les limites de notre approche comparative. Les données radar, et notamment la corrélation entre croissance de la température et baisse des concentrations électroniques, peuvent être interprétées si l'on considère l'action de champs électriques de convection à l'origine d'un chauffage Joule, qui exposé synthétiquement dans un paragraphe dédié. Pour finir, le traitement des données optiques de deux spectromètres Ebert-Fastie mesurant les raies H_α et H_β est présenté avec le résultat de la calibration. Compte tenu de la difficulté de calibration de ces instruments au vu des conditions météorologiques délicates (couverture nuageuse), ces résultats doivent être considérés comme préliminaires et devront bientôt être confirmés par les mesures de spectromètres à haute résolution supplémentaires présents à Svalbard.

La deuxième partie de ce chapitre concerne la comparaison aux données. Les flux précipités (e^- , H^+) mesurés par le satellite DMSP sont donnés en entrée du code dans les conditions géophysiques telles que $A_p = 60$, $f_{10.7} = 130$ et latitude = 78.16° .

Dans un premier temps, il est intéressant d'étudier la sensibilité du modèle aux différents paramètres inhérents aux redistributions angulaires, à l'origine de la génération de flux remontants de protons et d'hydrogène. Nous trouvons, à la suite de Galand et al. (1998) et Galand & Richmond (1999), que le miroir magnétique a une influence surtout à des altitudes supérieures à 200 km pour des énergies élevées alors que les redistributions angulaires collisionnelles dues aux réactions de changement de charge et aux collisions élastiques sont prépondérantes à plus basse altitude et pour des énergies des particules hydrogénées plus faibles. Plusieurs configurations

pour les fonctions de redistributions angulaires sont ensuite étudiées : maxwellienne de largeur à mi-hauteur variable ou section efficace de Rutherford. Elles permettent de rendre compte de l'extension vers le rouge des raies d'émission Balmer. Nous adoptons finalement la fonction de Rutherford en l'appliquant successivement en dessous de 1 keV et de 10 keV : nous montrons alors que la donnée de la variation en énergie de cette fonction, qui n'est pas encore élucidée, est cruciale pour la bonne modélisation des profils décalés vers le rouge des raies H_α et H_β . Les profils combinant l'effet du miroir magnétique et des redistributions angulaires collisionnelles sont enfin présentés et commentés à la lumière des remarques précédentes : l'étude statistique de ces émissions permettrait ici de réduire les incertitudes sur les paramètres physiques régissant les redistributions angulaires. Des nuages de haute altitude présents ce jour là ont quant à eux interdit toute comparaison quantitative des taux d'émission des raies et nous ont obligé à normaliser nos spectres en vue de leur comparaison. La dispersion en longueur d'onde des spectres due à ces nuages peut malgré tout être incluse dans la fonction instrumentale des spectromètres, moyennant l'hypothèse que la traversée des nuages ne modifie pas la forme des raies : en dégradant artificiellement la résolution effective de l'instrument de 2 à 8 Å, nous obtenons une indication sur l'état de l'atmosphère, c'est-à-dire un seeing pour l'observation des raies d'émission Balmer.

Dans un deuxième temps, nous avons comparé les résultats du modèle TRANS4 avec les données radars de concentration et de températures. Les concentrations électroniques calculées suivent parfaitement les données du radar ESR entre 300 km et 600 km d'altitude. En dessous, les différences sont importantes (jusqu'à un facteur 3 en amplitude), et mettent en valeur l'extrême variabilité spatiale en terme de précipitations de l'événement choisi : les densités mesurées à ESR à basse altitude ne sont pas du tout représentatives des flux mesurés en haut de l'atmosphère par le satellite, situé à 150 km à l'ouest du radar. La forme des concentrations sont néanmoins qualitativement comparables. Grâce à l'ajout d'un champ électrique de convection d'intensité variable en fonction de l'altitude, nous pouvons retrouver la forme des rapports de températures ionique et électronique. Dans un profil de température, trois régions doivent alors être considérées : une région où de forts champs existent (65 mV/m) située entre 100 et 400 km d'altitude, une région entre 400 et 500 km où des champs encore plus intenses (80 mV/m) existent et enfin une région de haute altitude (> 500 km) où le champ électrique ne joue plus qu'un rôle limité.

La dernière partie de cette étude présente les résultats pour les protons seuls afin de caractériser leur contribution à l'ionisation totale ainsi que le détail des productions et concentrations ioniques, qui constituent, dans le cas de protons précipitant, un apport original du couplage des deux codes. Les protons sont ainsi responsables du pic de basse altitude dans les concentrations, et contribuent à

hauteur de 15% en moyenne au dessus de 200 km d'altitude à la concentration électronique totale.

Une analyse fine de l'atmosphère prenant en compte toutes les espèces ionisées montre l'importance de l'ion NO^+ qui, selon le modèle, est majoritaire jusqu'à 400 km. Ce résultat est en totale cohérence avec notre étude sur l'intensité du champ électrique et explique après coup pourquoi l'effet Joule, dû à la présence d'un champ électrique de convection, est encore actif à haute altitude où l'ion NO^+ est prépondérant.

Il est désormais temps de conclure, ce que les deux prochains chapitres se proposent de faire, en anglais pour la partie sur le transport des protons, et en français pour le manuscrit dans son ensemble.

Chapitre 7

Conclusions and perspectives for Act II

What's in a name? That which we call a rose
By any other name would smell as sweet.

Shakespeare, *Romeo and Juliet*.

Contents

7.1	What the TRANS4 model is	216
7.1.1	A brief summary of TRANS4.....	216
7.1.2	What TRANS4 brings	217
7.1.3	What can be done in the future.....	218
7.2	Before concluding.....	219

Time it is now to draw some perspectives on the new coupled fluid/kinetic proton-electron model that TRANS4 is. The steps leading to its building, the physical and stability tests that have been carried out and the final validation have been addressed in detail all along this second Act. I will then discuss the improvements that are necessary to be developed in the future in order to master the uncertainties still inherent in the proton model.

7.1 What the TRANS4 model is

The ambition of building a reliable numerical model capable of reproducing as many phenomena as possible in the ionosphere has become a real need over the years in the scientific community.

With the introduction of the proton/hydrogen code coupled to the initial electron code, TRANS4 is on the brink of being one of the very few models able to take into account precisely and simultaneously the contribution of precipitating protons and electrons and their respective effects on one another in the Earth's ionosphere.

7.1.1 A brief summary of TRANS4

Summarizing in a few words a code such as TRANS4 can become a real challenge. For that, we can get back to the signification of its name: four original codes coupled together involving two different transport approaches, one fluid, the other kinetic, of which the backbone is constituted by Boltzmann's statistical theory. We began our work with Ludwig Boltzmann, it is indeed right to finish this discussion with him, or at least with his wonderful theory! In any case, **Fig. 4-3** perhaps pictures the TRANS4 model in a way better than any explanation could achieve but I will try to summarize it as the English reader did not have so far the opportunity to read a thorough description of our model.

First, primary productions and the source functions are computed for two cases: photoionisation (Beer-Lambert law) and protoelectrons. The former mechanism needs photoabsorption and photoionisation cross sections as well as the EUV solar flux (Tobiska, 1991). To yield the latter parameter, the Boltzmann's kinetic dissipative transport equation is solved analytically for the hydrogen particles (H^+ , H) precipitating at the top of the ionosphere. The inputs are the proton and/or the hydrogen fluxes, the collision and the emission cross sections, and of course the neutral atmosphere which is given by Hedin's model MSIS-90 (Hedin, 1989). The proto-electrons produced are then energetic enough to ionise, heat and excite the neutral atmosphere: we have to take into account these protoelectrons as an important source of secondary electrons, which distribution is governed by another kinetic transport equation.

The source functions computed become an input for the solving of the radiative transfer-like equation ruling the kinetic transport of suprathermal electrons, initially composed of precipitating electrons coming from the solar wind or accelerated in the magnetosphere. The neutral atmosphere, the electron impact cross sections are here needed. The production rates of each major and minor ion created by primary photoionisation, electron and proton impacts can be computed: this new physical output will serve in turn as an input to the fluid chemical model, which aims at solving Boltzmann's momentum equations for N_2^+ , O_2^+ , O^+ , N^+ , NO^+ and H^+ :

densities, temperatures, pressure gradients and heat flows are yielded by the model thanks to reaction rates and the taking into account of 21 chemical reactions. These parameters can be sensitive to the $\mathbf{v} \times \mathbf{B}$ convection electric field that defines the horizontal dynamics through electric potential maps (see Brelvi *et al.*, 2005 who describe the coupling between a Eulerian approach of ionospheric convection, called AMIE⁴⁵, and the electron code TRANSCAR): it is then possible to add another dimension to the model and follow the transport of a flux tube into the polar cap, from its birth to its disappearing.

Of course, many by-products are yielded incidentally by the model and can be cross-calibrated with observations: airglow, Doppler profiles for the hydrogen Balmer lines, modelling of the red and green line emissions, total electron content...

As regards the initial sole proton code, it has been used since its development in 1996 in a number of studies (Galand *et al.*, 1998, 1999; Lummerzheim and Galand, 2001; Lanchester *et al.*, 2003) but was only validated with regards to optical measurements. It means that only one output of the model has been used so far which has always limited its capacity of evolution. Now coupled to the TRANSCAR core, the proton/hydrogen transport code may be used for solar-terrestrial purposes while enhancing the range of capabilities of the electron code. This is what I will be focusing on from now on.

7.1.2 What TRANS4 brings

TRANS4 allows the combined study of electron/proton precipitation within a single run. Productions and densities for each ion species can be directly computed as well as temperatures and heating rates. These parameters are aimed at being compared with ground-based equipments such as incoherent scatter radars (EISCAT for instance).

The separate contribution of electrons and protons is also implemented in the model so that the impact of sole protons on the overall temperatures and densities can be investigated quantitatively.

Magnetic mirroring effects and collisional angular redistributions are included so that we gain a precise description of their respective influence on the generation of downward proton/hydrogen fluxes and eventually the modification of upward fluxes. As a consequence, emission rates for Balmer H_α and H_β lines can be computed, which allows the comparison with optical observations led from the ground or from satellites.

⁴⁵ AMIE, or Assimilative Mapping of Ionospheric Electrodynamics, is a procedure used to derive the time-dependent distribution of the ionospheric convection in terms of convection potential, field-aligned currents and electron precipitation fluxes over a large ionospheric scale. This approach is embedded into TRANS4 to account for the convection mechanisms and the presence of electric fields giving rise to frictional heating.

In our particular study concerning the 22-01-2004 event, we have shown moreover that TRANS4 could be interpreted as a ‘weather indicator’ through the study of the Doppler line profiles and to retrieve the physical shape of the line despite the cloud coverage and the difficulty of getting a proper reliable calibration for the measurements. These results, presented in § 6.2, need be confirmed in light of future studies focusing on other events. Some uncertainties remain in the proton code which may be usefully mastered by comparisons of the model with future coordinated events.

In this way, a lot can still be done in the future to reduce these uncertainties, which I will discuss in the next little paragraph.

7.1.3 What can be done in the future

Uncertainties exist concerning the cross sections for the elastic collisions of protons and hydrogen atoms with O_2 and O . The recent survey of Kallio and Barabash (2001) regarding these processes applied to the Martian atmosphere showed that there exists a real need for reliable measured cross sections: we are at the moment obliged to assume that they are valid indiscriminately for the three species N_2 , O_2 and O .

Concerning the Balmer emission part, two other uncertainties lie on the emission cross section for collisions of hydrogen or proton with O and on the ε parameter which intervenes in the phase function. The energy dependence has to be measured, as the extent of the red-shifted tail of the emission line distribution is directly correlated to the energy threshold above which angular redistributions do not play any more a significant role.

Another challenging issue concerns the beam spreading effect (Jasperse, 1997) that is loosely taken into account in many kinetic transport equations by a damping factor applied to the precipitated flux (Basu *et al.*, 1993; Galand *et al.*, 1997). Monte-Carlo simulations, which are more relevant to model this effect because they can keep track of the particle in its descent into the ionosphere, can be of help (Fang *et al.*, 2004). By taking into account this effect, the intensity computed at the zenith will be modified as well as the fine structure of the line, easing considerably the comparisons with observations.

The need of coordinated events is also crucial if we want to circumvent a lot of these uncertainties, which could be a means of tackling these problems statistically and making some a posteriori predictions, much like we did with doubly-charged ions concerning reaction rate constants.

Moreover, a few scientific issues can be added in the future such as the modelling of the emission of the Lyman- α line, already addressed in Gérard *et al.* (2000), though it cannot be detected from the ground due to atmospheric absorption. This comes within one of the ambitions of such a modelling, *i.e.* to try to have a basis

as wide as possible of the processes going on in thick atmospheres and the associated observables. The case of Jupiter, through the modelling of radiative transfer, has been investigated by Barthélemy (2003) and Barthélemy *et al.* (2005) concerning Lyman- α , β and γ lines, and may be in the future an interesting coupling perspective for TRANS4 when migrating to the atmospheres of the giant planets. Proton aurora is equally an issue studied on Jupiter since the 1970s (see *e.g.* Heaps *et al.*, 1975).

Simultaneously, the extension of our model to higher relativistic energies will be a strong priority in the LPG team, especially in the case of Titan where pick-up ions and high energy particles accelerated by the huge Kronian magnetosphere are playing a leading role. As regards Mars and Venus, as ESA's missions are beginning to gather a wealth of information, the migration of the platform TRANS4 to these atmospheres with completely different magnetic fields has begun, and will be one of my orientations in the immediate future.

The experience gained in all of these aspects will also be applied to the modelling of polarisation issues concerning the red auroral line, for which we plan to begin observational campaigns during the winter 2006-2007 in Svalbard from the brand new auroral station. This part has been the subject of one article submitted to *Space Weather Journal* and given in annex.

I have also a dream, a dream that one day in the medium term we could inverse the entire code in order to get back from ground measurements to the initial distribution of the particles precipitating... A tool of multiple applications!

7.2 Before concluding...

The great dynamics of topics devoted to proton issues on Earth and the other planets is testified by the great number of international articles and acts of communication published since 2000 (on the ADS records, 93 articles are listed). Coupled with the expertise we already have on the electron's side, pilot proton/electron studies can now be performed on a very wide basis.

From this point of view, I chose as a maiden flight to the model a protoelectron event recorded by a battery of different instruments, from spectrophotometers to radars, not forgetting satellites and rockets. The full potential of this idea will be reached in the cusp where a wealth of facilities is already available and Svalbard seems an ideal place for operations.

Large campaigns aimed at coordinated studies must be led in the future and, especially since the solar cycle will be in its ascending activity phase again in 2007. Building rockets to study in-situ the spatial distribution of protons and correlate better the precipitation region to the one probed by the radars is also an interesting issue that must be addressed in a large basis.

TRANS4 can become in this scope a very useful tool to analyze the data and complementary to other approaches involving Monte-Carlo calculations. Its extension to other systems and planets as well as its capacity of evolution in order to perform reliable predictions allows to think that this model will be at the basis of interesting discoveries in the future, following the example of the electron code TRANSCAR recently ported on Mars which enabled the discovery of an aurora-type emission on the Martian nightside and distinct from the previous well-identified nightglow (Bertaux *et al.*, 2005). These past and future discoveries are and will be all embedded in a vast collaboration between institutions that play a crucial role in each step of the modelling and data processing work. This is incidentally an interesting aspect of my PhD, where I had the opportunity to work with physico-chemists at the heart of the chemical issues of the code (Orsay), with experimenters performing in-situ measurements (Svalbard), and with physicists interpreting data and building models (Oslo).

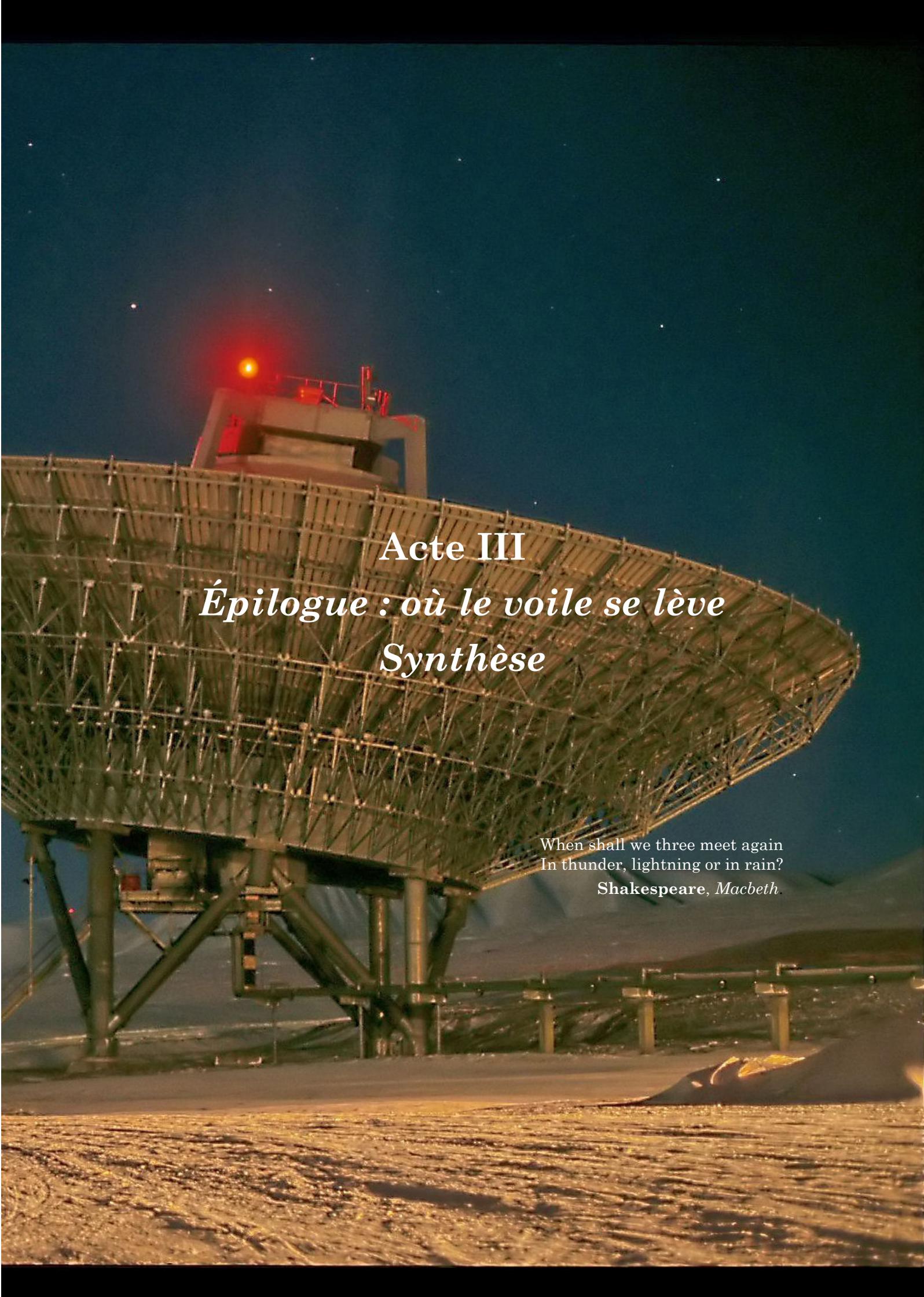
What makes a model efficient in describing the experimental reality is its capacity to account first for data collected by orbiting spacecraft or ground-based instruments in the case of aeronomy, and then to give some predictions on the behaviour of the physical system.

This PhD work was thus carried out within the framework of collaborations that will be strengthened in the future, involving international leading institutions such as the Laboratoire de Chimie-Physique (LCP, Orsay, France), the Plasma Physics group at the University of Oslo (UiO, Norway), the University Centre in Svalbard (UNIS, Norway) and ESTEC⁴⁶ (Noordwijk, the Netherlands).

Our work together will continue!

⁴⁶ European Space research and TEchnology Centre, which constitutes the ESA's Space Research division.





Acte III
Épilogue : où le voile se lève
Synthèse

When shall we three meet again
In thunder, lightning or in rain?
Shakespeare, *Macbeth*.

Synthèse

Léger et puissant, le pont s'élance au-dessus du fleuve. Il ne relie pas seulement deux rives déjà existantes. C'est le passage du pont qui, seul, fait ressortir les rives comme rives.

Heidegger, *Essais et conférences*.

Sommaire

1	Double ionisation sur Terre et sur Titan	226
2	Couplage dynamique protons/électrons	228
3	Perspectives en planétologie comparée.....	230
	Épilogue	231

Ce travail de thèse touche à sa fin. Comme le suggère le plan de ce manuscrit, j'ai suivi deux orientations principales dans ma recherche sur l'étude des entrées d'énergie dans l'ionosphère. Successivement, la double ionisation et les précipitations de protons et d'électrons ont été abordées et appliquées au cas d'une part des ions doublement chargés, et d'autre part au couplage protons-électrons.

Chacune de ces parties a fait l'objet d'une collaboration active avec des instituts et laboratoires de recherche, français ou norvégiens, qui ont permis de développer une approche pluridisciplinaire de ces questions. La diversité de ces collaborations est à l'image de ce qu'est la modélisation d'un système physique aussi complexe que l'ionosphère : des entrées physico-chimiques du modèle (sections efficaces, vitesses de réaction) à l'observation et à l'interprétation des données, chaque élément devient essentiel dans notre modélisation physique du système.

Je retrace donc ici les étapes de mon travail de thèse afin d'en dresser les perspectives et les améliorations futures. La Fig. *ii*, en quelque sorte un raccourci de mon travail de thèse, peut nous guider dans cette tâche et doit être comparée à la Fig. *i* présentée en introduction.

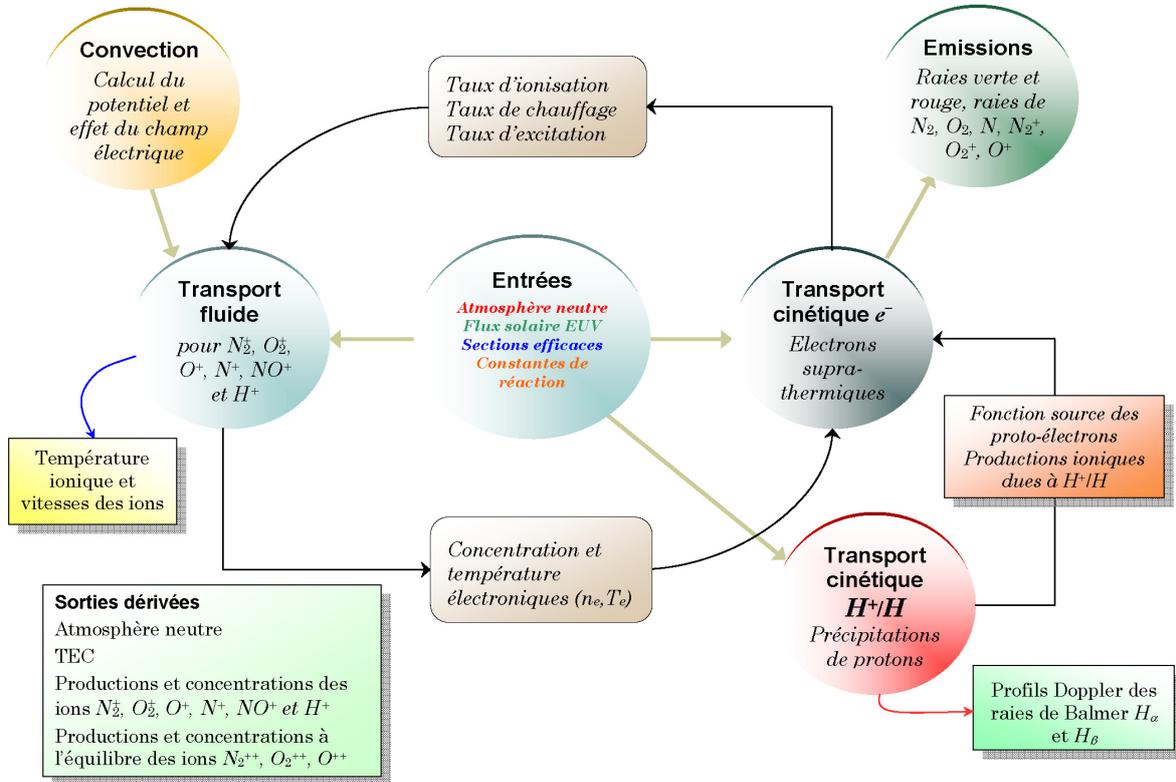


Fig. *ii* – le modèle *TRANS4*, dernière évolution de *TRANSCAR* incluant le transport cinétique des électrons et des protons, le transport fluide, le calcul des émissions lumineuses aurorales et la convection due au champ électrique. De plus, le calcul des productions et des concentrations des trois ions doublement chargés N_2^{++} , O_2^{++} et O^{++} est implémentée.

Les principales sorties rajoutées sont les productions et concentrations des ions doublement chargés N_2^{++} , O_2^{++} et O^{++} et les profils Doppler des raies Balmer dues aux précipitations de protons. Le couplage des codes de transport d'électrons et de protons se fait via la fonction source des protoélectrons ainsi que les productions ioniques, comme on peut le voir sur la figure.

1 Double ionisation sur Terre et sur Titan

Nous avons pu montrer que la contribution des ions doublement chargés, jusque là négligée dans les modèles d'ionosphère terrestre, peut se révéler importante vis-à-

vis des ions simplement chargés. C'est le cas à haute altitude de l'ion atomique O^{++} qui devient au dessus de 400 km d'altitude pour des conditions d'activité solaire calmes la quatrième espèce ionique la plus abondante après O^+ , N^+ et H^+ . L'impact de ces ions multiples chargés sur l'ionosphère, bien que minime à basse altitude, peut donc se révéler à haute altitude significatif par rapport à certaines espèces simplement chargées.

Ces travaux ont été initiés ces 4 dernières années par le LPG, le LCP et l'ESTEC sur Mars (Witasse *et al.*, 2002) et complétés par la suite sur Terre et sur Titan dans le présent travail.

Étant donnée la difficulté des mesures en laboratoire et le manque de travaux effectués jusqu'à maintenant sur la création de ces ions, plusieurs hypothèses ont dû être faites sur les sections efficaces de double photoionisation des molécules de N_2 et de O_2 , et devront faire l'objet dans le futur de mesures précises afin de pouvoir circonscrire les incertitudes. Un long travail de réflexion sur la pertinence des sections efficaces et sur la sensibilité du modèle à ces paramètres d'entrée a été mené, ainsi que sur la prise en compte des constantes de réaction. Dans cette tâche, Roland Thissen, Odile Dutuit et Christian Alcaraz du Laboratoire de Chimie Physique d'Orsay m'ont été d'une aide considérable sans laquelle des estimations rationnelles des paramètres physico-chimiques n'auraient pu être retenues.

Dans un premier temps, nous avons ainsi calculé les productions primaires dues à la photoionisation, puis les productions secondaires par impact des photoélectrons primaires, qui sont la contribution majeure en dessous de 200 km d'altitude. Les constantes de réactions, tabulées ou déduites des observations faites au LCP, nous ont permis dans un deuxième temps de calculer les pertes chimiques des ions doublement chargés, moléculaires ou atomiques, même si des spéculations demeurent sur la réaction $O^{++} + O$ jamais mesurée en laboratoire.

A partir des productions totales et des pertes, il restait à calculer les concentrations de ces ions. Par souci de simplicité, nous avons fait l'hypothèse de l'équilibre hydrostatique, une hypothèse qui se révèle a posteriori justifiée par l'adéquation des résultats aux mesures dans le cas de O^{++} pour des altitudes inférieures à 500 km. Toute l'approche, soumise aux incertitudes déjà décrites, a été ainsi validée par la comparaison aux données de l'unique satellite qui ait mesuré les concentrations en O^{++} dans l'ionosphère terrestre. Cela nous a permis également de retenir les valeurs les plus adéquates pour les constantes de réaction et de prédire la constante de vitesse de la réaction $O^{++} + O$ en attendant les mesures en laboratoire.

La production de ces ions sur Terre représente quelques pour-cents de la contribution totale électronique, mais leur concentration contribue à moins de 1% du total de la concentration électronique. Un intérêt supplémentaire de l'étude de ces ions peut alors être vu chez les autres objets du système solaire dotés d'une atmosphère dense. Titan en constitue un des exemples les plus intéressants et fait l'objet d'un paragraphe entier dans le présent manuscrit. Nous calculons les

productions et concentrations de N_2^{++} dans l'atmosphère de Titan, une molécule qui, étant donnée sa très grande réactivité, peut fournir une grande quantité d'énergie à l'ionosphère en formant des ions simplement chargés très énergétiques. La présence d'ions multiples chargés comme N_2^{++} pourrait être également à l'origine des écarts entre concentrations électroniques et concentrations ioniques, et suggérer que cet ion pourrait jouer un rôle prépondérant au niveau planétaire.

La mise en évidence expérimentale de dications moléculaires dans les hautes atmosphères planétaires reste à faire : leur détection peut se faire aussi bien au point de vue optique qu'en spectrométrie de masse embarquée sur satellite. La prochaine étape est donc leur caractérisation instrumentale dans l'atmosphère, avec pour objectif une meilleure statistique sur la présence et la dynamique de ces ions. Leur étude dans l'atmosphère de la Terre et des planètes telluriques, telles Mars ou Vénus, pourrait également motiver une réactualisation des constantes de vitesse et des sections efficaces d'ionisation et susciter, par ricochet, des travaux futurs en chimie des phases gazeuses.

2 Couplage dynamique protons/électrons

Après la photoionisation et la création d'ions doublement chargés, les précipitations... La deuxième partie de mon travail de thèse s'est intéressée au couplage dynamique de deux codes de transport cinétique avec l'application de ce modèle couplé, appelé TRANS4, aux précipitations combinées électrons/protons. La description du modèle TRANS4 et sa constitution ont été explicitées en détail dans les paragraphes précédents. Il est plus intéressant ici de donner les principales avancées du modèle TRANS4 ainsi que les améliorations futures souhaitables.

TRANS4 permet en une seule exécution l'étude combinée des flux de protons et des électrons dans l'ionosphère de la Terre. Le calcul des productions et des densités pour chaque espèce, ainsi que les températures et les taux de chauffage sont des sorties directes du modèle, qui peuvent être éventuellement comparées aux paramètres des radars à diffusion incohérente. Il est également aisé de calculer l'impact quantitatif des protons sur les concentrations et les températures données par le transport fluide. Le modèle inclut, à la suite des travaux précédents sur le transport cinétique des protons, l'effet de miroir magnétique et les redistributions angulaires d'origine collisionnelle, tous deux responsables des flux remontants de protons et d'hydrogène dans l'ionosphère. Ces deux mécanismes de redistributions angulaires des flux sont à l'origine des décalages vers le rouge des queues de distributions des raies Balmer H_α et H_β , toutes deux modélisées dans le code. Cet aspect est un des plus intéressants car la signature optique des aurores à protons a été étudiée depuis les années 60 : une comparaison immédiate avec les données spectrométriques au sol ou embarquées sur satellite est donc possible et peut

permettre dans certains cas de calibrer après coup les résultats du modèle pour les basses altitudes où les raies sont les plus intenses.

L'étude d'un événement en particulier, le 22 janvier 2004, nous a montré également que TRANS4 pourrait être utilisé comme indicateur météorologique grâce à l'étude des profils Doppler, en faisant cependant l'hypothèse que la couverture nuageuse ne modifie pas la forme du spectre. On peut dans ces conditions retrouver la forme originelle des raies non perturbées, un résultat qui devra faire l'objet dans l'avenir d'une étude statistique sur le plus grand nombre possible d'événements coordonnés. Les incertitudes liées aux sections efficaces de collision élastique pour les réactions $H^+ + O_2$ ou $H^+ + O$ pourront être en partie maîtrisées par cette statistique événementielle, mais comme le notent Kallio et Barabash (2001) dans leur revue des différents processus de collisions appliqués à Mars, il existe un besoin de mesures plus systématiques de ces paramètres afin de mieux estimer l'impact des protons dans les ionosphères.

A propos des émissions Balmer, nous devons encore travailler à réduire les incertitudes sur les sections efficaces d'émission, ainsi que sur la fonction de phase liée à la redistribution angulaire. Notre étude a ainsi montré que l'efficacité des redistributions angulaires était très sensible au seuil en énergie de diffusion vers l'avant. Ce seuil porté à 10 keV dans le modèle permet une meilleure prise en compte de la composante décalée vers le rouge des raies, mais demande également confirmation soit directement en laboratoire soit indirectement par comparaison du modèle avec des spectromètres à très haute résolution (de l'ordre de 1 Å) comme il en existe à Svalbard ou à Fairbanks (Alaska).

Une amélioration intéressante du modèle devra prendre en compte l'effet d'étalement du faisceau de protons, qui n'est pour l'instant paramétré que grâce à un facteur d'atténuation sur les flux de protons incidents, une hypothèse valable uniquement à haute altitude. Une approche statistique via des codes numériques Monte Carlo a permis déjà de bien quantifier l'étalement transversal du faisceau ; il reste cependant à adapter le formalisme au transport cinétique de Boltzmann. Une étude dépendant de l'altitude a été tentée récemment dans ce sens (Jasperse, 1997) et pourrait servir de base à une modification de TRANS4. Il reste cependant un gros travail de modélisation et d'adaptation à notre problème car cet effet dépend de l'altitude via les concentrations thermosphériques (libre parcours moyen et hauteur d'échelle) et l'intensité du champ magnétique. Suite à sa prise en compte rigoureuse, nous nous attendons dans le modèle à un changement, outre de la structure fine de la raie, de l'intensité des raies Balmer selon la ligne de visée, facilitant par la suite la comparaison aux résultats spectrométriques calibrés en intensité.

3 Perspectives en planétologie comparée

Le portage du code TRANS4 dans plusieurs atmosphères planétaires est une perspective des plus prometteuses, grâce notamment à la prise en compte de l'émission de la raie Lyman- α . Le cas des planètes géantes et de leurs satellites est ici très intéressant. La perspective de couplage de TRANS4 avec le code de transfert radiatif déjà développé au LPG (Barthélemy, 2003), ainsi que l'extension du modèle aux énergies relativistes, une orientation prioritaire de l'équipe "ionosphère" au LPG l'année prochaine, vont permettre d'accroître les capacités de prédiction et le nombre de paramètres en sortie du code. Depuis dix ans, Titan est devenu un sujet de choix et le succès de la mission Cassini-Huygens assure une quantité et une qualité d'informations pour des décennies. Le rôle des ions lourds pick-up ainsi que des protons accélérés par la magnétosphère de Saturne est encore mal estimé : le portage de TRANS4 sur cette planète avec en entrée les données mesurées par Cassini peut ainsi quantifier les productions d'ionisation et les concentrations ioniques attendues dans l'ionosphère de Titan où plus de 1000 réactions ion-neutre et neutre-neutre sont considérées.

Plus près de nous, l'étude de Vénus et Mars grâce à un modèle d'ionosphère peut se révéler une très intéressante évolution. Outre l'envoi des missions européennes sur ces deux planètes, l'intérêt réside dans la diversité des champs magnétiques rencontrés afin de dresser un panorama le plus exhaustif possible de l'interaction du soleil avec des objets très différents, magnétisés ou non. L'étude des raies d'émission et de leurs mécanismes d'excitation, dont la modélisation doit être adaptée à ces deux planètes, constitue un objectif à court terme pour la recherche.

Comme je l'ai noté, l'ambition de tels travaux est bien d'aborder les relations soleil-planètes sous un grand nombre d'angles d'attaque, sous-tendus par plusieurs thèmes fédérateurs : transport des particules énergétiques, émissions lumineuses, rôle des ions multiplement chargés, rayons cosmiques.

Dans cette optique et pour revenir à l'ionosphère terrestre, je participe également à un travail sur la polarisation de la raie rouge de l'oxygène atomique, dont le pic d'intensité se situe vers 250 km d'altitude, et qui fait l'objet d'un article soumis au *Space Weather Journal* (Lilensten *et al.*, 2006, voir annexe). Après des expériences en laboratoire concernant l'excitation et la mesure de polarisation de cette raie réalisées au LCP, une campagne d'observations est prévue pour l'hiver 2006-2007 à Svalbard, grâce à la construction par nos collaborateurs norvégiens à Oslo d'un spectropolarimètre dédié à l'observation de la raie rouge. Les objectifs sont clairs : caractériser la distribution des électrons précipitant au sommet de l'ionosphère grâce à une mesure de l'état de polarisation de l'émission lumineuse. Après l'Année Géophysique Internationale de 1958, où Duncan mis en évidence une polarisation significative de la raie rouge, et grâce au recul historique de 40 ans de mesures de celle-ci, cette expérience pourrait apporter des indices précieux et

permettre à moyen terme une mesure routinière de la fonction de distribution des électrons, un paramètre difficilement accessible à l'heure actuelle.

Dans les prochaines années, ce travail se prolongera dans plusieurs directions complémentaires en planétologie comparée, sur Terre d'abord, sur les autres planètes du système solaire ensuite, avec pour principale assise la confrontation des modèles aux observations.

Épilogue

J'ai commencé ce manuscrit avec l'évocation de mes collaborations, qui ont guidé mes pas tout au long de ce travail de recherche. Une des forces de la géophysique, c'est bien de regrouper des chercheurs de différents horizons et d'échanger dans un travail collectif ses idées, ses travaux. Être à l'interface de plusieurs champs de recherche aussi différents que la physique solaire, la physique de la Terre ou la chimie des réactions a été pour moi l'occasion de rencontrer, discuter, échanger et construire pendant ces années de thèse.

Construire des ponts, des ponts entre disciplines, des ponts entre les hommes, est un bel idéal.





Acte IV
Papers and Invited Conference

– Le désert est beau, ajouta-t-il...

Et c'était vrai. J'ai toujours aimé le désert. On s'assoit sur une dune de sable. On ne voit rien. On n'entend rien. Et cependant quelque chose rayonne en silence...

– Ce qui embellit le désert, dit le petit prince, c'est qu'il cache un puits quelque part...

Antoine de Saint-Exupéry,
Le Petit Prince.

Paper 1

Prediction and modelling of doubly-charged ions in the Earth's ionosphere

Simon, C., J. Lilensten, O. Dutuit, R. Thissen, O. Witasse, C. Alcaraz and H. Soldi-Lose, *Ann. Geophys.*, **23**, No. 3, 781-797, 2005.

Prediction and modelling of doubly-charged ions in the Earth's upper atmosphere

C. Simon¹, J. Lilensten¹, O. Dutuit², R. Thissen², O. Witasse³, C. Alcaraz⁴, and H. Soldi-Lose²

¹Laboratoire de Planétologie de Grenoble, Grenoble, France

²Laboratoire de Chimie-Physique, Centre Universitaire, Orsay, France

³Research and Scientific Support Department of ESA, ESTEC, Noordwijk, The Netherlands

⁴Laboratoire LURE, Centre Universitaire Paris-Sud, Orsay, France

Received: 18 July 2004 – Revised: 12 January 2005 – Accepted: 28 January 2005 – Published: 30 March 2005

Abstract. We discuss the existence of the doubly-charged ions N_2^{++} , O_2^{++} and O^{++} in the Earth's ionosphere through the theoretical computation of density profiles over the altitude range 100–500 km calculated with the TRANSCAR model. Photoproductions and electron impact productions are described in detail. The photochemical equilibrium assumption verified in this context yields density profiles, validated by comparison to the measurements of the satellite Atmosphere Explorer. Those three dications are lost essentially by dissociative recombination and collisions with the neutrals N_2 , O_2 and O . The metastable lifetime of N_2^{++} is 3 s and is estimated at 4 s for O_2^{++} . A survey of the sensitivity to geophysical parameters (solar activity, latitude and solar zenith angle) is also shown. Emphasis is cast on the need for rate constants for chemical reactions involving doubly-charged ions. The fit of the model yields an estimated value of $1.06 \pm 0.40 \times 10^{-10} \text{ cm}^3 \text{ s}^{-1}$ for the rate constant of the $O^{++}+O$ reaction.

Keywords. Ionosphere (Ion chemistry and composition, Modelling and forecasting, Planetary ionospheres)

1 Introduction

The existence of stable doubly-charged molecular ions in laboratories dates back to the early years of the last century when Aston (1920) and then Thomson (1921) made the first discovery of what was then proposed to be either CO^{++} or N_2^{++} . Half a century later aeronomers finally worked up an interest in the role of dications into the ionosphere: Vegard quoted by Meinel (1951) announced the identification of the OIII line at 500.8 nm in the aurora spectrum for the strong feature observed near 500.04 nm. However, as the 496.0-nm line (which completes the doublet lines for O^{++}) did not appear in the spectrum, the discovery was finally rejected by most authors.

Correspondence to: C. Simon
(cyril.simon@obs.ujf-grenoble.fr)

Nearly at the same time as the lead for a spectral evidence was becoming more and more disputed, Hoffman (1967) reported the detection of O^{++} in the topside ionosphere by the mass spectrometer on board Explorer 31. Several theoretical attempts were then led in the ionosphere (Walker, 1970), as well as in the magnetosphere (Nakada and Singer, 1968; Horwitz, 1981). Many authors such as Prasad and Furman (1975) and above all Avakyan (1978a, b) pointed out the necessity for a theoretical modelling approach to take into account doubly-charged ions, namely N_2^{++} , O_2^{++} and O^{++} . Due to the very large uncertainties concerning the production, stability and reactivity of molecular dications, every effort from this time on converged on the modelling of O^{++} densities in comparison to the few available measurements: in this context, Breig et al. (1977) used Atmosphere Explorer C satellite data recorded in 1974, and with simple assumptions, they produced the very first model of O^{++} densities, though reaction rates still corresponded to fits with experimental data. Only one production reaction was put forward to account for observed densities, i.e. ionisation of O^+ . However, one year later, Avakyan (1978a, 1980) and then Victor and Constantinides (1979) showed that another source for O^{++} in the thermosphere had been previously neglected, namely double photoionisation of O , found to be the dominant mechanism below 500 km. Breig et al. (1982) then revised their hypotheses and produced another model that was compared with the same Atmosphere Explorer data for which the processing had been improved. They found good agreement and drew their conclusions on the validity of the reaction rate constants for $O^{++}+O$, deduced to be $k=6.6 \times 10^{-11} \text{ cm}^3 \text{ s}^{-1}$. However, other studies were conducted at the same time by Fox and Victor (1981) on Venus whose conclusions on reaction rate constants differed from those of Breig et al. (1982) by a factor of two, i.e. $k=1.5 \times 10^{-10} \text{ cm}^3 \text{ s}^{-1}$. Later on, a study of this reaction in Io plasma torus yielded the value $2.0 \times 10^{-10} \text{ cm}^3 \text{ s}^{-1}$ (Brown et al., 1983), which was close to the value of Fox and Victor.

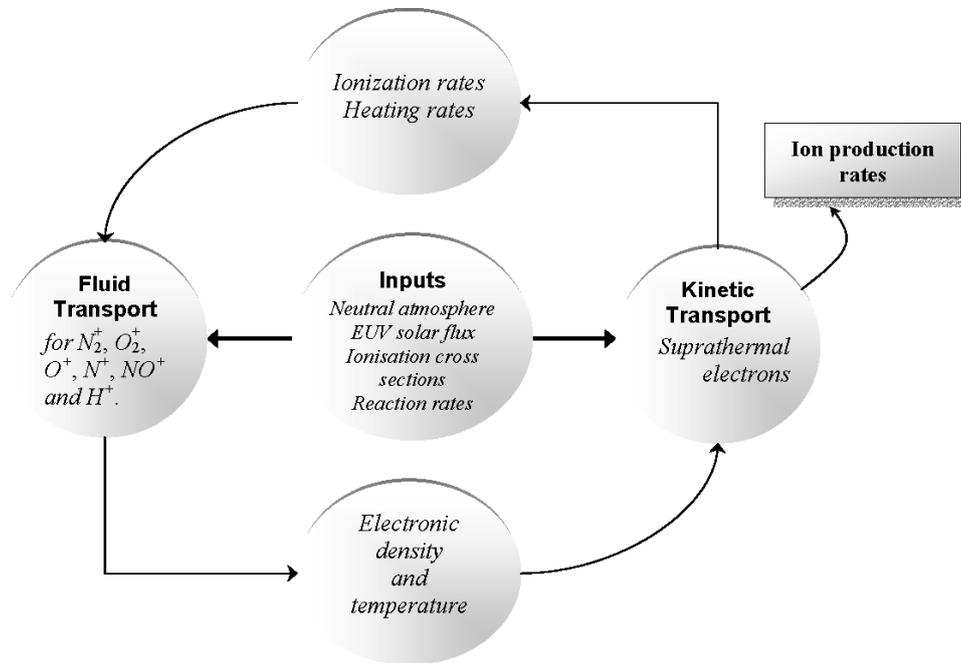


Fig. 1. Synopsis of the fluid/kinetic transport model TRANSCAR. We show only the outputs that are involved in the present study, together with the basic couplings.

Very recently, a period which coincided with the maturity of both the experimental study of dications (see Mrázek et al., 2000 and references therein) and ionosphere models, Witasse et al. (2002, 2003) predicted the existence of a CO_2^{++} layer in the atmosphere of Mars with the ionosphere model TRANSCAR which was specially adapted to the Martian conditions (Witasse, 2000; Morel et al., 2004).

With the growing possibilities of high-resolution measurements made by satellites and ground-based facilities, we will have access to more and more ionospheric parameters: we present here the first complete computation of N_2^{++} , O_2^{++} and O^{++} ion densities in the Earth's upper atmosphere.

We first describe the photochemical model and focus our description on the production's computation, both primary and secondary, and the loss processes taken into account for each ion. Dication densities are then deduced.

The second part deals with the inputs of the model, i.e. cross sections, extreme ultra-violet (EUV) solar flux and the neutral atmosphere. In the third section we show the results of the modelling and validate the model by a comparison with Atmosphere Explorer data. We can then detail the steps of the computation which yields interesting features while modifying geophysical parameters.

The last paragraph addresses the possibility of detection of such ions applied to the Earth's upper atmosphere and other planets or satellites in the solar system, notably Titan.

2 The model TRANSCAR applied to dications

The model TRANSCAR and its outputs are described in detail in Lilensten and Blelly (2002). The model describes the upper atmosphere between 90 and 3000 km, assuming it is composed of six ions, namely N_2^+ , O_2^+ , O^+ , N^+ , NO^+ and H^+ . To summarize, TRANSCAR is a coupled kinetic/fluid model which solves sequentially the Boltzmann kinetic equation for suprathermal electrons and the Boltzmann momentum equations for the 6 ions listed above. Each part is linked with the other and updated through ionisation and heating rates (produced by the kinetic transport code), on the one hand, and through electronic density and temperature yielded by the 1-D, time-dependent fluid transport model, on the other hand (Fig. 1).

For the ion productions which are the outputs of interest in the present study, two mechanisms are taken into account. First, the primary production is the ionisation of the thermosphere due to the solar EUV flux and is basically related to a Beer-Lambert law. Following this first photoproduction, sufficiently high-energy primary electrons may be released that can ionize, in turn, the neutral gas: secondary electrons and ions are then generated, called the secondary ion production. In the latter case, we have to use a physical description in terms of a kinetic transport of suprathermal electrons, given by the kinetic part of TRANSCAR. The Auger effect, originally proposed as a low-altitude source of O^{++} ions by Avakyan (1978a, 1980), is not taken into account here.

The ionisation thresholds of N_2 , O_2 and O , for single and double ionisation processes are listed in Table 1. The kinetic formalism described below is relevant to doubly-charged ions, and follows closely the singly-charged ion description of Lilensten and Bletly (2002). The photochemical description proposed in Sect. 2.4 is, however, specific to doubly-charged ions while singly-charged ion parameters are given by the Boltzmann fluid formalism.

2.1 Primary productions

The expression of the primary production profile $P_{prim}^j(z)$ of an ion j is given in $cm^{-3} s^{-1}$ by a simple Beer-Lambert law for the energy E and at the altitude z :

$$P_{prim}^j(z) = n_s(z) \int \sigma_i^{s \rightarrow j}(E) I_\infty(E) e^{-\tau_{hv}(z,E)} dE, \quad (1)$$

where $I_\infty(E)$ is the solar flux on the top of the ionosphere, $\sigma_i^{s \rightarrow j}(E)$ the photoionisation cross section of species s producing the doubly-charged ion j , and $n_s(z)$ the density of the mother species s which can be either a singly-charged ion or a neutral.

$\tau_{hv}(z,E) = \sum_s \sigma_s^a(E) \int_z^\infty n_s(z') \text{chap}\chi(z') dz'$ represents the optical depth, a function of the absorption cross section of the species s noted $\sigma_s^a(E)$ and $\text{chap}\chi(z)$, the Chapman function, a function of the altitude and the solar zenith angle χ .

2.2 Kinetic transport and secondary productions

The primary electrons can be of a high enough energy to ionize as well the neutral gas, even for doubly-charged ions, which have a high ionisation threshold. The steady-state kinetic transport equation describes the angular and energy redistributions of electrons and connects the spatial evolution of the electron flux from the top of the ionosphere to the low E -region. Mathematically speaking, when reviewing losses and sources, we can write (Lilensten and Bletly, 2002):

$$\mu \frac{\partial I(\tau, E, \mu)}{\partial \tau(z, E)} = -I(\tau, E, \mu) + sf(\tau, E, \mu) + \frac{n_e(z)}{\sum_k n_k(z) \sigma_k^T(E)} \frac{\partial(L(E) I(\tau, E, \mu))}{\partial E} + \sum_l \left\{ \frac{n_l(z) \sigma_l^T(E)}{\sum_k n_k(z) \sigma_k^T(E)} \int_{-1}^1 d\mu' \int_E^\infty dE' R^l(E'; \mu \rightarrow E; \mu') I(\tau, E', \mu') \right\}, \quad (2)$$

where $I(\tau, E, \mu)$ is the electron stationary flux ($cm^2 s^{-1} eV^{-1} sr^{-1}$), E , E' , μ and μ' the energies in eV of scattered and incident electrons and their respective pitch-angles cosine. $\sigma_k^T(E)$ stands for the total elastic and inelastic collisions' cross section for the neutral species s , while $n_k(z)$ and $n_e(z)$ represent the density of the neutral species k and the electron density. $\tau(z,E)$ is the electron scattering depth, defined as $d\tau(z,E) = -\sum_s \sigma_k^T(E) n_k(z) dz$.

Table 1. Ionisation thresholds for some common species.

Species	Single Ionisation threshold (eV)	Double ionisation threshold (eV)	
N_2	15.58	43.00	(Ahmad, 2002)
O_2	12.08	36.13	(Hall et al., 1992)
O	13.61	48.74	(He et al., 1995)
O^+	35.13		

R^l is the redistribution function (or normalized differential cross section) from an initial state (E' , μ') to a final state (E , μ) for the neutral species l . It depends on the elastic and inelastic cross sections. The source function $sf(\tau, E, \mu)$, which corresponds to the photoelectron production rate, varies with the precipitated flux or the primary photoelectron flux conditions. The continuous energy loss function $L(E)$, describing the energy transfer from the suprathermal "hot" electrons to the ambient electrons, is computed via a scheme given by Swartz and Nisbet (1972).

The secondary production of the ion j is then:

$$P_{sec}^j(z) = 2\pi n_s(z) \int_{-1}^1 d\mu \int_0^\infty \sigma_{ie}^{s \rightarrow j}(E) I(\tau, E, \mu) dE. \quad (3)$$

$\sigma_{ie}^{s \rightarrow j}(E)$ is here the electron-impact ionisation cross section for the production of a doubly-charged ion j through the mother species s , either an ion or a neutral.

The final overall production for the doubly-charged species j is simply the sum of the primary and the secondary productions.

$$P_{tot}^j(z) = P_{prim}^j(z) + P_{sec}^j(z) \quad (4)$$

2.3 Loss mechanisms for dications: a chemical model

The chemical loss profiles are defined as:

$$L_j(z) = \sum_i k_i n_i(z) + \frac{1}{\tau_j^d}, \quad (5)$$

where k_i is the reaction rate constant ($cm^3 s^{-1}$) corresponding to the reaction of N_2^{++} , O_2^{++} or O^{++} with a neutral of density n_i , and τ_j^d is the dissociation lifetime of the molecular doubly-charged ion j .

The electronic recombination rate with N_2^{++} is taken from Seiersen et al. (2003). The rate constants for the reaction of O_2^{++} with N_2 and O_2 are taken from Chatterjee and Johnsen (1989). N_2^{++} reaction rate constants are given by new laboratory measurements from the LCP/LURE team with the CERISES apparatus (acronym for Collisions Et Réactions

Table 2. A comprehensive list of reaction rate constants for N_2^{++} , O_2^{++} , and O^{++} corresponding to the reactions with the neutrals N_2 , O_2 , O and the electronic recombination.

Species	Reaction	Reaction rate constants ($\text{cm}^3 \text{s}^{-1}$)	References
N_2^{++}	$N_2^{++} + N_2 \rightarrow \text{products}$	$k_1 = 2.70 \times 10^{-9} \pm 25\%$	This work
	$N_2^{++} + O_2 \rightarrow \text{products}$	$k_2 = 2.80 \times 10^{-9} \pm 25\%$	This work
	$N_2^{++} + e^- \rightarrow N_2^+ + h\nu$	$k_3 = 5.8 \times 10^{-7} \left(\frac{300}{T[K]} \right)^{0.5} \pm 20\%$	Seiersen et al. (2003)
O_2^{++}	$O_2^{++} + N_2 \rightarrow O_2^+ + N_2^+$	$k_4 = 2.0 \times 10^{-9}$ $k_4 = (2.0 \pm 0.5) \times 10^{-9}$ at 0.04 eV	Glosik et al. (1978) Chatterjee and Johnsen (1989)
	$O_2^{++} + O_2 \rightarrow O_2^+ + O_2^+$	$k_5 = (2.0 \pm 0.5) \times 10^{-9}$ at 0.04 eV	Chatterjee and Johnsen (1989)
O^{++}	$O^{++} + N_2 \rightarrow \text{products}$ k_6	2.9×10^{-10}	Breig et al. (1977)
		$(1.3 \pm 0.3) \times 10^{-9}$ at 300 K	Johnsen and Biondi (1978)
		$(1.6 \pm 0.6) \times 10^{-9}$	Howorka et al. (1979)
		1.4×10^{-9}	Geiss and Young (1981)
		$(3.15 \pm 0.26) \times 10^{-9}$ at 2×10^4 K	Fang and Kwong (1995)
	$O^{++} + O_2 \rightarrow \text{products}$ k_7	$(1.5 \pm 0.3) \times 10^{-9}$ at 300 K	Johnsen and Biondi (1978)
		$(1.7 \pm 0.7) \times 10^{-9}$	Howorka et al. (1979)
	$O^{++} + O \rightarrow O^+ + O^+$ k_8	$1.0 \times 10^{-11} \pm 40\%$	Breig et al. (1977)
		$\sim 2 \times 10^{-11}$	Avakyan (1978a)
		$\leq 10^{-10}$	Victor and Constantinides (1979)
		1.5×10^{-10} (in the case of Venus)	Fox and Victor (1981)
6.6×10^{-11}		Breig et al. (1982)	
2.0×10^{-10} (in the case of Io)		Brown et al. (1983)	
$(1.06 \pm 0.40) \times 10^{-10}$		This work (see text)	
$O^{++} + e^- \rightarrow O^+ + h\nu$	$k_9 = 2.1 \times 10^{-11} Z^2 T^{-0.5}$	Nakada and Singer (1968)	
$O^{++} + N_2 \rightarrow O + N_2^{++}$	$k_{10} \sim 6.8 \times 10^{-11}$	Avakyan (1978a)	
$O^{++} + O_2 \rightarrow O + O_2^{++}$	$k_{11} \sim 2 \times 10^{-11}$	Avakyan (1978a)	

d'Ions Sélectionnés par des Electrons de Seuil). The experimental procedure is described in Nicolas et al. (2002) and Franceschi et al. (2003).

In the case of N_2^{++} , the lifetime of the ion ground state is 3 s (Mathur et al., 1995). For O_2^{++} , as no data is currently available, we assume that the lifetime is limited by the tunnelling through a barrier towards dissociation and we estimate it equal to the lifetime of CO_2^{++} , i.e. 4 s (Mathur et al., 1995). When produced in excited states (electronic or vibrational), the lifetime of the dication is known to decrease rapidly (Cox et al., 2003). Therefore, another unknown is the relative abundance of the dication ground state to the

excited states in the ‘‘ionisation cross section measurements’’ reported in Table 3. This is unknown, but as the lifetime is rapidly decreasing with internal energy, and as the spectrometers used for absolute measurement are generally sensitive to species stable in the 10-microseconds-or-more time range, we estimated that the abundance of the ground state might well be 50–80% of the population that was measured. However, as we don't know more precisely the ratio, we chose to use the data from Table 3 as it is, and therefore produce an upper estimate of the expected density of the molecular dications O_2^{++} .

Table 3. Cross sections available for the ionisation of N₂, O₂ and O.

Species	Photoionisation cross section	Maximum cross section value measured (cm ²)	Electron-impact cross section
N ₂ → N ₂ ⁺⁺	–		3.6 × 10 ⁻¹⁸ Halas and Adamezyk (1972)
			3.35 × 10 ⁻¹⁸ Märk (1975)
			~ 6.6 × 10 ⁻¹⁸ Krishnakumar and Srivastava (1990), maximum estimate*
			~ 6.9 × 10 ⁻¹⁸ Straub et al. (1996), estimated*
O ₂ → O ₂ ⁺⁺	–		1.07 × 10 ⁻¹⁸ Märk (1975)
			~ 1.9 × 10 ⁻¹⁸ Krishnakumar and Srivastava (1992), maximum estimate*
			~ 1.6 × 10 ⁻¹⁸ Straub et al. (1996), estimated*
O → O ⁺⁺	Angel and Samson (1988)	0.22 × 10 ⁻¹⁸	5.56 × 10 ⁻¹⁸ Ziegler et al. (1982)
	Fennelly and Torr (1992)	0.22 × 10 ⁻¹⁸	5.59 × 10 ⁻¹⁸ Zipf (1985)
			5.5 × 10 ⁻¹⁸ Itikawa and Ichimura (1990)
O ⁺ → O ⁺⁺	Baluja and Zeippen (1988) [†]	8.50 × 10 ⁻¹⁸	43.8 × 10 ⁻¹⁸ Lütken & Harrison (1971)
	Kjeldsen et al. (2002) [†]	8.50 × 10 ⁻¹⁸	
	Aguilar et al. (2003) [†]	10.6 × 10 ⁻¹⁸	45.3 × 10 ⁻¹⁸ Yamada et al. (1988)

* The original measurements concerned the products N⁺ + N₂⁺⁺ and O⁺ + O₂⁺⁺ together. Maximum estimates on cross sections for the production of N₂⁺⁺ and O₂⁺⁺ are made here on the following assumptions proposed by Krishnakumar and Srivastava (1990) for N₂⁺⁺ and by Märk (1975) for O₂⁺⁺. According to these authors, a maximum of 10% of the overall N⁺ + N₂⁺⁺ production reported may be of N₂⁺⁺ origin while Märk (1975) reports that O₂⁺⁺ cross sections are less than 1% of those for the production of O₂⁺, yielding the estimates shown in Table 3.

† Cross sections measured at threshold.

Owing to the existence of measurements of the rate constants for the reaction of O⁺⁺ with N₂, O₂ (discussed in Sect. 4), and O, we can roughly estimate the effective lifetime of O⁺⁺ in multiplying by the corresponding neutral densities $\frac{1}{k_i n_i}$: we obtain an O⁺⁺ lifetime of less than 100 s at all altitudes between 100 and 500 km.

Other loss reactions, namely that of O⁺⁺ with He and H, can be of importance above 600 km, where He and H concentrations become high and rate constants reach values of $1.1 \times 10^{-10} \text{ cm}^3 \text{ s}^{-1}$ for 1000 K. Because all densities are calculated below 500 km, as shown in Sect. 2.4, these loss reactions are assumed to be negligible.

2.4 Output of the model: densities of N₂⁺⁺, O₂⁺⁺ and O⁺⁺

Using the continuity equation $\frac{\partial n_j(z)}{\partial t} + \text{div}(n_j(z) v_j(z)) = P_j(z) - n_j(z) L_j(z)$, we are now able to determine the density

profile of a doubly-charged ion.

The density $n_j(z)$ of a doubly-charged ion j is simply given by the photochemical equilibrium:

$$n_j(z) = \frac{P_{tot}^j(z)}{L_j(z)}. \quad (6)$$

This expression is valid at low altitudes, i.e. at altitudes less than 500 km. At higher altitudes, the velocity may become too large to insure the validity of the steady-state assumption.

3 Inputs of the model

To solve Eqs. (1) and (3), we need to know the parameters $n_s(z)$, $\sigma_i^{s \rightarrow j}(E)$, $\sigma_{ie}^{s \rightarrow j}(E)$, and $I_\infty(E)$.

The neutral compositions and temperature are provided by the semi-empirical model MSIS-90 (Hedin, 1987, 1991)

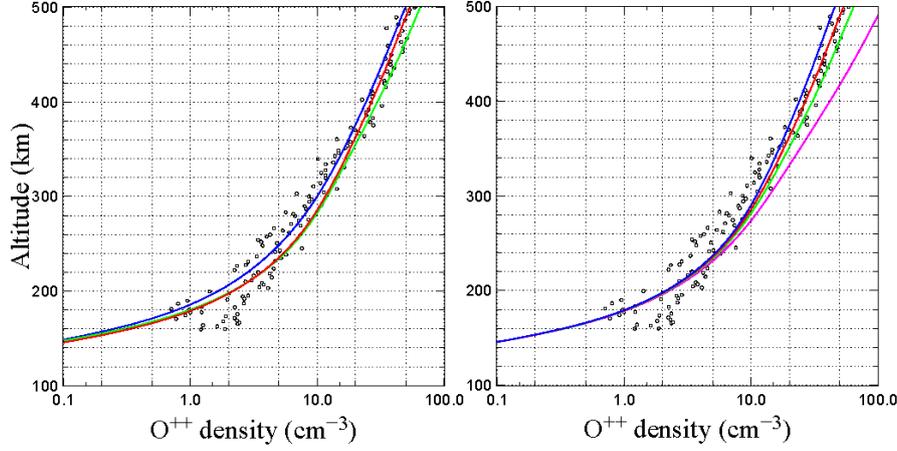


Fig. 2. Left: O^{++} density as recorded by AE-C2758 on 12 August 1974 (circles) and for different geophysical conditions computed by the model in the photoequilibrium assumption (curves). The blue curve stands for the satellite latitude/longitude position $(-5.81^\circ, 64.87^\circ)$ for $\chi=79.99^\circ$ at altitude 161 km. The red curve corresponds to $(-31.55^\circ, 54.64^\circ)$, $\chi=78.53^\circ$ at 377 km. The green curve is for the position $(-45.67^\circ, 45.70^\circ)$, $\chi=78.91^\circ$ at 494 km. Right: evolution of O^{++} density under the variation of the reaction rate constant k_8 (see text) in parallel with AE-C data plots (empty circles). Blue curve: $k_8=1.50 \times 10^{-10} \text{ cm}^3 \text{ s}^{-1}$. Green curve: $k_8=1.00 \times 10^{-10} \text{ cm}^3 \text{ s}^{-1}$. Magenta curve: $k_8=5.00 \times 10^{-11} \text{ cm}^3 \text{ s}^{-1}$. The best fit with AE-C 2758 at $\chi=78.53^\circ$ is obtained for $k_8=1.25 \times 10^{-10} \text{ cm}^3 \text{ s}^{-1}$ (red curve).

while we use the solar flux model EUV91 with its 39-energy box scheme (Tobiska, 1991) on which the photoionisation cross sections are sampled.

The different ionisation cross sections of interest in this study are summarized in Table 3. Generally speaking, no data have been available up to now for the double photoionisation of the N_2 and O_2 molecules, while for the electron impact, a large documentation exists. The only complete set of data is for O^{++} , for both photoionisation and electron impact ionisation. We use Fennelly and Torr (1992) for double photoionisation of oxygen, and Zipf (1985) for the electron-impact cross section because of their remarkably precise tables.

We take N_2 and O_2 electron-impact double-ionisation cross sections from Märk (1975): it is the only measurement available so far where the direct production of N_2^{++} is given without any spectrometric overlapping with N^+ . The double photoionisation of N_2 and O_2 is a more complex source of concern as no results have been published yet. We use the approximation:

$$\frac{\sigma_{hv}^{N_2}(N_2^{++})}{\sigma_{hv}(N_2)} = \frac{\sigma_e^{N_2}(N_2^{++})}{\sigma_e(N_2)} \quad \text{and} \quad \frac{\sigma_{hv}^{O_2}(O_2^{++})}{\sigma_{hv}(O_2)} = \frac{\sigma_e^{O_2}(O_2^{++})}{\sigma_e(O_2)} \quad (7)$$

to yield the double photoionisation cross sections $\sigma_{hv}^{N_2}(N_2^{++})$ and $\sigma_{hv}^{O_2}(O_2^{++})$, where $\sigma_{hv}(i)$ stands for the photoabsorption cross section of the neutral species i , $\sigma_e(j)$ or the total electron impact diffusion cross section of the species j and $\sigma_e^i(i^{++})$ for the double electron impact ionisation cross section of the neutral i .

Another source of molecular dications might be the single electron-impact ionisation of N_2^+ and O_2^+ : though the ionisation cross sections (of the order of 10^{-17} cm^2 for N_2^+ according to Bahati et al., 2001) is not negligible, the N_2^+ and O_2^+ densities are much smaller than the neutral ones by a factor of at least 10^6 . The result is that this contribution to N_2^{++} and O_2^{++} productions is negligible in our context, especially in the low-altitude regions considered here.

4 Validation of the model

In this section, we compare the results of the model described above for O^{++} with the lone experimental data from the magnetic ion mass spectrometer MIMS (Hoffman et al., 1973) on board Atmosphere Explorer (AE), which were recorded 30 years ago (Breig et al., 1982).

4.1 Calculated O^{++} densities compared with AE-C data

The AE satellite sampled data during descent in late afternoon in the southern winter non-polar ionosphere, corresponding to orbits C-2735, C-2743, C-2754, C-2757, C-2758. The solar zenith angle ranged between 75° and 85° , while the magnetic indices A_p remained around 16.

In Fig. 2, we plot O^{++} densities as a function of altitude. On the left panel, we compare AE-C measurements to the model's predictions for three different geographical coordinates, corresponding to data recorded at low altitude (161 km), mean altitude (377 km) and high altitude (594 km). The model reproduces well the data profiles, however, with a little discrepancy between 140 and 200 km: as the measurement uncertainties are also growing larger at these altitudes,

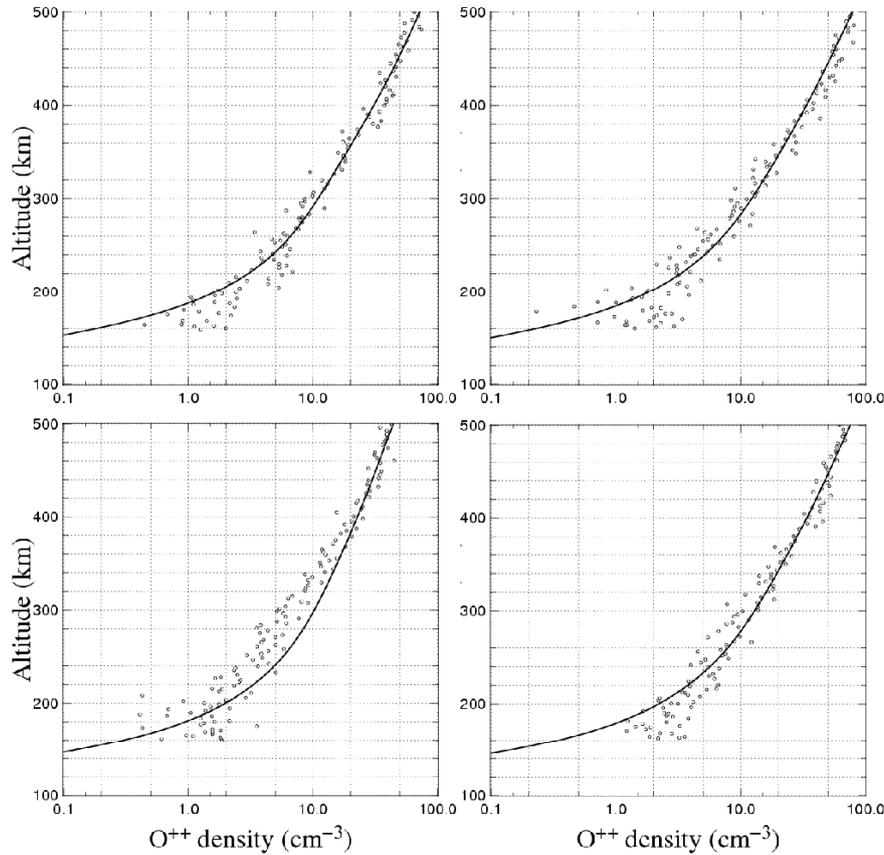


Fig. 3. O^{++} density in the range 100–500 km for AE-C successive orbits 2735 (top left), 2743 (top right), 2754 (bottom left) and 2757 (bottom right). The results of the model are compared to AE-C data and we fit for each plot the reaction rate constant k_8 . Top left: $k_8=1.1 \times 10^{-10} \text{ cm}^3 \text{ s}^{-1}$. Top right: $k_8=6.5 \times 10^{-11} \text{ cm}^3 \text{ s}^{-1}$. Bottom left: $k_8=1.6 \times 10^{-10} \text{ cm}^3 \text{ s}^{-1}$. Bottom right: $k_8=7.0 \times 10^{-11} \text{ cm}^3 \text{ s}^{-1}$ (AE-C data taken from Breig et al., 1982).

it results in a high spreading of experimental AE data points, which eventually enables one to validate our results at lower altitudes.

In the following subsections, we adopt for the model the average-altitude parameters of each satellite orbit, i.e. for orbit C-2758 $\chi=78.53^\circ$, and the latitude/longitude set $(-31.55^\circ, 54.64^\circ)$, taken as mean conditions.

Let us now discuss our model inputs. As stated above, we use the semi-empirical model MSIS-90 for the neutral atmosphere. This model is in fairly good agreement up to 400 km with the recorded AE-C data for the neutrals. Above 400 km, it clearly overestimates the measurements and reaches a density value higher by a factor of two at 500 km. Nevertheless, depending on the neutral composition inputs (either MSIS or AE-C neutral composition recording), the results of our prediction density model are not significantly modified at these high altitudes (differences up to 10% at most). We obtain once more good agreement with AE-C O^{++} density profiles.

We can now test the reaction rate constants listed in Table 2. The best agreement with AE-C O^{++} profiles is

Table 4. Summary of the reaction rate constants obtained for the reaction $O^{++}+O$ on each AE orbit.

AE-C orbit	Loss rate k_8 ($\text{cm}^3 \text{ s}^{-1}$)
2735	1.10×10^{-10}
2743	6.50×10^{-11}
2754	1.60×10^{-10}
2757	7.00×10^{-11}
2758	1.25×10^{-10}
Average	$(1.06 \pm 0.40) \times 10^{-10}$

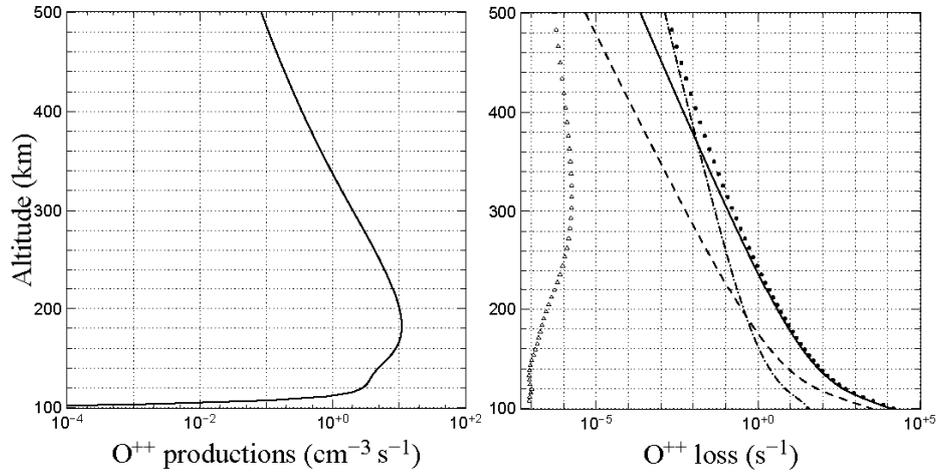


Fig. 4. O^{++} production and loss profiles for orbit 2758. Left panel: total O^{++} production profile. Right panel: loss mechanisms taken into account in the model. Collisions with N_2 (solid curve), with O_2 (dashed curve), with O (dash-dotted curve) and with the electrons (triangles) are represented. The sum of all contributions is in full circles.

Table 5. Set of geophysical parameters used in the model.

Parameters	
Latitude	$\left\{ \begin{array}{l} \text{Tromsø } 69.66^\circ N, 18.95^\circ E \\ \text{Grenoble } 45.11^\circ N, 5.43^\circ E \end{array} \right.$
Solar zenith angle χ	$\chi = 0 - 90^\circ$
Solar activity $f_{10.7}$	$\left\{ \begin{array}{l} f_{10.7} = 68 \\ f_{10.7} = 243 \end{array} \right.$
Magnetic index A_p	$A_p = 3$

found when using the k_6 and k_7 rate constants obtained in laboratory measurements by Howorka et al. (1979). As for the charge-exchange reaction $O^{++}+O$, which has not been measured but has been derived from models, we are compelled to search for the best fit of our model while varying the coefficient k_8 . This is shown in Fig. 2 (right panel) for orbit C-2758: we find the best fit for the value $k_8=1.25 \times 10^{-10} \text{ cm}^3 \text{ s}^{-1}$.

4.2 Determination of the $O^{++}+O$ reaction rate constant

Breig et al. (1982) published AE-C data for different orbits corresponding to the two days before orbit C-2758. They occur in slightly different conditions. The satellite recordings occur during descents that spread from 10 August (C-2735) to 12 August 1974 (C-2757). We plot in Fig. 3 the O^{++} density with the reaction rates defined in the previous section

for each satellite orbit. We fit the reaction rate k_8 for each particular recording in order to obtain the best correlation.

These different sets of orbital data lead us to the consensus value $\bar{k}_8=1.06 \pm 0.40 \times 10^{-10} \text{ cm}^3 \text{ s}^{-1}$ at 1σ for the $O^{++}+O$ reaction.

The values fitted are summarised in Table 4 and averaged over the five orbits considered, and eventually yield the coefficient \bar{k}_8 .

This result ranges nicely in between the extreme values found by Fox and Victor (1981) determined on Venus, i.e. $k_8=1.5 \times 10^{-10} \text{ cm}^3 \text{ s}^{-1}$, and Breig et al. (1982) on Earth, i.e. $k_8=6.6 \times 10^{-11} \text{ cm}^3 \text{ s}^{-1}$. A limitation to these comparisons is that, together with the approach presented here, both authors fitted their model with experimental data while using very simple assumptions for the computation of productions and losses. According to Smith and Adams (1980), Breig et al. (1977) may have well underestimated their values in light of what is expected experimentally for other doubly-charged ions such as Xe^{++} or Ar^{++} , and should be of the order of $10^{-10} \text{ cm}^3 \text{ s}^{-1}$.

The value retained here needs of course further confirmation from laboratory studies. What's more, the temperature dependence of the reaction rate constant k_8 has to be cleared up as we observe large variations depending on the orbit of the satellite. These variations, though certainly not entirely, could partly be of thermal origin.

4.3 Production and loss profiles for AE-C 2758

In Fig. 4, we plot the O^{++} production and loss profiles for AE orbit No. 2758. On the left panel, the production shows a broad peak that maximizes at $10 \text{ ion cm}^{-3} \text{ s}^{-1}$ near 180 km. On the right panel, we have the detailed contributions of O^{++} losses due to collisions with the neutral gas and the electrons.

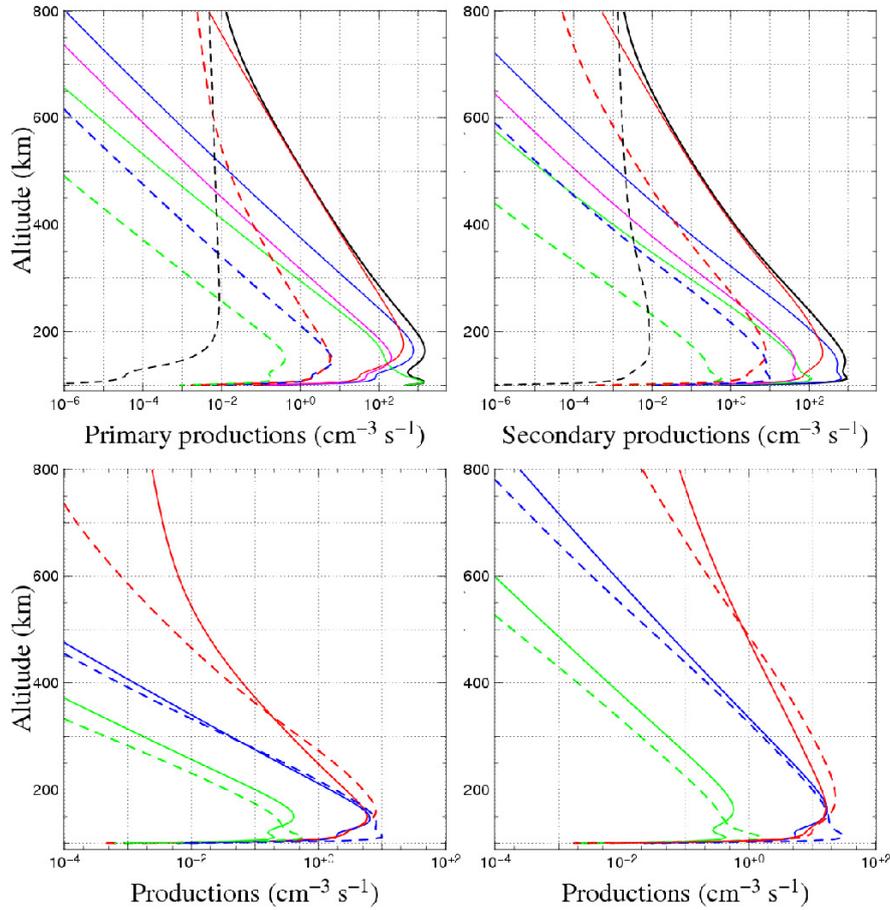


Fig. 5. Ion production profiles between 100 and 800 km (top left and right) at Grenoble, $\chi=63.51^\circ$. The electron contribution (black solid curve) is given by the weighted sum of all ion species: N_2^+ (solid blue), O_2^+ (solid green), O^+ (solid red), N^+ (solid magenta), H^+ (dashed black), N_2^{++} (dashed blue), O_2^{++} (dashed green) and O^{++} (dashed red). Primary productions are shown on the left and secondary productions on the right. Bottom: doubly-charged ion primary productions (solid curves) versus secondary productions (dashed curves) in minimum solar conditions ($f_{10.7}=68$, left) and in active solar conditions ($f_{10.7}=243$, right). N_2^{++} profiles are in blue, O_2^{++} in green and O^{++} in red.

We can see that collisions with electrons are negligible whatever the altitude. The other plots underline the growing efficiency with altitude of the $O^{++}+O$ mechanism: above 350 km, collisions with O play the major role in the final concentration shape and magnitude. We can then conclude that at lower altitudes, where collisions with N_2 and O_2 molecules are prominent, the model is almost not influenced by the $O^{++}+O$ process. As this latter process is also subject to the largest uncertainties, the model verifies AE measurements better for altitudes being below 300 km. This low-altitude validity acts as a cornerstone to the overall validity of the model.

So far as we have access to very few satellite data and as there is a clear lack of statistics, our present photochemical model is validated over the range of altitudes 100–500 km for O^{++} . We have determined by means of a fit

the charge-exchange reaction rate constant of O^{++} with O. Concerning N_2^{++} and O_2^{++} , ionosphere measurements have never been performed, and provided that our reaction rates are up to date and our modelling approach is similar to that of O^{++} , we can assume that the model is also valid for these two molecular dications. However, two strong limitations arise. First, due to the present lack of laboratory studies, it was not possible to take into account the reaction of molecular dications with O, although it is probably the major loss process at higher altitudes as we already showed for O^{++} . As a final step, we need direct data comparison to ascertain the hypotheses and look for the best geophysical conditions to create molecular ions in the ionosphere. In the next sections, a detailed sensitivity study of dication productions and densities is carried out.

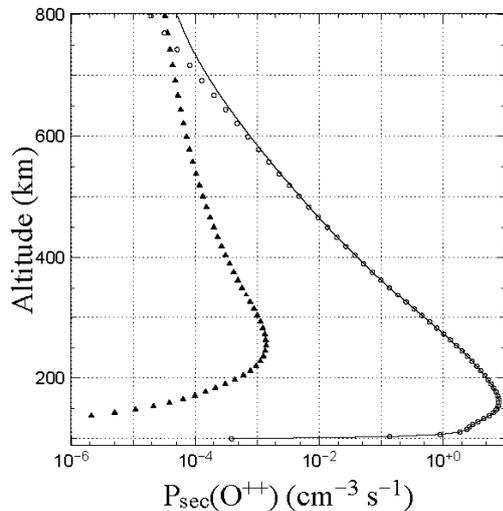


Fig. 6. Detail of the secondary productions of O^{++} in Grenoble and for quiet solar conditions, $\chi=63.51^\circ$. Productions of O^{++} via double ionisation by electron impact of O are shown in open circles. The single ionisation of O^+ is represented by black triangles. The solid curve is the total secondary production of O^{++} (in $\text{cm}^{-3} \text{s}^{-1}$) through both mechanisms.

5 Sensitivity study of productions and densities

Three main geophysical parameters are taken into account that are summarized in Table 5. Grenoble (France) is assumed to be representative of middle latitudes and Tromsø (Norway) is a typical high-latitude site. Two solar flux conditions are studied through the $f_{10.7}$ proxy variation, i.e. $f_{10.7}=68$ (solar minimum) and $f_{10.7}=243$ (solar active conditions). Finally, the sensitivity of each ion profile is examined throughout an entire day at Tromsø: the solar zenith angle dependence is examined in detail. All over this work the magnetic index A_p is set to 3, in order to avoid any influence from the magnetic activity. We choose day 120 of the year (early May) to compute our productions, losses and densities.

5.1 Primary and secondary productions

5.1.1 General considerations

Although the densities are computed only below 500 km, the production is of course calculated and shown up to 800 km. Primary and secondary production profiles of the main ion species are presented in Fig. 5 between 100 and 800 km.

The electron contribution is simply the weighted sum of all ion species: for dications, two electrons are produced for each double-ionization of a neutral species. Its production profile shows a two-peak shape particularly clear for the primary productions, one at low altitudes near 110 km (due to O_2^+), the other near 180 km (due to N_2^+ and O^+). The lower part of the figure shows the evolution of the dication

productions under quiet (bottom left) and active solar flux conditions (bottom right).

The productions rates of a doubly-charged ion are smaller than those for singly-charged ions by a factor at least equal to 100. At very high altitudes, however (>600 km), the O^{++} primary production rate can represent up to 10% of that of O^+ .

A change of dependence in O^{++} profiles is clearly seen on the left-hand side of Fig. 5, particularly sensitive for the primary productions. This evolution is interpreted as the two physical mechanisms causing the production of O^{++} , i.e. the double ionisation of O and the single ionisation of O^+ , both through photoionisation and electron impact ionisation. The single photoionisation of O^+ is the prominent mechanism at high altitudes (400–800 km) while the double photoionisation of O plays the most important role at lower altitudes. Among the secondary production mechanisms (electron impact ionisation), the ionisation of O^+ is the major reaction for producing O^{++} ions from 700 km upwards, as shown in Fig. 6.

As stated in Lilensten et al. (1989) and seen in Fig. 5 (bottom), secondary dication productions contribute up to 30% of the total ion productions above 180 km and are the main contribution at lower altitudes (100–200 km for the molecular dications, 100–350 km for O^{++}), because of the photon penetration altitude into the ionosphere.

The difference between molecular dications and O^{++} is due both to the rather high double ionisation threshold of O (48.74 eV) and to the electron-impact cross sections that are 25 times larger than the double photoionisation cross sections of O.

5.1.2 Influence of the solar activity

In Fig. 5 (bottom), productions increase together with the solar flux index. The production rate peak increases in altitude from 150 km to 180 km from low to high solar activity. Between $f_{10.7}=68$ and $f_{10.7}=243$, their intensity increases by a mean factor of 2.5 at low altitudes, owing to the growth of neutral densities. Above 300 km, the solar flux intensification is more noticeable and production rates increase by a factor of 50 to 10^2 for $f_{10.7}=243$, from minimum to maximum solar activity.

5.1.3 Influence of the latitude

The effect of the latitude is much smaller, as neither the general shape nor the global low-altitude peak intensities of dication production rates are observed to change significantly when moving from middle latitudes (Grenoble) to high latitudes (Tromsø). The only effect that can be seen at Tromsø is an increase in the total production rate of molecular dications, and a slight decrease in the production rate of O^{++} . Differences between the two sites are less than 15% below 200 km for all three doubly-charged ions but can reach 50% for N_2^{++} and O_2^{++} at 600 km.

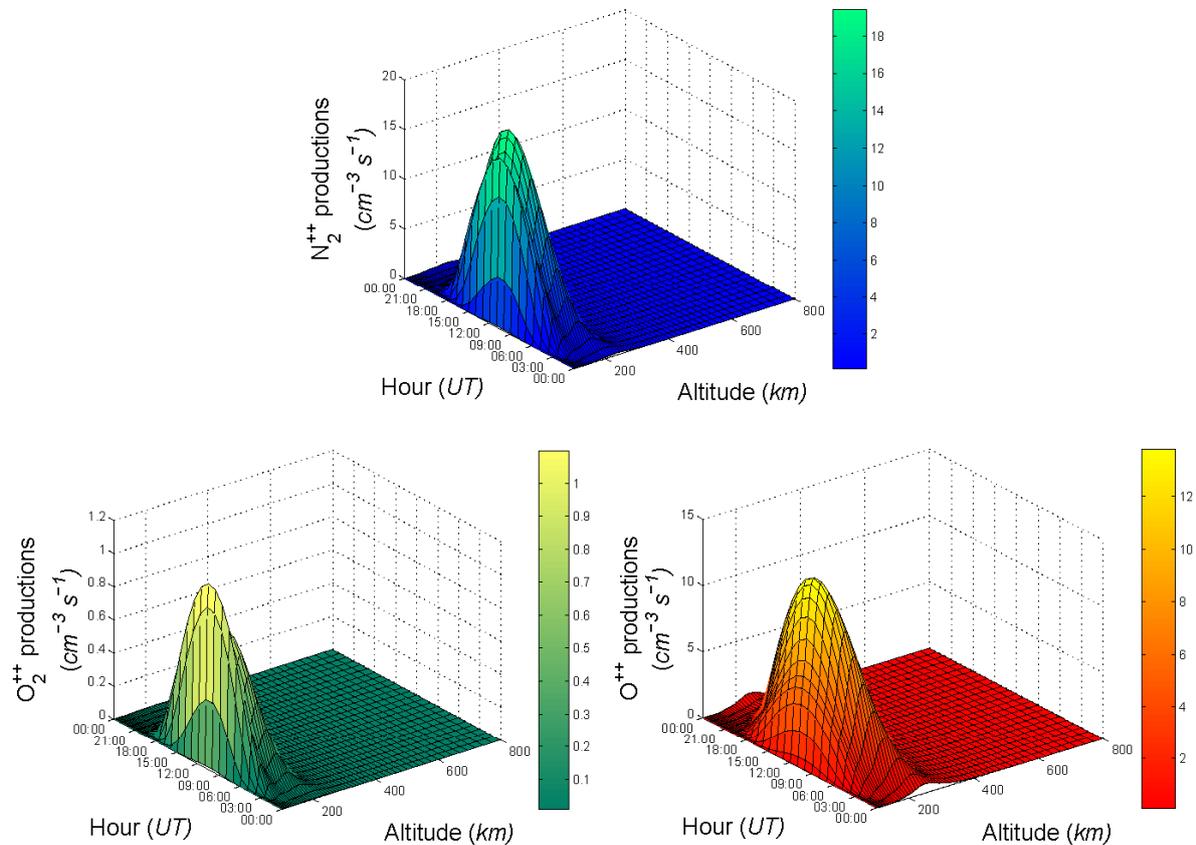


Fig. 7. Total productions (primary and secondary) of N_2^{++} (blue), O_2^{++} (green), O^{++} (red) over a whole day at Tromsø, for minimum solar flux conditions ($f_{10.7}=68$). Molecular dications show two sharp peaks at low altitudes, one around 115 km ascribed to the secondary production profiles, the other near 180 km attributed to the primary production profiles. O^{++} presents a wide peak around 220 km, mixing together the two production contributions.

5.1.4 Influence of the solar zenith angle

Together with the solar activity, the solar zenith angle variation is the parameter which has the strongest influence on productions. The larger the solar zenith angle, the more intense the solar flux absorption, because of the larger column density of atmosphere along the path of the photons: it implies that at a given altitude, fewer productions will be seen and the peaks will be shifted towards higher altitudes (Fig. 7). At $\chi=90^\circ$, for instance, and according to the model, no ions are produced at 100 km, regardless of the solar conditions.

This simple reasoning is verified for N_2^{++} and O_2^{++} . As seen in Fig. 7, peaks for molecular dications come in twos and are centred at very low altitudes (115 km and 120 km for N_2^{++} and O_2^{++} , respectively) due to secondary productions and the other at 180 km due to the primary production. O^{++} single production peak is wider and centred around 220 km, a difference due to the density of atomic oxygen which becomes prominent over N_2 and O_2 , from 200 km upwards.

5.1.5 Brief summary

The cumulative contribution of these 3 ions can be up to 5% of the total primary electron production and more than 10% for the secondary electron production, depending on the solar flux conditions and the solar zenith angle. As seen before, the total ion production rate is the sum of primary and secondary production rates. In the altitude range considered, secondary production rates contribute 50% of the total O^{++} ion production rate. For N_2^{++} , it reaches an average value of 15%, and for O_2^{++} a value of less than 5%. According to the results of the model, O_2^{++} is the rarest produced species of all three dications by a factor of at least 10.

Figure 8 shows the total production above Tromsø for all eight ions at minimum solar activity conditions and for $\chi=63.51^\circ$. Two peaks are visible for N_2^{++} and O_2^{++} , one around 110 km, the other at 180 km. For O^{++} , the

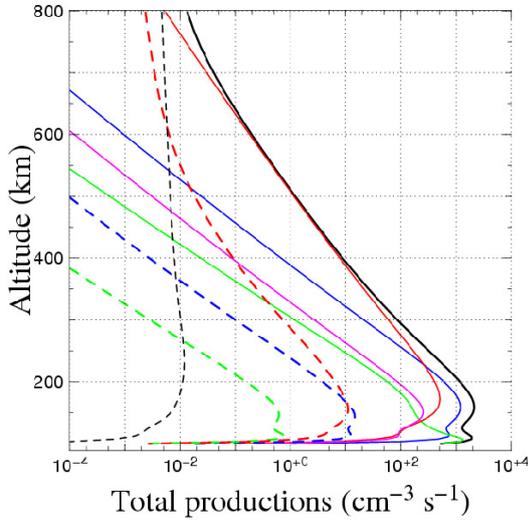


Fig. 8. Total ion productions at Tromsø, $f_{10.7}=68$, for the ions N_2^+ (solid blue), O_2^+ (solid green), O^+ (solid red), N^+ (solid magenta), H^+ (dashed black), N_2^{++} (dashed blue), O_2^{++} (dashed green) and O^{++} (dashed red). The total electron productions are represented in solid black.

production reaction $O^+ + h\nu \rightarrow O^{++} + e^-$ becomes prominent above 500 km and leads to a more slowly decreasing slope for the total production.

5.2 Densities

Figure 9 shows the major ion densities above Tromsø, for the minimum solar activity model. Near 160 km, the F_1 ionospheric layer is clearly seen, characterised by a peak in NO^+ density. We plot the electron density in black. Doubly-charged ions are represented by dashed lines.

We note that, among dications, the highest densities are expected for O^{++} which reaches 60 to 100 ions per cm^3 at 500 km, and becomes the ion with the fourth highest density, after O^+ , H^+ and N^+ . At 500 km, the O^{++} density is 10^5 times larger than N_2^{++} and O_2^{++} . Peaks in the density of N_2^{++} and O_2^{++} (1 cm^{-3} and 0.01 cm^{-3} , respectively) are then predicted between 200 km and 250 km.

5.2.1 Solar flux effect

O^{++} densities increase by a factor of 2.5 between 150 and 500 km, from low ($f_{10.7}=68$) to high ($f_{10.7}=243$) solar activity (Fig. 10, top). At the same time, N_2^{++} densities increase by a factor of 3 between 100 and 300 km, and by an increasing factor of 10 to 10^5 above 300 km. O_2^{++} follows the same evolution as N_2^{++} : a mean factor 2 separates the two solar flux results between 100 and 200 km, while above 300 km, the factors by which the densities increase reach 10^5 , showing that the differences become dramatically larger when altitudes increase.

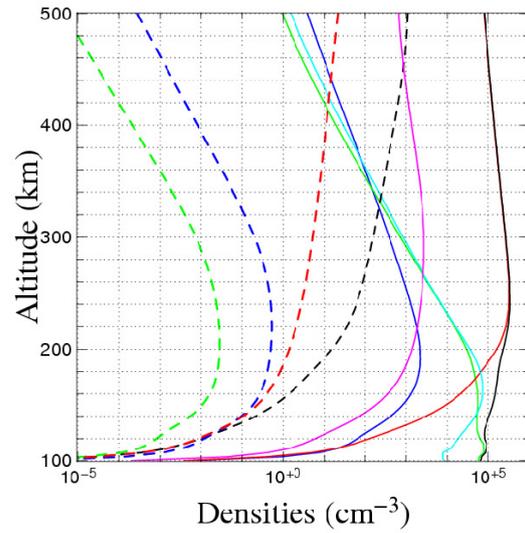


Fig. 9. Density profiles of the major ionic species in the ionosphere above Tromsø, $f_{10.7}=68$ and at $\chi=63.51$. N_2^+ is plotted in solid dark blue, O_2^+ in solid green, O^+ in solid red, N^+ in magenta, H^+ in dashed black, NO^+ in solid light blue, N_2^{++} in dashed blue, O_2^{++} in dashed green and O^{++} in dashed red. The electron density is represented in black solid. The three doubly-charged ion densities are computed under the photochemical equilibrium assumption.

5.2.2 Latitude influence

The influence of latitude is shown in Fig. 10 (bottom left). Generally speaking, the densities are more important at high latitudes for N_2^{++} and O_2^{++} whereas it is the opposite for O^{++} . The differences are ranging from a constant 40% for O^{++} to a highly variable factor for N_2^{++} and O_2^{++} depending on the solar conditions and the altitude (less than 10% at low altitudes or for active solar conditions, continuously-increasing in quiet conditions above 250 km, eventually reaching 40% at 500 km).

5.2.3 Solar zenith angle evolution

In Fig. 10 (bottom right), we consider two extreme cases to study the solar zenith angle effect on dication densities at mean latitude: local zenith ($\chi=30.47^\circ$), and twilight ($\chi=90^\circ$). Significant changes at low altitudes are to be seen for $\chi=90^\circ$: peaks appear higher in altitude and their amplitude drops on average by a factor of 1.5.

Around 500 km, O^{++} densities are slightly larger for twilight conditions, a tendency which does not recur with molecular doubly-charged ions. This original feature results from a more efficient O^{++} production at high altitudes, as explained in the previous section.

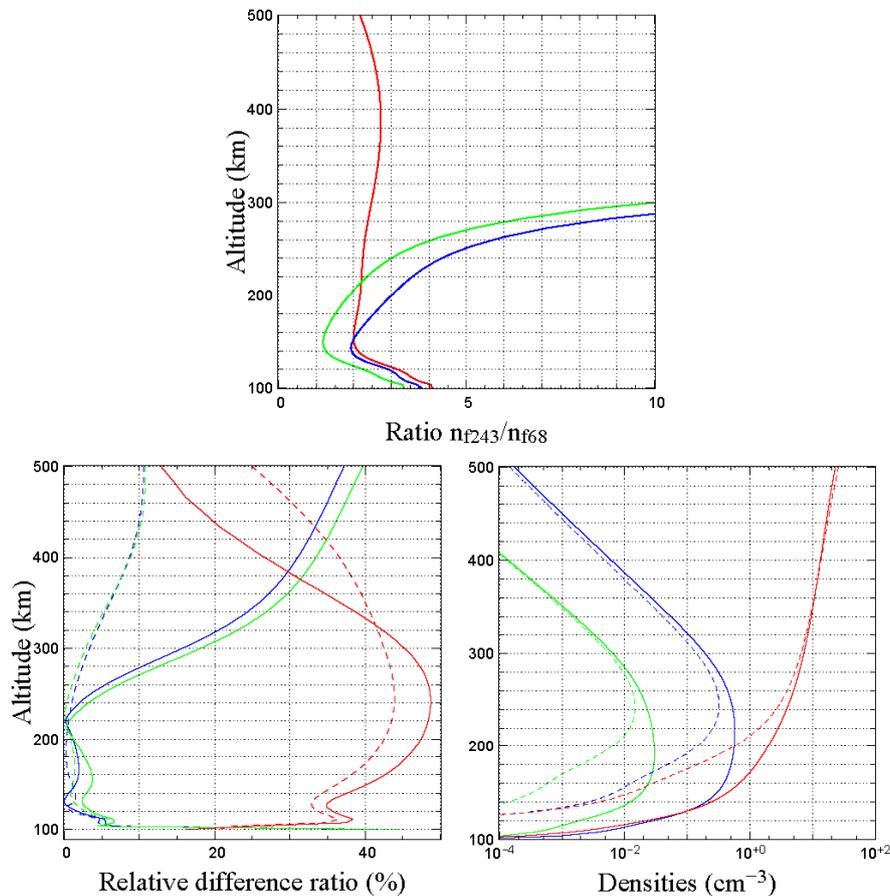


Fig. 10. Solar flux (top panel), latitudinal (bottom left panel) and solar zenith angle (bottom right panel) variation influences on dication densities. Top: we plot the ratio $\frac{n_i(f_{10.7}=243)}{n_i(f_{10.7}=68)}$ above Grenoble, $\chi=63.51^\circ$. N₂⁺⁺ is in blue, O₂⁺⁺ in green and O⁺⁺ in red. Bottom left: latitudinal relative differences between Tromsø and Grenoble are shown for each three species N₂⁺⁺ (blue), O₂⁺⁺ (green) or O⁺⁺ (red) in active (dashed curves) and quiet (solid curves) solar conditions. Bottom right: densities of the three dications for $\chi=30.94^\circ$ (solid curves) and for $\chi=90^\circ$ (dashed curves).

6 Detection of doubly-charged ions in planetary ionospheres

Two methods are available, namely mass spectrometers experiments and optical measurements.

6.1 Mass spectrometers

Originally, mass spectrometer experiments were the first device used on board satellites to yield some information about the ion composition of the atmosphere. Thus, Atmosphere Explorer and Pioneer were used to look for doubly-charged ions in the atmosphere of the Earth and Venus. With the Cassini-Huygens mission to the Saturnian system, much effort has been produced most recently to obtain a proper atmosphere/ionosphere model of Titan to be made available to the community. Predictions have then been cast on the possi-

ble existence of doubly-charged species in Titan's ionosphere (Lilensten et al., 2005a and 2005b).

This technique allows for the quantitative detection of a given ion through its mass to charge ratio m/q .

On Earth, the determination of O⁺⁺ ($m/q=8$) is particularly easy because it does not overlap with other species. However, this method is not suitable for molecular dications such as N₂⁺⁺ and O₂⁺⁺ as N⁺ and O⁺ have, respectively, the same mass to charge ratio.

According to the present model, the detection of the three dications, N₂⁺⁺, O₂⁺⁺ and O⁺⁺, will be made easier in solar maximum conditions and at noon when densities are at their highest. Latitude is not a crucial parameter and should not be worried about when recording data in the ionosphere.

Table 6. Fluorescence wavelengths and transitions for N_2^{++} , O_2^{++} and O^{++} .

Species	λ (nm)	Transition
N_2^{++}	158.9 – 159.4	(1,1) band
	158.7 – 159.3	$D^1\Sigma_u^+(0) \rightarrow X^1\Sigma_g^+(0)$
O^{++} (OIII)	500.824	$^1D_2 \rightarrow ^3P_2$ N ₁
	496.029	$^1D_2 \rightarrow ^3P_1$ N ₂
	436.443	$^1S_0 \rightarrow ^1D_2$
	232.166	$^1S_0 \rightarrow ^3P_1$
	166.615	$^3S_2^0 \rightarrow ^3P_2$
	166.081	$^3S_2^0 \rightarrow ^3P_1$
O_2^{++}	470	$A^3\Sigma_u^+ - X^1\Sigma_u^+$
	443	
	417	

6.2 Spectroscopy of dications

Among doubly-charged ions, N_2^{++} has perhaps been the most widely studied species for over two decades. The ground state of N_2^{++} , denoted by $X^1\Sigma_g^+$, is 43.00 eV above the ground neutral state (Ahmad, 2002, see Table 1). So far, 8 excited electronic states have been identified, such as the first ones $a^3\Pi_u$ and $b^3\Sigma_g^-$, situated at 0.57 and 1.48 eV, respectively, above the N_2^{++} ground state (Taylor and Partridge, 1987). The ground state $X^1\Sigma_g^+$ of O_2^{++} is located at 36.13 eV above the ground neutral state, and the first excited state $A^3\Sigma_u^+$ at 4.16 eV above the O_2^{++} ground state (Fournier et al., 1992). Moreover, the O_2^{++} vibrational structure has been investigated by a threshold photoelectron coincidence technique (TPESCO) (Hall et al., 1992 and references therein).

The O^{++} ground state 3P_0 is situated 48.74 eV above its ground neutral state (He et al., 1995). Many excited states exist, among which 1D_2 , 1S_0 and $^5S_2^0$ lie 2.513 eV, 5.354 eV and 7.479 eV, respectively, above the O^{++} ground level. These states are notably involved in the formation of emission lines, discussed in the next paragraph.

6.3 Fluorescence

The fluorescence of O^{++} is well-known since its doublet centred around 500 nm has been used as a tracer of electron densities and temperatures in gaseous nebulae since the 1940s (e.g. Menzel and Haller, 1941).

Due to the fast dissociation or predissociation of molecular dication excited states, fluorescence towards the ground state is generally a rare phenomenon, but was at least observed for

N_2^{++} (Cossart et al., 1985; Cossart and Launay, 1985; Olsson et al., 1988; Ehresmann et al., 2000). For O_2^{++} , Avakyan (1978b) also reports the possible identification of auroral emissions around 243 nm which he ascribes to the $A^3\Sigma_u^+ - X^1\Sigma_g^+$ transition: despite the fact that no further confirmation of a fluorescence feature in O_2^{++} has yet been found, three emission wavelengths have recently been tabulated by Avakyan (1998), as shown in Table 6, where we list the fluorescence transitions and their respective wavelengths for N_2^{++} , O_2^{++} and O^{++} . The O^{++} transitions are situated in the visible blue spectrum and in the UV range.

The N_0 excited state of specific interest to us is $D^1\Sigma_u^+$, which lies 7.8 eV above the N_2^{++} ground state (Ahmad, 2002; Olsson et al., 1988). This state fluoresces in transitions to the N_2^{++} ground state, with bands centred around 159 nm (Table 6). The fluorescence lifetime of the $N_2^{++} D^1\Sigma_u^+$ electronic state is 6.0 ± 0.5 ns, according to Olsson et al. (1988). No collisional deactivation is therefore liable to occur in the ionosphere during this very short lifetime. Using the results of Ehresmann et al. (2003), a rough approximation leads us to conclude that nearly 10% of the total N_2^{++} ions created by double photoionisation at the cross-section peak near 65 eV, are produced in this state. As densities for N_2^{++} reach, at the most, 1 ion per cm^3 , we would expect, in a very optimistic hypothesis, that a mere 0.1 ion per cm^3 is produced in the fluorescent state. Depending on the solar flux intensity, we can then estimate the maximum intensity likely to be produced along the line of sight by integrating ion productions over our altitude range. The intensity ranges from 0.6 R in quiet solar conditions to 2.3 R in active solar conditions. This value is high enough to be detected by spectrophotometers whose accuracy lies typically within the sub deci-Rayleigh range.

Regarding O^{++} , it is by far the most abundant doubly-charged species in the Earth's ionosphere and is therefore the most likely to be detected optically in aurora or diurnal high-resolution spectra. Besides the forbidden transitions N₁ and N₂, three other lines exist for O^{++} in the UV range (see Table 6; NIST database at http://physics.nist.gov/cgi-bin/AtData/main_asd) but have never been identified in the diurnal ionosphere spectrum. The radiative lifetime of the $^5S_2^0$ metastable level of O^{++} was measured to be 1.22 ± 0.08 ms (Johnson et al., 1984). A fruitful comparison with mass spectrometer results on board satellites should be of great interest in the years to come.

7 Conclusion and perspectives

Throughout this work, we study the densities of stable, doubly-charged ions produced in the Earth's dayside ionosphere. For the first time a comprehensive investigation of the problem is led for N_2^{++} , O_2^{++} and O^{++} . The photochemical model TRANSCAR, based on Boltzmann's formalism, is used to yield productions (primary and secondary). In order to compute the densities of each doubly-charged ion, a photochemical part is built up in which reaction rate constants are included. The main inputs of the model are given

by laboratory experiments. Emphasis is laid on the need for laboratory measurements concerning double photoionisation cross sections of N_2 and O_2 , as well as the reactions of dications with O.

We then validate our approach for O^{++} by the comparison with the only measurements available, those recorded by the satellite Atmosphere Explorer in the mid-seventies. The reaction rate constant concerning the $O^{++}+O \rightarrow O^++O^+$ reaction is predicted to be $1.06 \pm 0.40 \times 10^{-10} \text{ cm}^3 \text{ s}^{-1}$ and needs to be confirmed by laboratory experiments.

A sensitivity study is also proposed, showing the most favourable conditions for the productions and existence of doubly-charged ions, via the variation of the solar flux intensity (high $f_{10.7}$), the geographical coordinates (middle latitudes) and the solar zenith angle (local zenith).

More comparisons with satellite data should, of course, be carried out in the future, both by measurements of the diurnally varying spectra (need of high resolution spectra) and by mass spectrometers on board satellites.

To bring this study to a conclusion, the effects of solar-wind precipitations could be investigated.

This study is the third of a series of predictions undertaken on Mars (Witasse et al., 2002), Titan (Lilensten et al., 2005a and 2005b) and the Earth. Together with the work performed by Fox and Victor (1981) on Venus and Brown et al. (1983) on Io, we can suggest that doubly-charged ions are a common feature of planets and satellites with thick atmospheres.

Acknowledgements. C. S. thanks M. Barthélemy and F. Culot (LPG) for fruitful discussions throughout the building of this work.

Topical Editor M. Lester thanks J. Fox and S. V. Avakyan for their help in evaluating this paper.

References

- Aguilar, A., Covington, A. M., Hinojosa, G., Phaneuf, R. A., Alvarez, I., Cisneros, C., Bozek, C. D., Dominguez, I., Sant'Anna, M. M., Schlachter, A. S., Nahar, S. N., and McLaughlin, B. M.: Absolute photoionization cross section measurements of OII ions from 29.7 to 46.2 eV, *Ap. J. S.*, 146, 467–477, 2003.
- Ahmad, M.: Dynamique et dissociation des dications N_2^{++} et NO_2^{++} préparés par double photoionisation à l'aide du rayonnement synchrotron, PhD thesis, Université Paris VI, 2002.
- Aitken, K. L. and Harrison, M. F. A.: Measurement of the cross sections for electron impact ionization of multi-electron ions: I. O^+ to O^{2+} and O^{2+} to O^{3+} , *J. Phys. B: Atom. Molec. Phys.*, 4, 1176–1188, 1971.
- Angel, G. C. and Samson, J. A. R.: Total photoionization cross sections of atomic oxygen from threshold to 44.3 Å, *Phys. Rev. A*, 58, No. 11, 5578–5585, 1988.
- Aston, F. W., *Philos. Mag.*, 40, 628–634, 1920, quoted in: Seiersen et al., Dissociative recombination of dications, *J. Chem. Phys.*, 119, No. 2, 2003.
- Avakyan, S. V.: Doubly charged ions of atomic oxygen in the disturbed ionosphere, *Cosmic Res.*, 16, No. 1, 115–119, 1978a.
- Avakyan, S. V.: Doubly charged molecular ions in the auroral ionosphere, *Geomag. Aeron.*, 18, No. 4, 444–446, 1978b.
- Avakyan, S. V.: Formation of doubly-charged ions of atomic oxygen in the upper atmosphere, *Cosmic Res.*, 17, No. 6, 942–943, 1980.
- Avakyan, S. V.: Auger processes in the optics of the upper atmosphere, *J. Opt. Technol.*, 65, No. 11, 870–875, 1998.
- Bahati, E. M., Jureta, J. J., Belic, D. S., Cherkani-Hassani, H., Abdellahi, M. O., and Defrance, P.: Electron-impact dissociation and ionization of N_2^+ , *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.*, 34, 2963–2973, 2001.
- Baluja, K. L. and Zeippen, C. J.: The photoionisation of the $O^+(^4S^0)$ ground state, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.*, 21, 2441–2454, 1988.
- Breig, E. L., Torr, M. R., and Kayser, D. C.: Observations and photochemistry of O^{++} in the daytime thermosphere, *J. Geophys. Res.*, 87, No. A9, 7653–7665, 1982.
- Breig, E. L., Torr, M. R., Torr, D. G., Hanson, W. B., Hoffman, J. H., Walker, J. C. G., and Nier, A. O.: Doubly charged atomic oxygen ions in the thermosphere 1. Photochemistry, *J. Geophys. Res.*, 82, No. 7, 1008–1012, 1977.
- Brown, R. A., Shemansky, D., and Johnson, R. E.: A deficiency of OIII in the Io plasma torus, *Ap. J.*, 264, 309–323, 1983.
- Chatterjee, B. K. and Johnsen, R.: Thermal-energy reactions of O_2^{++} ions with O_2 , N_2 , CO_2 , NO and Ne , *J. Chem. Phys.*, 91, No. 2, 1378–1379, 1989.
- Cossart, D., Launay, F., Robbe, J. M., and Gandara, G. J.: The optical spectrum of the doubly charged molecular nitrogen ion: rotational analysis of the (0–0) and (1–1) bands of the $D^1\Sigma_u^+-X^1\Sigma_g^+$ transition of N_2^{++} : comparison of observations with ab-initio calculation results, *J. Mol. Spectrosc.*, 113, 142–158, 1985.
- Cossart, D. and Launay, F.: The vacuum UV emission spectrum of the $^{15}N_2^{++}$ molecular ion, *J. Mol. Spectrosc.*, 113, 159–166, 1985.
- Cox, S. G., Critchley, A. D. J., Kreynin, P. S., McNab, I. R., Shiell, R. C., and Smith, F. E.: High resolution spectroscopy and structure of molecular dications, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 5, No. 4, 663–676, 2003.
- Ehresmann, A., Liebel, H., Schmoranzler, H., Zimmermann, B., Kammer, S., Schartner, K.-H., Demekhin, Ph. V. and Sukhorukov, V. L.: Double photoionization of N_2 into the $N_2^{++} D^1\Sigma_u^+$ state, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.*, 36, 3669–3681, 2003.
- Ehresmann, A., Machida, S., Kitajima, M., Ukai, M., Kameta, K., Kouchi, N., Hatano, Y., Shigemasa, E., and Hayaishi, T.: Dissociative single and double photoionization with excitation between 37 and 69 eV in N_2 , *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.*, 33, 473–490, 2000.
- Fang, Z. and Kwong, V. H. S.: Charge transfer between the $2p^2\ ^3P$ ground-state O^{2+} ion and He, H_2 , N_2 , and CO at electron-volt energies, *Phys. Rev. A* 51, No. 2, 1321–1326, 1995.
- Fennelly, J. A. and Torr, D. G.: Photoionization and photoabsorption cross sections of O, N_2 , O_2 and N for aeronomic calculations, *At. Dat. Nucl. Dat. Tab.*, 51, 321–363, 1992.
- Fournier, J., Fournier, P. G.: Langford, M. L., Mousselmal, M., Robbe, J. M., and Gandara, G.: An experimental and theoretical study of the doubly-charged ion O_2^{++} , *J. Chem. Phys.*, 96, No. 5, 3594–3602, 1992.
- Fox, J. L. and Victor, G. A.: O^{++} in the Venusian ionosphere, *J. Geophys. Res.*, 86, No. A4, 2438–2442, 1981.
- Franceschi, P., Thissen, R., Zabka, J., Roithova, J., Herman, Z., and Duituit, O.: Internal energy effects in the reactivity of CO_2^{++} doubly charged molecular ions with CO_2 and CO , *Int. J. Mass Spectrom.*, 228, 507–516, 2003.

- Geiss J. and Young, D. T.: Production and Transport of O^{++} in the ionosphere and plasmasphere, *J. Geophys. Res.*, 86, No. A6, 4739–4750, 1981.
- Glosik, J., Rakshit, A. B., Twiddy, N. D., Adams, N. G., and Smith, D.: Measurement of the rates of reaction of the ground and metastable excited states of O_2^+ , NO^+ and O^+ with atmospheric gases at thermal energies, *J. Phys. B: Atom. Molec. Phys.*, 11, No. 19, 3365–3379, 1978.
- Halas, S. and Adameczyk, B.: Cross sections for the production of N_2^+ , N^+ and N_2^{++} from nitrogen by electrons in the energy range 16–600 eV, *Int. J. Mass Spectrom. Ion Phys.*, 10, 157–160, 1972.
- Hall, R. I., Dawber, G., McConkey, A., MacDonald, M. A., and King, G. C.: Vibrational structure of the O_2^{++} ground state observed by threshold photoelectron coincidence spectroscopy, *Phys. Rev. Lett.*, 68, No. 18, 2751–2754, 1992.
- Hardy, D. A., Gussenhoven, M. S., Raistrick, R. and McNeil, W. J.: Statistical and functional representations of the pattern of auroral energy flux, number flux and conductivity, *J. Geophys. Res.*, 92, No. A11, 12275–12294, 1987.
- He, Z. X., Moberg, R., and Samson, J. A. R.: Threshold behaviour in single-photon double ionisation of atomic oxygen, *Phys. Rev. A: At. Mol. Opt. Phys.*, 52, No. 6, 4595–4598, 1995.
- Hedin, A. E.: MSIS-86 Thermospheric model, *J. Geophys. Res.*, 92, No. A5, 4649–4662, 1987.
- Hedin, A. E.: Extension of the MSIS thermosphere into the middle and lower thermosphere, *J. Geophys. Res.*, 96, 1159–1172, 1991.
- Hellner, L., Besnard, M. J., and Dujardin, G.: Photoionization study of quasibound states of doubly charged molecular nitrogen ions, *Chem. Phys.*, 119, 391–397, 1988.
- Heroux, L. and Hinteregger, H.E.: Aeronomical reference spectrum for solar UV below 2000 Å, *J. Geophys. Res.*, 83, No. A11, 5305–5308, 1978.
- Hoffman, J. H.: Composition measurements of the topside ionosphere, *Science*, 115, 322–324, 1967.
- Hoffman, J. H., Hanson, W. B., Lippincott, C. R., and Ferguson, E. E.: The magnetic ion-mass spectrometer on Atmosphere Explorer, *Radio Sci.*, 8, 315–322, 1973.
- Horwitz, J. L.: ISEE 1 observations of O^{++} in the magnetosphere, *J. Geophys. Res.*, 86, No. A11, 9225–9229, 1981.
- Howorka, F., Viggiano, A. A., Albritton, D. L., Ferguson, E. E., and Fehsenfeld, F. C.: Laboratory studies of O^{++} reactions of ionospheric importance: *J. Geophys. Res.*, 84, No. A10, 5941–5942, 1979.
- Itikawa, Y. and Ichimura, A.: Collisions of electrons and photons with atomic oxygen, *J. Phys. Chem. Ref. Data*, 19, No. 3, 637–651, 1990.
- Johnsen, R. and Biondi, M. A.: Measurements of the reaction rates of O^{++} ions with N_2 and O_2 at thermal energy and their ionospheric implications, *Geophys. Res. Lett.*, 5, No. 10, 847–848, 1978.
- Johnson, B. C., Smith, P. L., and Knight, R. D.: The radiative lifetime of the $^5S_2^0$ metastable level of O^{++} , *Ap. J.*, 281, 477–481, 1984.
- Kjeldsen, H., Kristensen, B., Brooks, R. L., Folkmann, F., Knudsen, H., and Andersen, T.: Absolute, state-selective measurements of the photoionization cross sections of N^+ and O^+ ions, *Astrophys. J. supplement series*, 138, 219–227, 2002.
- Krishnakumar, E. and Srivastava, S. K.: Cross sections for the production of N_2^+ , N^+ and N_2^{++} and N^{2+} by electron impact on N_2 , *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.*, 23, 1893–1903, 1990.
- Krishnakumar, E. and Srivastava, S. K.: Cross sections for electron impact ionization of O_2 , *Int. J. Mass Spectrom. Ion Proc.*, 113, 1–12, 1992.
- Lilensten, J. and Blelly, P.-L.: The TEC and F2 parameters as tracers of the ionosphere and thermosphere, *J. Atmos. Solar and Terrest. Phys.*, 64, 775–793, 2002.
- Lilensten, J., Kofman, W., Wisenberg, J., Oran, E. S. and Devore, C. R.: Ionization efficiency due to primary and secondary photoelectrons: a numerical model, *Ann. Geophys.*, 7, 83–90, 1989.
- Lilensten, J., Simon, C., Witasse, O., Dutuit, O., Thissen, R. and Alcaraz, C.: A fast computation of the diurnal ion production in the ionosphere of Titan, accepted in *Icarus*, 2005a.
- Lilensten, J., Witasse, O., Simon, C., Soldi-Lose, H., Dutuit, O., Thissen, R., and Alcaraz, C.: Prediction of a N_2^{++} layer in the upper atmosphere of Titan, *Geophys. Res. Lett.*, 32, L03203, 2005b.
- Mrázek, L., Zabka, J., Dolejšek, Z., Hrusak, J., and Herman, Z.: Dynamics of chemical and charge-transfer reactions of molecular dications: III Beam scattering and total cross section data for processes in system $CO_2^{++} + D_2$, *J. Phys. Chem. A*, 104, 7294–7303, 2000.
- Mathur D., Andersen, L. H., Hvelplund, P., Kella, D., and Safvan, C. P.: Long-lived, doubly charged diatomic and triatomic molecular ions, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.*, 28, 3415–3426, 1995.
- Meinel, A. B.: The spectrum of the airglow and the aurora, *Rep. Prog. Phys.*, 14, 121–146, 1951.
- Menzel, D. H. and Aller, L. H.: Physical Processes in gaseous nebulae. XVI. The abundance of OIII, *Ap. J.*, 94, 30–36, 1941.
- Morel, L., Witasse, O., Wamant, R., Cerisier, J.-C., Blelly, P.-L., and Lilensten, J.: Diagnostic of the dayside ionosphere of Mars using the Total Electron Content measurement by the NEIGE/Netlander experiment: an assessment study, *Planet. Space Sci.*, 52, No. 7, 603–611, 2004.
- Märk, T. D.: Cross sections for single and double ionization of N_2 and O_2 molecules by electron impact from threshold up to 170 eV, *J. Chem. Phys.*, 63, No. 9, 3731–3736, 1975.
- Nakada, M. P. and Singer, S. F.: Thermal diffusion and multiply-charged atoms in the magnetosphere, *Geophys. J. Roy. astr. Soc.*, 15, 163–181, 1968.
- Nicolas, C., Alcaraz, C., Thissen, R., Zabka, J., and Dutuit, O.: Effects of ion excitation on ion-molecule reactions of the Mars, Venus, and Earth ionospheres, *Planet. Space Sci.*, 50, 877–887, 2002.
- Olsson, B. J., Kindvall, G., and Larsson, M.: Experimental and theoretical studies of the radiative properties of the $N_2^{++} D^1\Sigma_u^+$ state, *J. Chem. Phys.*, 88, No. 12, 7501–7507, 1988.
- Prasad, S. S. and Furman, D. R.: On the importance of doubly-charged ions in the auroral ionosphere, *J. Geophys. Res.*, 80, 1360–1362, 1975.
- Seiersen, K., Heber, O., Jensen, M. J., Safvan, C. P. and Andersen, L. H.: Dissociative recombination of dications, *J. Chem. Phys.*, 119, No. 2, 2003.
- Smith, D. and Adams, N. G.: Elementary plasma reactions of environmental interest, *Topics Curr. Chem.*, 89, 1–43, 1980.
- Straub, H. C., Renault, P., Lindsay, B. G., Smith, K. A., and Stebbings, R. F.: Absolute partial cross sections for electron-impact ionisation of H_2 , N_2 and O_2 from threshold to 1000 eV, *Phys. Rev. A*, 54, No. 3, 2146–2152, 1996.
- Swartz, W. E. and Nisbet, J. S.: Revised calculations of the F region ambient electron heating by photoelectrons, *J. Geophys. Res.*, 77, 6259–6261, 1972.
- Taylor, P. R. and Partridge, H.: Theoretical determination of the ground state of N_2^{++} , *J. Phys. Chem.*, 91, No. 24, 6148–6151, 1987.

- Thomson, J. J.: Rays of positive electricity and their application to chemical analysis, 2nd ed., Longmans Green and Co., London, 1921.
- Tobiska, W. K.: Revised solar extreme ultraviolet flux model, *J. Atmos. Terrest. Phys.*, 53, No. 11/12, 1005–1018, 1991.
- Victor, G. A and Constantinides, E. R.: Double photoionization and doubly charged ions in the thermosphere, *Geophys. Res. Lett.*, 6, No. 6, 519–522, 1979.
- Walker, J. C. G.: The density of O^{2+} ions in the topside ionosphere, *Planet. Space Sci.*, 18, 559–564, 1970.
- Witasse, O.: Modélisation des ionosphères planétaires et de leur rayonnement : la Terre et Mars, PhD thesis, UJF/CNRS, Université Grenoble I, 2000.
- Witasse, O., Dutuit, O., Liliensten, J., Thissen, R., Zabka, J., Alcaraz, C., Blelly, P.-L., Bougher, S. W., Engel, S., Andersen, L. H., and Seiersen, K.: Prediction of a CO_2^{++} layer in the atmosphere of Mars, *Geophys. Res. Lett.*, 29, No. 8, 104-1, 2002.
- Witasse, O., Dutuit, O., Liliensten, J., Thissen, R., Zabka, J., Alcaraz, C., Blelly, P.-L., Bougher, S. W., Engel, S., Andersen, L. H., and Seiersen, K.: Correction to “Prediction of a CO_2^{++} layer in the atmosphere of Mars”, *Geophys. Res. Lett.*, 30, No. 7, 12–1, 2003.
- Yamada, I., Danjo, A., Hirayama, T., Matsumoto, A., Ohtani, S., Suzuki, H., Tawara, H., Takayanagi, T., Wakiya, K., and Yoshino, M.: Electron impact ionization of O^+ , S^+ and S^{2+} ions, *J. Phys. Soc. Jpn.*, 57, No. 8, 2699–2704, 1988.
- Young, D. T., Geiss, J., Balsiger, H., Eberhardt, P., Ghielmetti, A., and Rosenbauer, H.: Discovery of He^{2+} and O^{2+} ions of terrestrial origin in the outer magnetosphere *Geophys. Res. Lett.*, 4, No. 12, 561–564, 1977.
- Ziegler, D. L., Newman, J. H., Smith, K. A., and Stebbings, R. F.: Double ionisation of atomic oxygen by electron impact, *Planet. Space Sci.*, 30, No. 5, 451-456, 1982.
- Zipf, E. C.: The ionisation of atomic oxygen by electron impact, *Planet. Space Sci.*, 33, No. 11, 1303–1307, 1985.

Paper 2

Prediction of a N_2^{++} layer in the upper atmosphere of Titan

Lilensten, J., O. Witasse, C. Simon, H. Soldi-Lose, O. Dutuit, R. Thissen and C. Alcaraz, *Geophysical Research Letters*, **32**, L03203, doi:10.1029/2004GL021432, 2005.

Prediction of a N_2^{++} layer in the upper atmosphere of Titan

J. Lilensten,¹ O. Witasse,² C. Simon,¹ H. Soldi-Lose,³ O. Dutuit,³ R. Thissen,³ and C. Alcaraz⁴

Received 7 September 2004; revised 5 November 2004; accepted 14 December 2004; published 12 February 2005.

[1] Calculations of dication N_2^{++} density in the atmosphere of Titan is performed for the first time. The metastable lifetime of this species is 3 seconds in its ground state. The density of the N_2^{++} layer centred around 1100–1200 km altitude can reach 10^4 m^{-3} . The ions are produced by both the double photoionisation and the photoelectron impact of N_2 . They are lost by dissociative recombination with the thermal electrons and chemical reactions with N_2 and CH_4 . The most recent chemical reaction rate constants, given by laboratory experiments, were used in this study. Finally, we explore the possible detection of this ion layer by a spectrophotometer and show that the UVIS instrument onboard CASSINI could be capable to observe it.
Citation: Lilensten, J., O. Witasse, C. Simon, H. Soldi-Lose, O. Dutuit, R. Thissen, and C. Alcaraz (2005), Prediction of a N_2^{++} layer in the upper atmosphere of Titan, *Geophys. Res. Lett.*, *32*, L03203, doi:10.1029/2004GL021432.

1. Introduction

[2] Studying planetary ionospheres is amongst the major scientific goals of all planetary missions. The Cassini-Huygens mission payload includes several instruments which will give us new insights into the ionosphere of Titan. Within the scope of this work three instruments are of particular interest: The Ion and Neutral Mass Spectrometer (INMS) will analyze ion and neutral particles. The Radio and Plasma Wave Science (RPWS) instrument will provide information on the electric and magnetic wave fields and determine the electron density and temperature. The Ultraviolet Imaging Spectrograph (UVIS) will measure ultraviolet energy from the atmosphere to study its composition.

[3] The modelling the ionosphere requires a set of complex equations based on magnetohydrodynamics. Of the different plasma parameters those of interest in this study are the plasma densities. These are function of production and loss mechanisms as well as dynamics. Production can be of chemical or physical origin. In the latter case we consider two sources: photoabsorption (called primary photo-production) and electron impact (called secondary production). The primary production is easy to solve, because for the satellites and the telluric planets, the

atmospheres are optically thin, allowing the Beer-Lambert law to be solved. The secondary production requires a kinetic transport equation described in detail by *Lilensten and Blelly* [2002]. Such an approach has been developed for Titan by *Galand et al.* [1999]. In work by *Witasse et al.* [2002], this approach was adapted to Mars and allowed the authors to predict the existence of a CO_2^{++} layer. Recent information on the modelling of the Titan ionosphere may be found in work by *Wilson and Atreya* [2004], *Cravens et al.* [2004], and *Fox and Yelle* [1997].

[4] This paper aims at presenting the calculation of the stable doubly-charged N_2^{++} ion density. Up to now the existence of stable molecular dications in Titan's ionosphere had never been considered, as it was generally assumed that they were negligible or unstable. However, laboratory measurements show that dication production by Vacuum Ultraviolet photons or electron impact can represent up to 10 or 15% of the total ionisation processes. Moreover, molecular dications have been shown to possess very stable electronic states. In the case of N_2 , which is a major neutral component of Titan's atmosphere, the ground state lifetime of N_2^{++} was measured to be 3 seconds for the principal component of the decay function [*Mathur et al.*, 1995]. As a consequence, these cations, when produced, can be involved in collisions with electrons and neutral molecules and can play a part in the overall chemistry of the ionosphere. Very little is known about the chemical processes involving these dications, so that laboratory work has been performed to measure electron recombination and chemical reaction rates. The expected detectability of N_2^{++} ions in Titan's atmosphere offers a unique opportunity to compare modelling work and observations. No other significant stable molecular doubly-charged ions are expected to be produced in Titan's ionosphere. Double ionisation of CH_4 probably yields only unstable doubly-charged ions which quickly dissociate into singly-charged fragmented ion pairs [*Rabrenovic et al.*, 1983].

[5] In the first part, we describe the photochemical model. Then, N_2^{++} density profiles are presented and compared to Titan's other ions. The sensitivity to different parameters is then analyzed. The potential detection of this dication layer is considered in the last section.

2. Modelling N_2^{++} Density

[6] The ground state of N_2^{++} , noted $X^1\Sigma_g^+$, is 43.00 eV above the ground neutral state. So far, 9 excited electronic states have been identified, such as $a^3\Pi_u$ and $b^3\Sigma_g^-$ situated at 0.57 and 1.48 eV respectively above N_2^{++} 's ground state [*Taylor and Partridge*, 1987]. The lifetimes of all other electronic excited states are less than 50 microseconds [*Ahmad*, 2002]. As a result they are unstable under ionospheric conditions. Only the ground state has a lifetime long

¹Laboratoire de Planétologie de Grenoble, CNRS, Université Joseph Fourier, Grenoble, France.

²European Space Research and Technology Center, Research and Scientific Support Department of European Space Agency, Noordwijk, Netherlands.

³Laboratoire de Chimie Physique, Centre Universitaire Paris Sud, Orsay, France.

⁴Laboratoire pour l'Utilisation du Rayonnement Electromagnétique (LURE), Centre Universitaire Paris Sud, Orsay, France.

enough to allow collisions with electrons or the neutral gas ($\tau = 3$ seconds) as stated by *Mathur et al.* [1995]. Therefore, here we only model the density of the ground state with the longest lifetime.

2.1. Photochemistry

[7] In our model, we assume that N_2^{++} ions are produced by photoionisation and photoelectron impact ionisation of molecular nitrogen. They are predominantly lost by chemical reaction with N_2 , CH_4 and by dissociative recombination with thermal electrons. Collisions with other neutral components are not considered here as their density is much lower than N_2 and CH_4 's. Their collision rates are not expected to exceed that of N_2 and CH_4 , which is already close to the maximum collision rate value (Langevin rate). Moreover, penetrating electrons from the solar wind are not considered here: the computation is performed for a diurnal atmosphere and only deals with the total production due to EUV inputs. Assuming photochemical equilibrium at these altitudes, the doubly charged ion concentration expression is given by

$$N_{N_2^{++}} = \frac{P_{N_2}^{photo} + P_{N_2}^{impact}}{Ne k_{DR} + N_{N_2} k_{N_2} + N_{CH_4} k_{CH_4} + \frac{1}{\tau}} \quad (1)$$

with the notations:

- $P_{N_2}^{photo}$: ion production by photoionisation.
- $P_{N_2}^{impact}$: ion production by electron impact.
- Ne : thermal electron density.
- N_{N_2} : nitrogen density.
- N_{CH_4} : methane density.
- k_{DR} : dissociative recombination rate.
- k_{N_2} : chemical reaction rate constant with N_2 .
- k_{CH_4} : chemical reaction rate constant with CH_4 .
- τ : lifetime of the ion state = 3 s [*Mathur et al.*, 1995].

[8] The chemical reaction rate constants k_{N_2} , k_{CH_4} and k_{DR} are defined below.

2.2. Laboratory Measurements

[9] Laboratory experiments have been performed in order to measure the reaction rate of N_2^{++} ions. Chemical reactions of dications represent the opening of a new and exciting class of mechanism [*Mrázek et al.*, 2000, and references therein]. The experimental procedure is described by *Nicolas et al.* [2002]. Very briefly, molecular dications are produced by electron impact and introduced in an octopole ion guide where the reaction takes place with the neutral target gas (N_2 or CH_4). The reaction rate constants (in $cm^3 s^{-1}$) for the reaction of N_2^{++} with N_2 and with CH_4 have been measured to be:

$$k_{N_2} = 2.7 \times 10^{-9} \pm 25\% \quad (2)$$

$$k_{CH_4} = 1.8 \times 10^{-9} \pm 25\% \quad (3)$$

[10] The dissociative recombination of N_2^{++} with electrons has also recently been studied by *Seiersen et al.* [2003], using the heavy-ion storage ring ASTRID. Low-energy electrons are scattered on N_2^{++} which yields an absolute cross-section, from which a recombination rate constant is

deduced. The experiment is described in detail by *Seiersen et al.* [2003]. The total recombination rate is (in $cm^3 s^{-1}$),

$$k_{DR} = 5.8 \times 10^{-7} \sqrt{\frac{300}{T_e}} \pm 25\% \quad (4)$$

with T_e being the electron temperature.

2.3. Ion Production

[11] The computation of ion production is fully described by *Galand et al.* [1999]. It consists of primary production through photoabsorption and secondary production through electron impacts. The neutral atmosphere is described by *Muller-Wodarg et al.* [2000]. The exospheric temperature is 175 K. The altitude range covered by our computation is 600 km to 1600 km. The photon absorption cross sections come from *Torr and Torr* [1985] and *Fennelly and Torr* [1992] for N_2 and from *Samson et al.* [1989] for CH_4 . For the double ionisation of nitrogen, and as photoionisation cross-sections have not yet been measured nor calculated, we put forward a ratio of:

$$\frac{\sigma_e(N_2^{++})}{\sigma_e(N_2)} = \frac{\sigma_{h\nu}(N_2^{++})}{\sigma_{h\nu}(N_2)} \quad (5)$$

to yield $\sigma_{h\nu}(N_2^{++})$ where $\sigma_{h\nu}$ represents the photoabsorption cross section and σ_e is the electron impact cross section. The set of electron impact cross sections for N_2 is detailed by *Lummerzheim and Lilensten* [1994]. It comes from *Davies et al.* [1989] for CH_4 (with 6 excitation states) and *Märk* [1975] for the double ionisation of the nitrogen molecule. The computation is performed for a diurnal atmosphere and only concerns the total production due to EUV inputs. Most of the current EUV models rely only on a few data sets obtained by the Dynamics Explorer missions [*Hinteregger et al.*, 1973]. A first representation of Solar EUV fluxes for aeronomic applications was given by *Hinteregger* [1981] and *Hinteregger and Katsura* [1981]. A first reference flux SC#21REF was assembled from measurements performed in July 1976 ($f_{10.7} = 70$), and given in 1659 wavelengths. An extrapolation model (SERF 1) allows the flux during other periods of solar activity to be estimated. *Torr and Torr* [1979, 1985] proposed two reference fluxes for aeronomy called F79050N ($f_{10.7} = 243$) and SC#REFW ($f_{10.7} = 68$). We estimate the flux at other activity levels by interpolating. Since then, several authors have developed their codes in order to take better advantage of the AE data base. Amongst them, two must be emphasized. *Tobiska* [1993] and *Tobiska and Eparvier* [1998] developed a model which takes data from other sources into account (SME, OSO, AEROS; rockets and ground-based facilities) as well as the solar emission zone of each line, through a specific parameter. They propose a formula to retrieve a solar flux from the gift of the decimetric index and its average. The second improved model is EUVAC [*Richards et al.*, 1994]. Its main difference with previous models is the reference flux chosen, and the interpolation formula. The coronal flux is also constrained to be at most 80% of the total. We tested all the solar flux models. They give very little differences on the productions and actually none on the N_2^{++} density results. In this paper, we use the Torr and Torr model where the solar EUV flux is interpolated in terms of the decimetric index from measurements taken from the Atmosphere

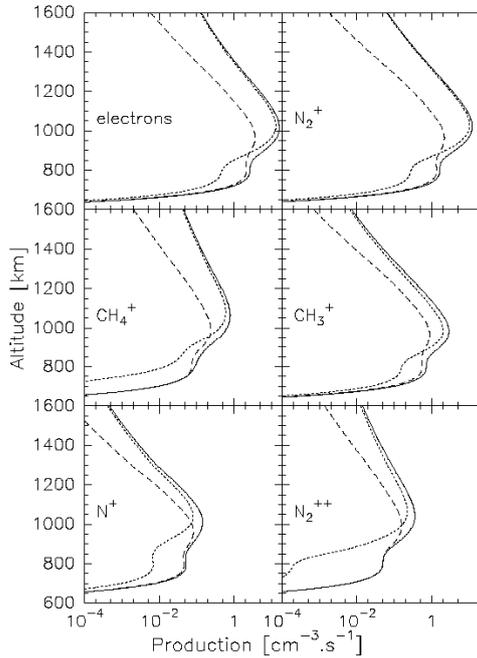


Figure 1. Total ion productions (full lines), primary photo-productions (dotted lines) and secondary electron impact productions (dashed lines).

Explorer satellites during solar minimum and solar maximum conditions [Hinteregger, 1981; Hinteregger *et al.*, 1981]. The values used are those parameterized and modified by Torr and Torr [1985] into 37 energy values from 248 eV down to 12.02 eV. Following Tobiska [1993], two values have been added at 2.327 nm and 3.750 nm to take into account the ionisation due to high-energy photons. The $f_{10.7}$ value is 150. It stands for a mean solar activity and allows for comparisons with the previous work by Galand *et al.* [1999]. However, it is probably an upper value of what may be expected during Cassini–Huygens’ lifetime.

[12] The model results are shown in Figure 1 for a solar zenith angle of 45° . This angle has been chosen to represent a planetary average [Lebennois and Toubanc, 1999]. The behaviour is somewhat classical, with the secondary production dominating over the primary production mechanism below typically 850 to 950 km. The CH_4^+ and CH_3^+ cases are special in that the primary electron production is very small compared to the secondary production. However, the overall total is small, of the order of 0.05 ion per cubic centimetre.

3. Density Results

[13] The modelled N_2^{++} densities are presented in Figure 2. As a first guess, we have set the electron temperature to the neutral temperature. Then, N_2^{++} density reaches values of $\pm 1 \times 10^4 \text{ m}^{-3}$ at about 1100 km. This represents only $\pm 1 \times 10^{-4}$ of the total ion density [Galand *et al.*, 1999]. However, when compared to minor ion densities, this dication is not the least abundant. Ions such as CH^+ , C_2H^+ , $C_2H_6^+$, or CN^+ have smaller densities. Let us note that N_2^{++} reactions with neutrals often lead to the formation of pairs of singly-charged ions with large translational energy [Mrázek *et al.*,

2000]. This can have several implications: the modification of the chemical reaction rates of N^+ and N_2^+ ions produced by these reactions due to collision energy, and the possible escape of some ions towards the exosphere. We evaluated in a first run the effect of different physical parameters and set the reaction rate constant of the reaction $N_2^{++} + CH_4$ to zero. In a second run, we set the electron temperature to twice the neutral temperature since this parameter is unknown. These two approaches result in a very small increase (less than 10%) of the N_2^{++} density above 1300 km. When we set the lifetime of the ion state to be infinite, i.e., no spontaneous dissociation ($\tau^{-1} = 0$), the effect is more important leading to an increase of about 60% at around 1300 km. However, the effect on the peak density is in any case very small. Below the altitude of this maximum, there are no effects at all, as the reaction with molecular nitrogen is the most important process. Finally, we computed the N_2^{++} density for reduced solar activity (decimetric index of 100), close to what is expected during the Cassini–Huygens operating phase. This is also shown in Figure 2. It results in the peak density decreasing by a factor of around one third, from $8.8 \times 10^{-3} \text{ cm}^{-3}$ down to $5.6 \times 10^{-3} \text{ cm}^{-3}$.

4. Detectability of Doubly-Charged Ions

[14] The Cassini–Huygens mission will provide new insights into Titan’s ionosphere in 2004–2008. The question remains: is it possible to detect N_2^{++} ? The ion mass spectrometer technique cannot be used here. As a matter of fact, this method allows the ion selection by their mass-to-charge (m/q) ratio. For N_2^{++} this number is equal to that of N^+ : this overlapping makes it impossible to discriminate between the two ions while the contribution of N_2^{++} compared to N^+ remains tiny.

[15] Fluorescence is generally a scarce phenomenon for dications but was at least observed for N_2^{++} [Cossart *et al.*, 1985; Olsson *et al.*, 1988; Ahmad, 2002; Ehresmann *et al.*, 2000, 2003]. The excited state of specific interest to us is

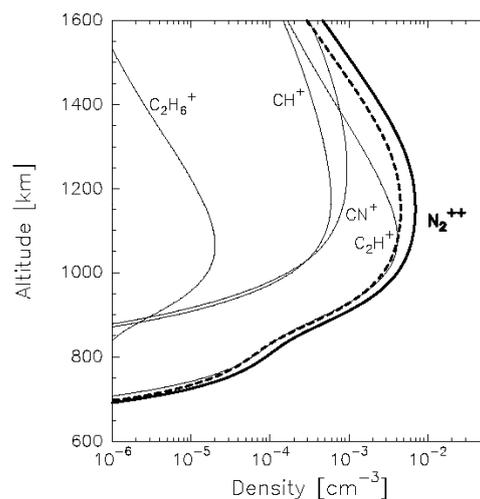


Figure 2. Ion densities. The two bold lines are the N_2^{++} densities (full line: $f_{10.7} = 150$; dashed line: $f_{10.7} = 100$). Thin lines represent some minor ions [from Galand *et al.*, 1999].

$D^1\Sigma_u^+$, 7.8 eV above the ground state [Ahmad, 2002; Olsson et al., 1988]. Two bands corresponding to the $D^1\Sigma_u^+ - X^1\Sigma_g^+$ (0, 0) and (1, 1) transitions have already been observed experimentally in the 158.7–159.4 nm range [Cossart et al., 1985; Olsson et al., 1988]. Using the results of Ehresmann et al. [2003], a rough approximation leads us to suppose that nearly 10% of the total of N_2^{++} ions created by double photoionisation at the cross-section peak near 65 eV are produced in the $D^1\Sigma_u^+$ state. From a simple altitude integration we would expect a mere 0.2 Rayleigh produced in the fluorescence state in quiet conditions, and 0.27 Rayleigh in mean solar conditions. Onboard Cassini, the UVIS instrument makes observations in the UV–EUV windows. At around 160 nm, the detection limit for a one-hour observation time is about 0.08 Rayleigh [Esposito et al., 2005]. Therefore, we expect that our prediction could be confirmed by observations.

5. Conclusions

[16] For the first time, the presence of N_2^{++} doubly charged ions is modelled in the atmosphere of Titan. Their density has been calculated by using a kinetic code for the production rates and a simple chemical scheme for the chemical losses. The chemical reaction rate constants have been measured in recent laboratory experiments. These ions are produced in the dayside through the ionisation of nitrogen. They are essentially lost by dissociative recombination with thermal electrons and by chemical reactions with N_2 and CH_4 . Consequently, a layer is created with a peak density of $\pm 1 \times 10^4 \text{ m}^{-3}$ around 1100 km. With 10% of these ions created in the excited fluorescence state $D^1\Sigma_u^+$, this layer could well be detected in the near future by the UVIS instrument onboard Cassini.

[17] **Acknowledgments.** The authors wish to thank Henning Boettger for reading carefully the manuscript. JL thanks P. O. Amblard and J. Abouardham for good laughs and non-scientific discussions.

References

Ahmad, M. (2002), Dynamique et dissociation des dications N_2^{++} : Photoionisation à l'aide du rayonnement synchrotron, Ph.D. thesis, Univ. Paris VI, Paris.

Cossart, D., F. Launay, J.-M. Robbe, and G. J. Gandara (1985), The optical spectrum of the doubly-charged molecular nitrogen ion: Rotational analysis of the (0-0) and (1-1) bands of the $D^1\Sigma_u^+ - X^1\Sigma_g^+$ transition of N_2^{++} , *J. Mol. Spectrosc.*, *113*(1), 142–158.

Cravens, T. E., J. Vann, J. Clark, J. Yu, C. N. Keller, and C. Brull (2004), The ionosphere of Titan: An updated theoretical model, *Adv. Space Res.*, *33*, 212–215.

Davies, D. K., L. E. Kline, and W. E. Bies (1989), Measurements of swarm parameters and derived electron collision cross sections in methane, *J. Appl. Phys.*, *65*, 3311–3323.

Ehresmann, A., S. Machida, M. Kitajima, M. Ukai, K. Kameta, N. Kouchi, Y. Hatano, E. Shigemasa, and T. Hayaishi (2000), Dissociative single and double photoionisation with excitation between 37 and 69 eV in N_2 , *J. Phys. B At. Mol. Opt. Phys.*, *33*, 473–490.

Ehresmann, A., H. Liebel, H. Schmoranzler, B. Zimmermann, S. Kammer, K.-H. Scharner, P. V. Demekhin, and V. L. Sukhorikov (2003), Double photoionisation of N_2 into the $N_2^{++} D^1\Sigma_u^+$ -state, *J. Phys. B At. Mol. Opt. Phys.*, *36*, 3669–3681.

Esposito, L. W., and the UVIS Team (2005), The Cassini ultraviolet imaging spectrograph investigation, *Space Sci. Rev.*, in press.

Fennelly, J. A., and D. G. Torr (1992), Photoionisation and photoabsorption cross sections of O, N₂, O₂, and N for aeronomic calculations, *At. Data Nucl. Data Tables*, *51*, 321–363.

Fox, J. L., and R. V. Yelle (1997), Hydrocarbon ions in the ionosphere of Titan, *Geophys. Res. Lett.*, *24*, 2179–2182.

Galand, M., J. Liliensten, D. Toublanc, and M. Sylvestre (1999), The ionosphere of Titan: Ideal diurnal and nocturnal cases, *Icarus*, *140*, 92–105.

Hinteregger, H. E. (1981), Representation of solar EUV fluxes for aeronomic applications, *Adv. Space Res.*, *1*, 39–52.

Hinteregger, H. E., and F. Katsura (1981), Observational, reference and model data on solar EUV, from measurements on AE-E, *Geophys. Res. Lett.*, *8*, 1147–1150.

Hinteregger, H. E., D. E. Bedo, and J. E. Manson (1973), The EUV spectrophotometer on Atmosphere Explorer, *Radio Sci.*, *8*, 349–354.

Hinteregger, H. E., K. Fukui, and B. R. Gilson (1981), Observational, reference and model data on solar EUV, from measurements on AE-E, *Geophys. Res. Lett.*, *8*, 1147–1150.

Lebennois, S., and D. Toublanc (1999), Actinic fluxes in Titan's atmosphere, from one to three dimensions: Application to high-latitude composition, *J. Geophys. Res.*, *104*, 22,025–22,034.

Liliensten, J., and P.-L. Blelly (2002), The TEC and F₂ parameters as tracers of the ionosphere and thermosphere, *J. Atmos. Sol. Terr. Phys.*, *64*, 775–793.

Lammerzhelm, D., and J. Liliensten (1994), Electron transport and energy degradation in the ionosphere: Evaluation of the numerical solution, comparison with laboratory experiments and auroral observations, *Ann. Geophys.*, *12*, 1039–1051.

Märk, T. D. (1975), Cross sections for single and double ionisation of N_2 and O_2 molecules by electron impact from threshold up to 170 eV, *J. Chem. Phys.*, *63*, 3731–3736.

Mathur, D., L. H. Andersen, P. Hvelplund, D. Kella, and C. P. Safvan (1995), Long-lived, doubly charged diatomic and triatomic molecular ions, *J. Phys. B At. Mol. Opt. Phys.*, *28*, 3415–3426.

Mrázek, L., J. Zabka, Z. Dolejšek, J. Hrusak, and Z. Herman (2000), Dynamics of chemical and charge-transfer reactions of molecular dications: III beam scattering and total cross section data for processes in system $CO_2^{++} + D_2$, *J. Phys. Chem. A*, *104*, 7294–7303.

Muller-Wodarg, I. C. F., R. V. Yelle, M. Mendillo, L. A. Young, and A. D. Aylward (2000), The thermosphere of Titan simulated by a global three-dimensional time-dependent model, *J. Geophys. Res.*, *105*, 20,833–20,856.

Nicolas, C., C. Alcaraz, R. Thissen, J. Zabka, and O. Dutuit (2002), Effects of ion excitation on ion-molecule reactions of the Mars, Venus, and Earth ionospheres, *Planet. Space Sci.*, *50*, 877–887.

Olsson, B. J., G. Kindvall, and M. Larsson (1988), Experimental and theoretical studies of the radiative properties of the $N_2^{++} D^1\Sigma_u^+$ state, *J. Chem. Phys.*, *88*, 7501–7507.

Rabrenovic, C., A. G. Brenton, and J. H. Beynon (1983), Metastable doubly-charged ions of methane studied by means of a triple-sector mass spectrometer, *Int. J. Mass Spectrom. Ion Phys.*, *52*, 175–182.

Richards, P. G., J. A. Fennelly, and D. J. Torr (1994), EUVAC: A solar EUV flux model for aeronomic calculation, *J. Geophys. Res.*, *99*, 8981–8992.

Samson, J. A. R., G. N. Haddad, T. Masuoka, P. N. Pareek, and D. A. L. Kilcoyne (1989), Ionization yields, total absorption, and dissociative photoionization cross sections of CH_4 from 110–950 Å, *J. Chem. Phys.*, *90*, 6925–6932.

Seiersen, K., O. Heber, M. J. Jensen, C. P. Safvan, and L. H. Andersen (2003), Dissociative recombination of dications, *J. Chem. Phys.*, *119*, 839–843.

Taylor, P. R., and H. Partridge (1987), Theoretical determination of the ground state of N_2^{++} , *J. Phys. Chem.*, *91*, 6148–6151.

Tobiska, W. K. (1993), Recent solar extreme ultraviolet irradiance observations and modelling: A review, *J. Geophys. Res.*, *98*, 18,879–18,893.

Tobiska, W. K., and F. G. Eparvier (1998), EUV 97: Improvements to EUV irradiance modeling in the soft X-ray and FUV, *Sol. Phys.*, *177*, 147–159.

Torr, M. R., and D. J. Torr (1979), Ionization frequencies for major thermospheric constituents as a function of solar cycle 21, *Geophys. Res. Lett.*, *6*, 771–774.

Torr, M. R., and D. J. Torr (1985), Ionisation frequencies for solar cycle 21: Revised, *J. Geophys. Res.*, *90*, 6675–6678.

Wilson, E. H., and S. K. Atreya (2004), Current state of modeling the photochemistry of Titan's mutually dependent atmosphere and ionosphere, *J. Geophys. Res.*, *109*, E06002, doi:10.1029/2003JE002181.

Witasse, O., et al. (2002), Prediction of a CO_2^{++} layer in the atmosphere of Mars, *Geophys. Res. Lett.*, *29*(8), 1263, doi:10.1029/2002GL014781.

C. Alcaraz, LURE, Bât. 209D, Centre Universitaire Paris Sud, B.P. 34, F-91898 Orsay cedex, France.

O. Dutuit, H. Soldi-Lose, and R. Thissen, LCP, Bât. 350, Centre Universitaire Paris Sud, F-91405 Orsay cedex, France.

J. Liliensten and C. Simon, Laboratoire de Planétologie de Grenoble, CNRS, Université Joseph Fourier, Bât. D de physique, B.P. 53, F-38041 Grenoble cedex 9, France. (jean.liliensten@obs.ujf-grenoble.fr)

O. Witasse, ESTEC, SCI-PB, ESA, P.O. Box 299, NL-2200 AG, Noordwijk, Netherlands.

Paper 3

A fast computation of the diurnal secondary ion production in the ionosphere of Titan

Lilensten, J., C. Simon, O. Witasse, O. Dutuit, R. Thissen and C. Alcaraz, *Icarus*, 174, 285-288, 2005.



Available online at www.sciencedirect.com



Icarus 174 (2005) 285–288

ICARUS

www.elsevier.com/locate/icarus

Note

A fast computation of the diurnal secondary ion production in the ionosphere of Titan

Jean Lilensten^{a,*}, Cyril Simon^a, Olivier Witasse^b, Odile Dutuit^c, Roland Thissen^c, Christian Alcaraz^d

^a *Laboratoire de Planetologie de Grenoble, Batiment D de physique, BP 53, 38041 Grenoble Cedex 9, France*

^b *ESTEC, Solar System Division, Keplerlaan 1, NL-2201 AZ, Noordwijk, The Netherlands*

^c *Laboratoire de Chimie Physique, Bât. 350 Centre Universitaire Paris-Sud, 91405 Orsay Cedex, France*

^d *LURE-Bat. 209D, Centre Universitaire Paris-Sud, BP 34, 91898 Orsay Cedex, France*

Received 22 June 2004; revised 13 December 2004

Abstract

We propose an analytic model that allows rapid computation of the secondary ion production due to electron impact from the primary photo-production in the ionosphere of Titan. The model parameters are given for each of the 5 major ion productions (N_2^+ , CH_4^+ , N^+ , CH_3^+ , N_2^{++}) as well as for the electron production.

© 2004 Elsevier Inc. All rights reserved.

Keywords: Titan; Ionospheres; Solar radiation

1. The problem to solve

The study of planetary ionospheres is amongst the major scientific objectives of all planetary missions. In the Cassini–Huygens mission, several instruments will give us new hints on Saturn and its satellite's ionospheres. In the scope of this work, we should emphasize 2 instruments in particular: The Ion and Neutral Mass Spectrometer (INMS <http://saturn.jpl.nasa.gov/spacecraft/inst-cassini-inms-details.cfm>) analyses ion and neutral particles near Titan and Saturn. The Radio and Plasma Wave Science instrument (RPWS <http://www-pw.physics.uiowa.edu/plasma-wave/cassini/home.html>) aims at measuring the radio signals coming from Saturn, including the radio waves given off by the interaction of the solar wind with Saturn and Titan. RPWS will provide information on the electric and magnetic wave fields and determine the electron density and temperature near Titan and in some regions of Saturn's magnetosphere.

The modeling of ionospheric data requires the use of a very wide physical approach based on MHD equations including fluid and kinetic mechanics, as well as Maxwell laws. The ion and electron densities are the basic parameters that describe the ionosphere. These densities depend on productions, losses and dynamics. Productions may be of chemical or of physical origin. In the latter case, there are two sources: through photo-absorption (called primary photo-production) and through electron impact (called sec-

ondary production). The production through photo-ionization is quite easy to solve, because in the satellites or in the telluric planets, atmospheres are optically thin for the solar radiation, so that a Beer–Lambert law may be used. The production through electron impact is a more serious problem. It requires solving a kinetic transport equation, which is cumbersome and difficult to include in the global ion–neutral chemical codes.

The use of production efficiency may overcome this difficulty. The efficiency is defined as the ratio between the secondary and the primary productions (Richard and Torr, 1988; Lilensten et al., 1989). In a first case study of the ionosphere of Titan (Galand et al., 1999), the authors proposed such a ratio for the electron production only. However, this ratio was not parametrized and, moreover, it is only useable to compute the electron production and not the different ion productions. In the very near future, it will become necessary to access the separate ion productions. This is why we analytically model the production efficiency for the electrons as well as for the following ions: N_2^+ , CH_4^+ , N^+ , CH_3^+ , N_2^{++} . These ions are those directly produced by photo-ionization and electron impact. Of course, much more ions are created in the ionosphere through chemical reactions. These results may be used by the scientists who built Titan's atmosphere and ionosphere models.

2. Production computation

The production computation is fully described in Galand et al. (1999) and will not be repeated here. It consists of the computation of the primary

* Corresponding author.

E-mail address: jean.lilensten@obs.ujf-grenoble.fr (J. Lilensten).

production through photo-absorption and the computation of the secondary production through primary electron impacts. The main inputs are the neutral atmosphere, the cross sections and the solar EUV flux. Another source of ion production exists through the precipitation of energetic particles along the Saturn magnetic field. This source is not taken into account here. The present study may help in the future to discriminate this electron precipitation induced production from the production due to the photo-absorption.

Much effort has been recently devoted to improving the neutral atmosphere models of Titan. Müller-Wodarg et al. (2000) developed for that purpose a 3D time-dependent thermospheric model which is used here for the description of the neutral atmosphere (Yelle model in Yelle, 1991). The exospheric temperature is 175 K. We performed our computations from 600 to 1600 km. More recently, Vervack et al. (2004) reanalyzed the Voyager 1 UVS solar occultation data. They find Nitrogen densities that are 25–60% higher than previous analysis, methane densities that are smaller by a factor of 3 to 7 and C₂H₂ densities that are roughly two orders of magnitude smaller. Their value of the thermospheric temperature is approximately 20 K colder.

The photon-absorption cross sections come from Torr and Torr (1985) and Fennelly and Torr (1992) for N₂, and from Samson et al. (1989) for CH₄. The set of electron impact cross sections for N₂ is detailed in Lummerzheim and Liliensten (1994). It comes from Davies et al. (1989) for CH₄ (with 6 excitation states) and Märk (1975) for the double ionization of nitrogen (here $\sigma_e(N_2^{2+})$).

The computation is performed for a diurnal atmosphere and only deals with the total production due to EUV (Extreme Ultra Violet) inputs. Most of the current EUV models rely on few experiments taken onboard the Atmosphere Explorer missions (Hinteregger et al., 1973). A first representation of Solar EUV fluxes for aeronautical applications was given by Hinteregger (1981) and Hinteregger and Katsura (1981). A first reference flux SC#21REF was assembled from measurements performed in July 1976 ($F_{10.7} = 70$), and given in 1659 wavelengths. An extrapolation model (SERF 1) allows estimating the flux during other periods of solar activity.

Torr and Torr (1979, 1985) proposed two reference fluxes for aeronomy called F79050N ($F_{10.7} = 243$) and SC#REFW ($F_{10.7} = 68$). A simple interpolation is one way to estimate a flux at other activity levels.

Since then, several authors developed their codes in order to take better advantage of the Atmosphere Explorer measurements. Amongst them, two must be emphasized. Tobiska (Tobiska, 1991; Tobiska and Eparvier, 1998) developed a model which takes data from other sources into account (SME, OSO; AEROS; rockets and ground-based facilities) as well as the solar emission zone of each line, through a specific parameter. He proposes a formula to retrieve a solar flux from the gift of the decimetric index and its average.

The second improved model is EUVAC (Richards et al., 1994). Its main difference with previous models is the reference flux chosen and the interpolation formula. The coronal flux is also constrained to be at most 80% of the total. In our calculations, we tested all the solar flux models. They give very little differences on the productions, and no significant variations on the efficiency itself. This is due to the fact that the efficiency is a production ratio. In the following, we use the Torr and Torr model where the solar EUV flux is interpolated in terms of decimetric index into 37 energy values from 248 eV down to 12.02 eV. Following Tobiska (1993), two values have been added at 2.327 nm (545 eV) and 3.750 nm (250 eV) to take into account ionization due to high-energy photons. The $F_{10.7}$ value is 150, corresponding to a mean solar activity. As a mean value, it will serve as an anchor point for our simple model.

In order to compute the height primary production profile, it is necessary to make a projection on the vertical axis through a “Chapman function” (Smith and Smith, 1972). At low solar angle (typically below 70°), this projection behaves as a simple cosine law.

The computed productions are shown in Fig. 1 for a solar zenith angle of 45°. This angle has been chosen to represent a planetary average (Lebonnois et al., 2001). The behavior is somewhat classical, with a secondary production becoming larger than the primary one below typically 850 to 950 km. The cases of CH₄⁺ and CH₃⁺ are special: the primary electron production is very small below about 800 km compared to the sec-

ondary production. The production of CH₄⁺ reaches 0.05 ion cm⁻³ s⁻¹ at 800 km. The same value is reached at 900 km for CH₃⁺. These ions are negligible at these low altitudes. These values are comparable to those in Cravens et al. (2004), and the electron production profile is as in Galand et al. (1999).

3. Production efficiency

The production efficiency is defined as the ratio between the secondary production (in the numerator) and the primary production (in the denominator) as shown in Fig. 2. The same features seen in Fig. 1 are found. The efficiency is of the order of 4 to 5 at maximum for the three nitrogen ions, but increases to several hundreds for CH₄⁺ and CH₃⁺.

We have explored the effect of solar activity on the efficiency. On Earth, there are two effects. The first one is a modification of the input photon flux. The second one is a modification of the thermosphere composition. The two effects create a variability of the production efficiency of the order of about 15% (Liliensten et al., 1989). In Titan’s thermosphere, we only consider the effect of the amplification of the solar flux because there is still a great deal

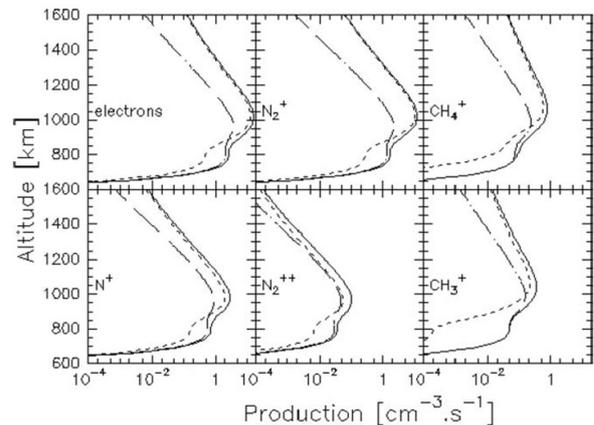


Fig. 1. Total production (full lines), primary photo-production (dashed lines) and secondary production (dot-dashed lines). Top, electrons, (left), N₂⁺, (middle), and CH₄⁺, (right). Bottom, N⁺, (left), N₂²⁺, (middle), CH₃⁺, (right).

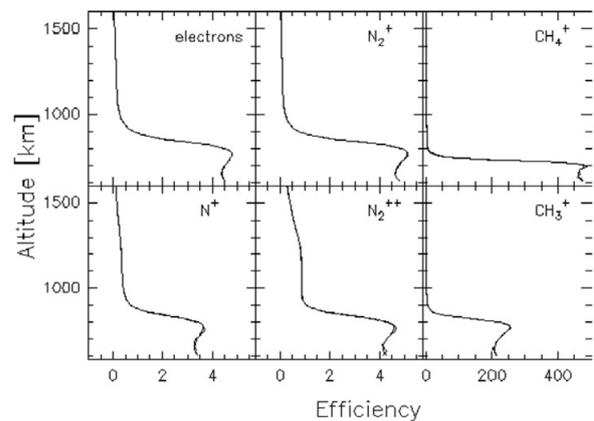


Fig. 2. Production efficiencies (full lines) and polynomial fits (dashed lines). Top, electrons (left), N₂⁺, (middle), and CH₄⁺, (right). Bottom, N⁺, (left), N₂²⁺, (middle), CH₃⁺, (right).

Table 1
Polynomial coefficients in Eqs. (1) and (2)

	Electrons	N ₂ ⁺	CH ₄ ⁺	N ⁺	CH ₃ ⁺	N ₂ ⁺⁺
a ₀	7168.39596798	8311.24113065	2395515.98979	5181.38810037	25215.8704447	3434.37009107
a ₁	-21.3232033733	-24.8570921610	-16607.7380648	-15.9912879965	-91.6837202831	-10.7435732399
a ₂	2.41445310804 × 10 ⁻²	2.81818939864 × 10 ⁻²	49.8972536715	1.89359763393 × 10 ⁻²	1.33751213406 × 10 ⁻¹	1.31659471128 × 10 ⁻²
a ₃	-1.20997119140 × 10 ⁻⁵	-1.41414970383 × 10 ⁻⁵	-8.48554353612 × 10 ⁻²	-9.85761076057 × 10 ⁻⁶	-9.71140431498 × 10 ⁻⁵	-7.04329769333 × 10 ⁻⁶
a ₄	2.25333985295 × 10 ⁻⁹	2.63743456666 × 10 ⁻⁹	8.93576754626 × 10 ⁻⁵	1.89374636145 × 10 ⁻⁹	3.50707166407 × 10 ⁻⁸	1.38023716317 × 10 ⁻⁹
a ₅			-5.96849017361 × 10 ⁻⁸		-5.0432971546 × 10 ⁻¹²	
a ₆			2.47016898554 × 10 ⁻¹¹			
a ₇			-5.79371466726 × 10 ⁻¹⁵			
a ₈			5.89834031317 × 10 ⁻¹⁹			
Transition (km)	840.00	840.00	770.00	900.00	860.00	900.00
b ₀	-1024.73252212	-1319.31760093	-72459379651.5	-10065.1825906	-67475569.5286	-13005.8216953
b ₁	6.20790147888	7.89655564668	857549135.475	69.7627403031	671334.608603	90.1832943991
b ₂	-1.39773444265 × 10 ⁻²	-1.75882509126 × 10 ⁻²	-4436093.94463	-1.92300338076 × 10 ⁻¹	-285.669707614	-2.48713723980 × 10 ⁻¹
b ₃	1.39192096995 × 10 ⁻⁵	1.73351896006 × 10 ⁻⁵	13100.8732986	2.63526249734 × 10 ⁻⁴	6.73929187783	3.41028733095 × 10 ⁻⁴
b ₄	-5.17158915328 × 10 ⁻⁹	-6.37754058807 × 10 ⁻⁹	-24.1586283157	-1.79485832046 × 10 ⁻⁷	-9.51912486391 × 10 ⁻³	-2.32422753454 × 10 ⁻⁷
b ₅			2.84848233532 × 10 ⁻²	4.85916422414 × 10 ⁻¹¹	8.04995662471 × 10 ⁻⁶	6.29695597757 × 10 ⁻¹¹
b ₆			-2.09710876716 × 10 ⁻⁵		-3.77361892766 × 10 ⁻⁹	
b ₇			8.81400979538 × 10 ⁻⁹		7.56416836991 × 10 ⁻¹³	
b ₈			-1.61914069594 × 10 ⁻¹²			

The a_i coefficients stand for the altitudes above the transition altitudes. The b_i coefficients are below the transition altitude. The transition altitude is given in the middle of the table.

of uncertainty on the atmospheric composition. The relative variation of the efficiency compared to the mean solar activity is less than 8% whatever the ion or the altitude.

The other important parameter is the solar zenith angle χ . When the Sun sets, the effect is to move the whole efficiency upward. There are two components in the solar angle influence. The first one follows a close $\cos(\chi)$ law because the primary production is directly a function of $\cos(\chi)$ through the Chapman function. Above about 70°, the Chapman function departs from a cosine, but not enough to change the efficiency behavior. The second effect is closer to a $\sqrt{\cos(\chi)}$ behavior because of the transport effects (see, for example, Brekke and Hall (1988) for a discussion of the influence of the solar zenith angle on the ionosphere). On Earth, the efficiency is much smaller than in Titan's ionosphere so that the $\cos(\chi)$ term is dominant. On Titan, the atmosphere is weaker so that the transport is greatly enhanced and the efficiencies are large. The $\sqrt{\cos(\chi)}$ value may become important.

In order to build a useful model for the efficiency, it is not necessary at first to look for a law with a physical meaning. Physics is actually included in Boltzmann's transport equation. This is why we fitted the efficiency profiles $\tilde{\epsilon}(z, \chi)$ with a simple polynomial law. We start with the estimated efficiency at a zenith solar angle of $\chi = 45^\circ$. In order to avoid the oscillations due to high order polynomials, we have divided the altitude range in two parts. Above a given transition altitude, we have used a logarithmic fit:

$$\log_{10}(\tilde{\epsilon}(z, 45^\circ)) = \sum_{i=0}^N a_i z^i - 2. \quad (1)$$

While below this transition altitude, we use a direct polynomial fit:

$$\tilde{\epsilon}(z, 45^\circ) = \sum_{i=0}^M b_i z^i, \quad (2)$$

where z is the altitude in kilometers. The transition altitudes as well as the a_i and b_i coefficients are given in Table 1.

For any other solar angle, we compute a decay (in kilometer):

$$dz = z + 60 \cos(\chi) - 205\sqrt{\cos(\chi)} + 130. \quad (3)$$

This results in a null decay at a zenith angle of 45°, -15 km at $\chi = 0^\circ$, 130 km at $\chi = 90^\circ$ in total agreement with the Boltzmann modeling. The estimated efficiency then becomes:

$$\tilde{\epsilon}(z, \chi) = \tilde{\epsilon}(z - dz, 45^\circ). \quad (4)$$

In Fig. 2, we plot the resulting estimated efficiencies using dashed lines at a zenith angle of 45°. The error with respect to the full Boltzmann transport solution is less than 4% whatever the altitude. Since this fit is performed at mean solar activity, the variation of $F_{10.7}$ index introduces an error smaller than 4% at extreme conditions. The additional error induced by the solar angle variation is slightly smaller than 5% at largest angle for CH₃⁺ and smaller for the other species.

Finally, we have studied the effect of the thermosphere. Following Ver- vack et al. (2004), we enhanced the nitrogen densities by 60%. Since the efficiency is a ratio with a dependence on the thermosphere both in the numerator and denominator, the effect on the amplitude is quite small, less than 1.5% on all nitrogen ions. As an example, the maximum of the electron efficiency goes from 4.78 in the reference atmosphere to 4.71 in the N₂ enhanced atmosphere, and N₂ goes from 5.11 to 5.18. The main effect is to move the whole layer upward by 20 km, keeping the shape of the efficiency. Therefore, the same parametrized law may be used with an altitude shift. We also decreased the methane density by a factor of 5. This has a very drastic effect on the altitude of production and therefore on the altitude of the efficiency, which moves downward by 90 km. However, we arrive here at the limit of our model since we are at the bottom of the altitude grid. This number should then not be considered as certain, and the decrease could well be still larger. The maximum amplitude of the methane

ion production decreases from 0.78 to $0.17 \text{ cm}^{-3} \text{ s}^{-1}$ and the methane becomes in this condition totally negligible in the computation of the electron production.

4. Conclusion

Models of Titan's atmosphere require an ion-neutral chemical scheme. The primary photo-production is quite a simple task to solve through the expression of a Beer-Lambert law. The secondary production is more difficult to compute because it necessitates solving a transport equation. However, it cannot be neglected since it may be 4 times as big as the primary one for the electrons and nitrogen ions, and up to 500 for the methane. With the proposed work, it is possible to deduce in a very fast computation five secondary ion productions and the secondary electron production from the primary one so as to eventually include them in global models of Titan's ionosphere.

References

- Brekke, A., Hall, C., 1988. Auroral ionospheric quiet summer time conductances. *Ann. Geophys.* 6, 361–376.
- Cravens, T.E., Vann, J., Clark, J., Yu, J., Keller, C.N., Brull, C., 2004. The ionosphere of Titan: an updated theoretical model. *Adv. Space Res.* 33, 212–215.
- Davies, D.K., Kline, L.E., Bies, W.E., 1989. Measurements of a swarm parameters and derived electron collision cross sections in methane. *J. Appl. Phys.* 65, 3311–3323.
- Fennelly, J.A., Torr, D.G., 1992. Photoionization and photoabsorption cross sections of O, N₂, O₂ and N for aeronomic calculations. *At. Data Nucl. Data Tables* 51, 321–363.
- Galand, M., Liliensten, J., Toubanc, D., Sylvestre, M., 1999. The ionosphere of Titan: ideal diurnal and nocturnal cases. *Icarus* 140, 92–105.
- Hinteregger, H.E., 1981. Representation of solar EUV fluxes for aeronomic applications. *Adv. Space Res.* 1, 39–52.
- Hinteregger, H.E., Katsura, F., 1981. Observational, reference and model data on solar EUV, from measurements on AE-E. *Geophys. Res. Lett.* 8, 1147–1150.
- Hinteregger, H.E., Bedo, D.E., Manson, J.E., 1973. The EUV spectrophotometer on Atmosphere Explorer. *Radio Sci.* 8, 349–354.
- Lebonnois, S., Toubanc, D., Hourdin, F., Rannou, P., 2001. Seasonal variations of Titan's atmospheric composition. *Icarus* 152, 384–406.
- Liliensten, J., Kofman, W., Wisemberg, J., Oran, E.S., DeVore, C.R., 1989. Ionization efficiency due to primary and secondary photoelectrons: a numerical model. *Ann. Geophys.* 7, 83–90.
- Lummerzheim, D., Liliensten, J., 1994. Electron transport and energy degradation in the ionosphere: evaluation of the numerical solution, comparison with laboratory experiments and auroral observations. *Ann. Geophys.* 12, 1039–1051.
- Märk, T.D., 1975. Cross sections for single and double ionization of N₂ and O₂ molecules by electron impact from threshold up to 170 eV. *J. Chem. Phys.* 63 (9), 3731–3736.
- Müller-Wodarg, I.C.F., Yelle, R.V., Mendillo, M., Young, L.A., Aylward, A.D., 2000. The thermosphere of Titan simulated by a global three-dimensional time-dependent model. *J. Geophys. Res.* 105, 20833–20856.
- Richard, P.G., Torr, D.G., 1988. Ratio of photoelectron to EUV ionization rate for aeronomic studies. *J. Geophys. Res.* 93, 4060–4066.
- Richard, P.G., Fennelly, J.A., Torr, D.J., 1994. EUVAC: a solar EUV flux model for aeronomic calculation. *J. Geophys. Res.* 99, 8981–8992.
- Samson, J.A.R., Haddad, G.N., Masuoka, T., Pareek, P.N., Kilcoyne, D.A.L., 1989. Ionization yields, total absorption and dissociative photoionization cross sections of CH₄ from 110–950 Å. *J. Chem. Phys.* 90, 6925.
- Smith, F.L., Smith, C., 1972. Numerical evaluation of Chapman's grazing incidence integral $ch(x, \chi)$. *J. Geophys. Res.* 77, 3592–3597.
- Tobiska, W.K., 1991. Revised solar extreme ultraviolet flux model. *J. Atmos. Terr. Phys.* 53, 1005–1018.
- Tobiska, W.K., 1993. Recent solar extreme ultraviolet irradiance observations and modeling: a review. *J. Geophys. Res.* 98, 18879–18893.
- Tobiska, J.R., Eparvier, J., 1998. EUV 97: improvements to EUV irradiance modeling in the soft X-ray and FUV. *Sol. Phys.* 177, 147–159.
- Torr, M.R., Torr, D.J., 1979. Ionization frequencies for major thermospheric constituents as a function of solar cycle 21. *Geophys. Res. Lett.* 6, 771–774.
- Torr, M.R., Torr, D.J., 1985. Ionization frequencies for solar cycle 21: revised. *J. Geophys. Res.* 90, 6675–6678.
- Vervack, R.J., Sandel, B.R., Strobel, D.F., 2004. New perspectives on Titan's upper atmosphere from a reanalysis of the Voyager 1 UVS solar occultations. *Icarus* 170, 91–112.
- Yelle, R.V., 1991. Non-LTE models of Titan's upper atmosphere. *Astrophys. J.* 383, 380–400.

Paper 4

Considering the polarization of the oxygen thermospheric red line for Space Weather studies

Lilensten, J., C. Simon, M. Barthélemy, J. Moen, R. Thissen and D.A. Lorentzen,
accepted in *Space Weather Journal*, 2006.

Space Weather Journal, 1–14, submitted.

Space Weather Journal
© European Geosciences
Union 2006.

Considering the polarization of the oxygen thermospheric red line for Space Weather studies

Jean Lilensten¹, Cyril Simon^{1,2}, Mathieu Barthélemy¹, Jøran Moen², Roland Thissen³, Dag A. Lorentzen⁴

Abstract. Space weather thermospheric monitoring requires real-time and large-scale measurements. In order to monitor the thermospheric variations due to the geomagnetic activity, one relies mostly on the measurements of the intensity of the atomic oxygen green line and on the indirect measurement of the Total Electron Content. These two parameters do not allow retrieving the full characteristics of the thermosphere and a third proxy is required for example in orbitography. We propose to use the polarization of the atomic oxygen red line to fulfil this requirement.

The first measurements of the polarization of thermospheric nightglow lines have been performed in the first part of the twentieth century, and especially during the last International Geophysical Year. Amongst the oxygen visible lines, only the red one seems to be potentially polarized. However, there exists a disagreement between the different measurements.

At the origin of the polarization, there is always a dissymmetric mechanism. It triggers either an emission process, a light scattering or, in the case of the oxygen red line, a collision mechanism. This paper

reviews the different experiments performed in the past and proposes to explore this matter with modern facilities. If successful, this investigation could lead to a systematic reanalysis of the previous red line interferometric measurements.

1 Introduction: on the need of new observations to monitor the thermosphere in the frame of space weather

1.1 Position of the problem

When an object (spacecraft, debris...) travels through an atmosphere it experiences a drag force in a direction opposite to the direction of its motion. In a first simple approach, this drag force is given by:

$$D = \frac{1}{2} \rho v^2 A C_d \quad (1)$$

where ρ is the thermospheric density, v the object velocity, A the object cross-section area and C_d is a drag coefficient of the

¹ Laboratoire de Planétologie de Grenoble, Bâtiment D de physique, BP 53, 38041 Grenoble cedex 9.

² Department of Physics, University of Oslo, P.O.Box 1048, Blindern, N-0316 Oslo, Norway.

³ Laboratoire de Chimie-Physique, UMR 8000 Université Paris-Sud, Bât 350, 91405 Orsay, France.

⁴ Arctic Geophysics, The University Centre in Svalbard, N-9170 Longyearbyen, Svalbard, Norway.

order of 2. The reduction in the period P of the spacecraft due to atmospheric drag is given by:

$$\frac{dP}{dt} = -3\pi a \rho \frac{A C_d}{m} \quad (2)$$

where a is the semi major axis of the spacecraft trajectory and m the mass of the object. The evaluation of the drag force depends on the knowledge of the thermosphere density. This usually comes from a model. The sources of variations of the thermosphere are mainly X-rays and EUV fluxes, particle precipitation and E fields. The physical processes involve photo-absorption, particle collisions, Joule heating and frictional heating. For space weather, the main consequence (amongst other phenomena) of an increase of the input energy is a dilation of the thermosphere: the density may increase by a factor of 10 at the altitude of the International Space Station.

Most of the perturbation sources –X rays, EUV fluxes, and particle precipitation– are badly known, monitored, predicted, and modelled. Thanks to the SuperDarn facility, the knowledge of the electric field has been improved in the recent years (<http://superdarn.jhuapl.edu/map/index.html>). However, this measurement depends on the presence of irregularities in the ionosphere. When there are no irregularities, a model is used to fill the gaps.

It is therefore not surprising that the models fail in reproducing the real time atmosphere, especially at high latitude and during magnetic perturbations. This implies a large uncertainty on the position of the spacecraft (Nicholas *et al.*, 2000). Since the actual goal is to reach a precision of 20 kilometres after 24 hours, there is a necessity of a permanent monitoring and adjustment of the drag equation through neutral atmosphere models. Several methods are used.

The first one is a proxy approach, or use of indices, which remain basic data in Space Weather. Several exist to monitor the solar activity and the EUV flux variation or the

geomagnetic activity at different scales. They are still impossible to bypass for long term studies. Better indices with better space and time coverage are needed in several applications.

Another approach is the technological approach. An example is given in Nicholas *et al.* (2000), where, a reference object is used to estimate the thermospheric drag, which then feeds the drag equation for the other spacecrafts. Although very efficient, this approach necessitates to have an extremely well calibrated reference instrument with a great temporal stability.

There are also physical approaches, consisting in feeding models with observations. The observations are of different kinds

1. *UV airglow monitoring*: a spacecraft observes the airglow over a large scale. The thermosphere is adjusted in glow models until the computations fit the observations. This method is at work at the 55th squadron for Space Weather. Although is is very efficient, it is also very expensive and only works along the spacecraft orbit.

2. *Temperature monitoring*: the neutral exospheric temperature is measured (for example using an incoherent scatter radar) and compared to the exospheric temperature given by empirical models (Lathuillère *et al.*, 2002). The total density is then extracted from the model to calculate the drag force. This method is not well suited to space weather studies because the measurement of the exospheric temperature is very difficult to perform and gives the state of the atmosphere only at one position.

3. *Use of the ionosphere as a tracer of the thermosphere*: in this case, one may use ionospheric profiles measured by incoherent scatter radars (Blelly *et al.*, 1996), or integrated parameters such as the Total Electron Content (Lilensten and Blelly, 2002). However, the fit of a single integrated parameter such as the TEC does not give a unique solution, and the method must be improved with the use of a second type of observation.

This is why combined methods have been developed, such as incoherent scatter + visible airglow (red and green lines of the atomic oxygen) (Culot *et al.*, 2004).

However, the variations of the thermospheric density may be more important for orbitography purposes than its absolute value itself. In a recent work (Culot *et al.*, 2005), it has been shown that the variation of the green line intensity follows well the variation of the magnetic activity, but that the intensity of the red line does not vary in an extent that could be measured and / or modelled.

There are two requirements for space weather applications. The first one is real-time (or near real-time) measurements. The second one is large-scale measurements. As far as the thermosphere is concerned, we are then left with only 2 measurements fitting these constraints to monitor the effects of the geomagnetic activity on the thermosphere: (i) the TEC (ionospheric measurement) through GPS; (ii) the intensity of the oxygen green line. These two parameters do not allow retrieving the full characteristics of the thermosphere (Lilensten *et al.*, 2005). It is therefore important to find a new proxy of the thermospheric variability. We propose to use the polarization of the atomic oxygen red line as a third hint to explore this issue.

1.2 The thermospheric oxygen emissions

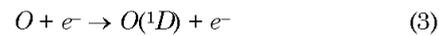
In the ionospheric F region, typically from 150 to 400 km, the main source of ionisation is the EUV radiation below 90 nm. This region is collisional, with elastic as well as inelastic collisions. It also hosts chemical reactions including both neutral and ionized species.

In the nightside ionosphere, the particle precipitations have similar effects than the EUV flux in the dayside. There, electrons and protons originating in the solar wind and accelerated in the magnetosphere constitute the main excitation, dissociation, heating and ionization source. Transport phenomena linked to the

presence of the Earth's magnetic field are important in both cases.

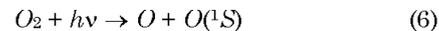
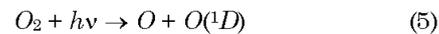
The thermospheric emissions come from the deactivation of excited atoms, molecules or ions. In the F region, the atomic oxygen is one of the main contributors to the glow in the visible light. Its main emissions correspond to the transitions from state 1S to 1D and 1D to 3P . The first transition creates the green line at 557.7 nm, and the second one forms the triplet at 630.0, 636.4 and 639.2 nm, which constitutes the red line emission. The production of the excited states D is due to different phenomena (Witasse *et al.*, 1999, and references herein):

– *energetic electron impact:*

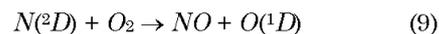
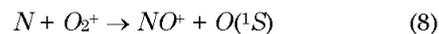
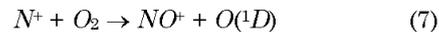


The electrons may be thermal (energy < 1 eV) or suprathermal, from photoionization or precipitation origins.

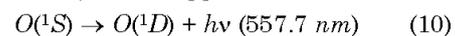
– *photodissociation:*



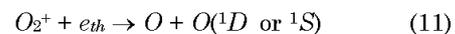
– *chemical reaction with $N(^2D)$ or N^+ :*



– *cascade from an upper level:*



– *dissociative recombination with O_2^+ :*



The photodissociation, the chemical reactions or the cascade from upper energy levels are isotropic.

It is also the case with the dissociative recombination when thermal electrons are involved, because the thermal distribution is spatially isotropic (maxwellian). Therefore, in the diurnal case when the source is the electromagnetic EUV radiation, one does not expect any polarization of the oxygen emission. This has to be confirmed by experiments. In the following, we will only deal with the nocturnal case, when strong anisotropic sources are present.

When the source is reduced to energetic particle impact, the presence of a magnetic field may impose a well collimated pitch angle. In this case, one may expect a polarized emission because the excitation source is anisotropic. This happens during night-time with a larger probability when the energies of the incoming electrons are relatively homogeneous.

2 Observations: a comprehensive review

At the beginning of the twentieth century, astronomers understood that part of the nightglow is of atmospheric origin. On the one hand, the scattering of the star light cannot explain the enhancement of the glow intensity far from the zenith. On the other, only a very small part of the nightglow is concentrated on the line of sight of the Milky Way where most of the closest stars are found.

With the improving spectroscopes, they came to the conclusion that the most intense line of the auroral spectrum, the green line (557.7 nm), is a permanent feature of both the nightglow and dayglow (Ångström, 1868; Campbell, 1895; Slipher, 1919). Yntema (1909) even mentions the presence of a “permanent aurora”. In parallel, the red line (at 630 nm) is discovered by Zöllner (1870). Its origin soon receives some interpretations (Slipher, 1919). In 1919–1920, Fabry draws the attention on one of the main problems of the nightglow: several emissions are mixed altogether, such as the stellar background emission, the sunlight scattered by interplanetary gas or dust, and finally the atmospheric emission itself. With the goal of characterizing each contribution, Rayleigh (1919) and Babcock (1919) proceed to the first measurement of the nightglow polarization with no positive result. Ten years later, Dufay (1928, 1929) reproduces these measurements and finds a polarization rate of 2 to 4% of the nightglow in a plane that includes the solar azimuth. He concludes that about 15% of the nightglow is due to the zodiacal light. After 1925, some systematic

measurements of the polarization of the sky light are performed, rapidly concentrating on individual lines. Khvostikov (1938) observes polarization rates up to 15%. These high values seem to contradict Ginsburg’s theoretical developments (1943). In 1947, Bricard and Kastler use a Savart and Lyot polariscope to observe the diurnal and nocturnal lines (1947a, 1947b). They find no polarization.

Thanks to the International Geophysical Year (IGY) in 1958, Duncan (1959) and Chamberlain (1959) show results on the polarization of the oxygen red line. Their results are detailed hereafter. They differ considerably, originating in a scientific dispute.

Since then, very few studies have been performed. Chamberlain (1974) still states the possible polarization of the red line. Some soviet studies (Nadubovich, 1977, Korobotsova, 1981, Karashva *et al.*, 1985) mention a polarization rate ranging between 18 and 56%, depending on the geophysical condition. None of these early studies have yet been confirmed.

2.1 Early results

The first hypothesis (1943): In 1929, Dufay shows that the nightglow is partially polarized. Khvostikov (1937) concludes that the polarization is that of individual lines ($\lambda = 557.7$, $\lambda = 630.0$, $\lambda = 589.0$ nm). Ginsburg (1943), pointing out the real lack of measurements, interprets the auroras as being due to electron collisions in the atmosphere. He also shows that the green line cannot be polarized because its upper state (1S) is not degenerated. This theoretical conclusion does not depend on the excitation mechanism. He then rules out the green line as a potential cause of the observed glow polarization. The red line, however, remains a good candidate because the transition is mostly magnetic dipolar with a transition energy proportional to the magnetic momentum and to the magnetic field. Ginsburg’s developments were however limited by the fact that at that time, there was no theoretical explanation of the collision induced polarization.

J. Bricard & A. Kastler (1947): This study has been performed over three years. The authors used a Savart fringe polariscope updated by Lyot (Bricard and Kastler, 1947*a*). This device includes two birefringent elements with their optical axis at 90° from each other, and making an angle of 45° with the sides. The polarization is simply measured by adding a glass slide at the front of the polariscope. This filter is inclined, so as to introduce a polarization equal and orthogonal to that of the measured beam light. It allows killing the interference fringes and computing the polarization rate of the beam. Lyot improved the system by noticing that the human eye is more sensitive to the light itself than to its extinction. He then replaced the analyser by a Wollaston prism which allows studying the contrast between two polarized components.

Thanks to this improvement, the two authors could measure polarization rates of the order of 0.1%, which is remarkable considering that the process was purely visual. However, positive results only applied to the sodium yellow line (Bricard and Kastler, 1950). The authors noticed no polarization when observing the oxygen red and green lines (Bricard and Kastler, 1947*b*).

Duncan [1959]: Bricard & Kastler results ended up the studies for about 10 years, until the Australian physicist R.A. Duncan performed a long series of measurements in 1957 in the frame of the International Geophysical Year. He measured the polarization of the red line in middle and low latitude auroras during one year, which resulted in only 30 nights of observations. The 8th of July 1958, he measured a polarization rate of 30%. Since it was only measured once over 30 nights, it cannot be attributed to secondary effects such as the atmospheric scattering. He interpreted this result as due to the precipitation of low energy electrons (smaller than 10 eV) colliding with the neutral atmosphere. The helicoidal motion of the electrons around the magnetic field line imposes a precession symmetrical around the field line to the excited atoms,

because its lifetime is long (110 s). Following this theory, no polarization can occur parallel to the magnetic field line. Indeed, an excited oxygen atom 1D_2 will radiate in a direction perpendicular to the magnetic dipole from which it originated. The only way to detect the polarization is therefore to look perpendicularly to the magnetic field line. From mathematical considerations, Duncan concludes that the electrons at the origin of the polarization must have a gyration motion rather than a longitudinal one.

Since then, these results have never been confirmed. Instead, Chamberlain (1959) put some doubt on Duncan's semi-classical interpretation.

2.2 Recent developpements:

No measurement of the polarization of the oxygen red line has been performed for the last half century. However, it has been recently modelled. The authors of this paper have developed an ionospheric code over the last decade (Lilensten and Brelvi, 2002). From a given atmosphere and a given precipitating electron flux, this code allows to compute the suprathermal electron distribution at each altitude, energy and pitch angle by solving a multi-stream stationary kinetic Boltzmann equation. Using the outputs of this model, Kazantsev *et al.* (1999) theoretically showed that the oxygen red line could have a polarization rate of about 30%, in agreement with Duncan's unique observation. This calculation remains to be confirmed experimentally.

3 Description of the polarizing mechanisms

The polarization originates necessarily in a dissymmetry. The dissymmetry can affect the emission itself, or the radiation during its way to the observer. In the natural environment, the number of processes at work decreases the sources of dissymmetry. It means that we have to be able to measure very low polarization rates in order to get some astrophysical information.

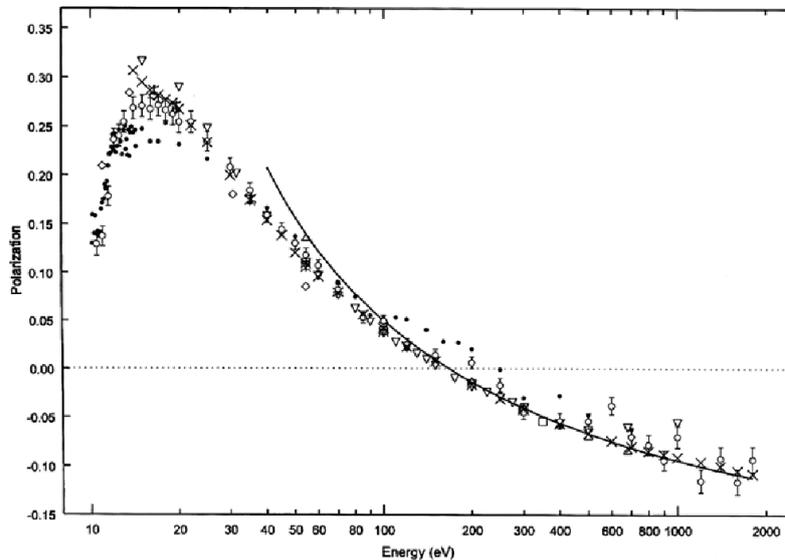


Figure 1 – Experimental and theoretical values for the polarization of Lyman- α radiation from atomic hydrogen excited by electron impact over the energy range from threshold to 1800 eV. The dotted line representing zero polarization is added for clarity (from James et al., 1998).

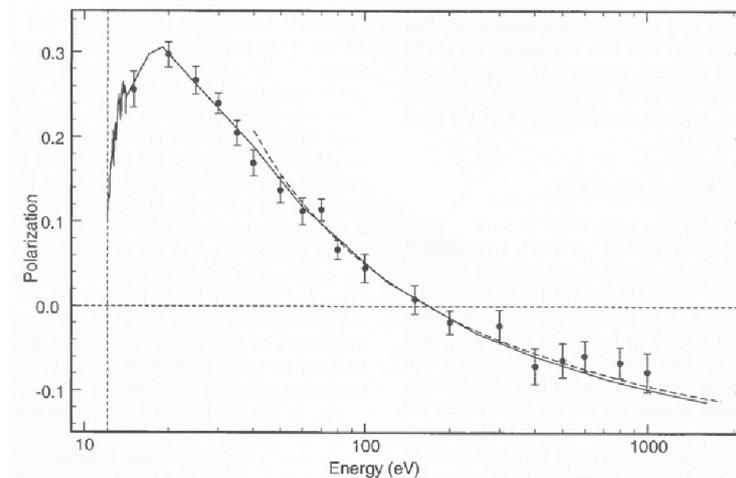


Figure 2 – Experimental (solid circles) and theoretical values for the polarization of Lyman- α radiation from atomic hydrogen excited by electron impact over the energy range from threshold to 1600 eV. The dashed horizontal line representing zero polarization is added for clarity (from James et al., 2002).

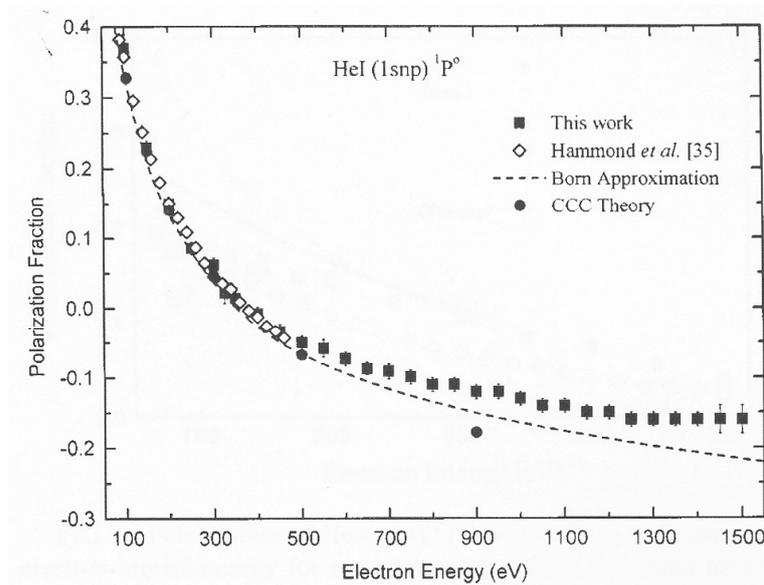


Figure 3 – Polarization of HeI (1 snp) 1P_0 ($1s^2$) 1S radiation as a function of electron impact energy for energies ranging from 100 to 1500 eV (from Merabet et al., 1999).

Several phenomena can contribute to the dissymmetry and then to a polarization.

3.1 Polarization of the emission

Pieter Zeeman (1897) discovered that when an atomic spectrum is emitted by a source in the presence of a magnetic field, the spectral lines are divided into several components. The components are linearly or circularly polarized, depending on the angle between the magnetic field and the line of sight. However, in the case of the Earth, Chamberlain (1961, 1974) suggested that the geomagnetic field is not large enough to polarize the thermospheric lines.

When there is no magnetic field, the Zeeman levels are degenerated but each sublevel produces a different polarization so that we have to calculate their populations. When the beams of electrons hit the atmospheric gaz, there are two essential parameters of the corresponding line: the impact angle which creates the dissymmetry and the energy of the incident particle. Those two parameters allow calculating the density matrix corresponding to the population of the m sub-levels.

The state of polarization is entirely defined by the Stokes parameters but if we are only interested by linear polarization, the polarization rate P is the most relevant parameter,

$$P = \frac{I_{//} - I_{\perp}}{I_{//} + I_{\perp}} \quad (12)$$

where $I_{//}$ and I_{\perp} are respectively the intensity of the emissions with an electric field parallel and perpendicular to the plan that includes both the incident particles and the line of sight. Therefore, the best observations should be a priori performed with a line of sight perpendicular to the magnetic field. This definition is valid if the line of sight is not parallel to the particle beam, but in this case linear polarizations are very unlikely if no other dissymmetry breaks the equivalence between the two directions perpendicular to the particle beam.

The modelling of the polarization rate can be performed by ab-initio calculation or from laboratory experiments. Percival and Seaton (1958) developed the ab-initio calculation for an atom considering an electric dipolar transition by:

- Taking into account spin-orbit coupling,
- Considering the angular orbital momentum of the ground level as null.
- Considering that the excitation potential does not depend of spin coordinates.

The polarization rate is positive when $I_{\parallel} > I_{\perp}$. In the classical approach, this cannot happen when the velocities are small, because a slow particle creates temporally an electric dipole parallel to the beam. If the velocity (and therefore the energy) of the incident particle is high, the inverse happens: the dipole is perpendicular to the incident beam. However the classical view is insufficient to describe quantitatively the polarization phenomenon. We have to calculate the density matrix of the system. In those cases the semi classical formalism using the Bethe theory could be used (McFarlane, 1974). It is also possible to use the quantum formalism and to calculate the density matrix of the system (Fineschi et degl'innocenti 1992)

However, the ab-initio calculations are particularly complex and do not provide sufficient precision. Therefore, it is necessary to proceed to laboratory measurements. Some have been made on the Lyman alpha and beta lines for atomic hydrogen for energies ranging from the threshold to 1000 eV (James *et al.*, 1998 and 2002) and for the helium 1s-np series (Merabet *et al.*, 1999). In each case, the curve of the polarization rate shows similar profiles (Figure 1).

We observe a positive increasing polarization just above the threshold. It reaches a maximum (for example at 15 eV in the lyman alpha case.) and decreases above. Around several hundred eV the polarization tends to zero (at around 150 eV in the Lyman- α case) and to a negative asymptote at high energies. In the decreasing part of the curve, the results are similar with the Bethe theory (James *et al.*, 1998 and 2002, Merabet *et al.*, 1999) as shown in Figures 2 and 3.

3.2 Polarization during transfer: diffusion phenomena

3.2.1 Rayleigh and Thomson scattering: polarization of the continuum

The Rayleigh scattering is well known, as being responsible for the blue colour of the sky. The scattering of the sunlight by the atmospheric molecules is much more efficient in the blue than in the red because the scattered power is inversely proportional to the fourth power of the wavelength. The emitted light is linearly polarized perpendicularly to the plane that contains both the sun-earth axis and the scattering particle direction. The polarization rate P is:

$$P = \frac{C^2 - C^2 \cos^2 \alpha}{C^2 + C^2 \cos^2 \alpha} = \frac{\sin^2 \alpha}{1 + \cos^2 \alpha} \quad (13)$$

where C is the amplitude of the wave, which is independent from the wavelength. α is the angle between the sun-earth axis and the line of sight. When this angle is 0° , the polarization rate is null and the light is unpolarized. When α is equal to 90° , the polarization rate is 1, *i.e.* the light is totally polarized.

The polarization due to the Rayleigh scattering is used by several animals such as bees, ants or crayfishes (Wehner, 1976) to find their direction. In the case of polarimetric measurements, Rayleigh scattering has to be taken into account and thermospheric lines must be separated from the continuum of the blue sky in order to deduce their correct polarization. Moreover, it is necessary to take into account the multiple scattering. Combined with the tangential polarization of the primary scattering, the secondary scattering introduces a mostly vertical polarization which cannot be seen in the sunward direction. When looking toward the sun, the neutral point (with a null polarization rate) is called the Brewster point. In the nadir, it is called the Babinet point. Therefore, it is much easier to proceed with night-time observations.

However, even the moonlight is polarized (J. Dufay, 1928, 1929, E. Vassy, 1956), which all the more shortens the observation windows suitable to possible measurements of the red line polarization.

When the scattering particle is a free electron, one faces a Thomson scattering. It is at work essentially in hot atmospheres, such as the solar corona. The induced polarization is comparable to the one due to the Rayleigh diffusion, with the difference that the factor C now depends on the wavelength.

3.2.2 Mie scattering

Water droplets are present in the Earth lower atmosphere. When the radius of the droplets is small in front of the wavelength of the light, the Rayleigh scattering applies. In the opposite case, the light is scattered through the Mie scattering. The polarization of the scattered light depends, amongst other parameters, on the shape of the droplet. It arises in a wet saturated air (fog) or in the clouds, either on water or ice droplets. When the wave propagates through the medium, the electric field of the particles experiences a forced oscillation. The particles then behave as oscillating electric dipoles. The polarization occurs perpendicularly to the propagation of the incident wave. In our thermospheric case, the Mie scattering may be ignored because, apart from its water-originating mechanism, it does not affect individual lines.

3.2.3 Depolarization by radiative transfer

The polarized light emitted after an electronic collision can be depolarized if it is resonantly diffused. In the case of solar flares, the radiative transfer has to be taken into account. It is possible in a first approximation to consider that if the polarised emitted photon is diffused once, it is depolarised. In another way it means that if the line is optically thick, it is not sure that we will keep the polarization on all the line profile. In this case we have to take into account the redistribution effects.

3.3 Application to the red oxygen line in auroral region

The case of the red oxygen line is particularly complex. The approximations of Percival and Seaton (1958) are not valid because the transition is a dipolar magnetic transition. The lifetime of the upper level 1D is 110 s. However, it is the most relevant terrestrial line to study in this polarization problem. It is the most intense in the auroral spectrum and it is formed at high altitude (about 250 km). The green line could also be a good candidate, as being quite intense. However, it is an electric quadrupolar transition. For symmetrical considerations this line cannot be significantly polarised. Furthermore, the red oxygen line is the only auroral line where polarization has been observed (Duncan, 1959).

3.3.1 Atomic structure and selection rules

The red oxygen line is a triplet with wavelengths respectively of 630.0 nm, 636.4 nm and 639.2 nm. However, with no magnetic field or with a weak one, some of the three ground levels 3P are degenerated. The first of these levels has a multiplicity of five ($J = 2$; $\Delta m = 0, \pm 1, \pm 2$; energy = 0.0 cm^{-1}), the second has three ($J = 1$; $\Delta m = 0, \pm 1$; $E = 158.3 \text{ cm}^{-1}$) while the last one is not degenerated ($J = 0$; $\Delta m = 0$; $E = 227.0 \text{ cm}^{-1}$). The excited level (1D) is five times degenerated ($J = 2$; $\Delta m = 0, \pm 1, \pm 2$). The selection rules allows only for $\Delta m = 0, \pm 1$ for a magnetic dipolar transition. If $\Delta m = 0$, the polarization is linear and the electric field is oriented parallel to the magnetic field. If $\Delta m = +1$ we then get a right circular polarization, and if $\Delta m = -1$, we get a left circular polarization. Since we consider a magnetic dipolar transition, the problem could theoretically correspond to the quantum calculation of Fineschi and Degl'Innocenti (1992) which allows non electric dipolar transitions. However, the presence of this triplet does not fit the frame usually defined for the calculation of the statistical equilibrium.

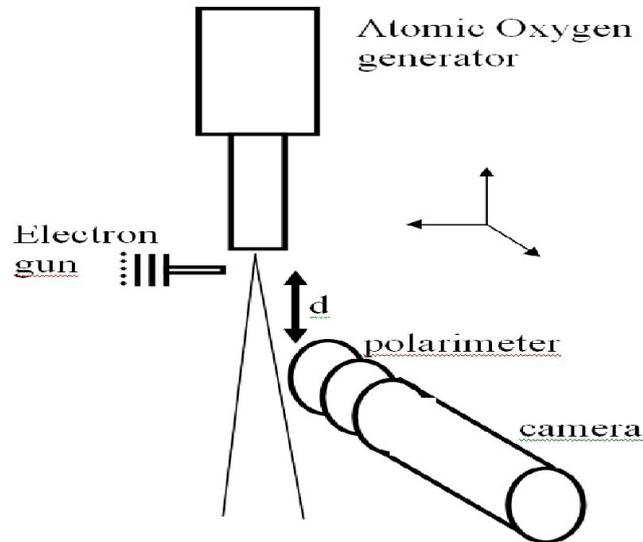


Figure 4 – Description of the laboratory experiment (see text).

In such calculations, one considers only the equilibrium of the upper level, which implies a non polarized ground level. This is not the case for two of the three lines of the triplet.

3.3.2 Depolarization and dynamic of the system

In the case of the red line, there is no radiative transfer depolarization; the red line is optically thin in the terrestrial atmosphere. Two effects still may depolarize the line. The first one is due to the long lifetime of the excited state. During the 110 seconds, the oxygen atom can collide with other atoms. In this case, we can lose the history of the excitation process and get a redistribution of the levels m . It is important to notice that the depolarizing collisions have very large impact parameters because they follow the Van der Waals interaction potential (Degl'innocenti, 1996). The second one is the effect of the secondary electrons, which are isotropically produced through primary electron impact. Because of the isotropy, they cannot produce any polarization.

Following Degl'innocenti (1996), the global dynamics of the oxygen atoms could play a role in the polarization problem. In such case, the approximation consisting of the

separation of the density matrix from the velocity distribution is not valid and polarization could appear from the dynamics of the system. Then, the polarization of the red line must be compared to the polarization of allowed transition of the oxygen atomic system which have very large Einstein coefficients. In this case the triplet at 130.2, 130.4 and 130.6 nm is a good candidate. There Einstein coefficients are of the order of $10^8 s^{-1}$ and the ground levels are identical to the red line level.

3.3.3 Geometrical problem.

The incident electrons have a gyration motion around the magnetic field lines. There is an angle between the field line and the particles beam. This angle depends on the energy of the particles through the conservation of the energy and the conservation of the first adiabatic invariant $\mu = \frac{mv^2}{2B_{\parallel}}$ where m is the particle mass, v its velocity, and B_{\parallel} the parallel magnetic field intensity. Therefore, there is a cylindrical symmetry around the field line. Globally the components of the velocity perpendicular to the magnetic field line should cancel out and the only component from which polarization could

be expected should be the parallel one. If the cylindrical symmetry is not respected or if the distribution of energy of the electron is too broad, then we will get a global depolarization of the line.

To our knowledge, there is not any theoretical calculation, nor laboratory measurement giving the polarization rate for a monodirectional beam of electrons.

4 A new experiment during IHY: a tribute to Duncan

From the previous consideration, we are planning to perform a set of polarization measurements. One is a laboratory measurement using an atomic oxygen source, coupled to an electron gun and a polarimeter/photon counter device; the second one is a thermospheric experiment with a photometer. These two aspects are described hereafter.

These experiments are scheduled to be run during the next International Heliophysical Year (IHY). That is important since the first (and only) observations were made during the 1958 IGY: our new measurements will then constitute an original tribute to this very fruitful year and especially to the pioneering work by Duncan. Funding agencies include the University UNIS at Svalbard (Norway) and the CNRS (France).

4.1 Description of the polarization laboratory experiment

In order to assess the validity of the various theoretical models describing the polarization and depolarization of the atomic oxygen red line, we will construct an experimental set-up in order to measure the amount of polarization of the light emitted specifically by the 1D excited state of atomic oxygen after production by electron impact. In order to fulfill this objective, we will (i) produce a jet of ground state atomic oxygen, (ii) excite it by collision with a collimated electron beam of known kinetic energy, and (iii) detect the photons emitted and measure their

polarization, the latter being performed at various distances (*i.e.* time) from the excitation region.

The experiment (Figure 4) will be performed in a high vacuum chamber, in which we can fit a commercial device based on a RF discharge in low-pressure plasma, which has been optimized to fragment efficiently atmospheric molecules such as Nitrogen or Oxygen. This tool allows producing up to 10% atomic oxygen, which escapes from the plasma as an effusive beam. Previous characterization measurements by photoionisation have shown that the atomic oxygen produced is predominantly (>90%) in its ground electronic state. The exhaust pipe of the device is constituted of series of channels that confine the atomic to preferential orientation, and somewhat limit the effusive beam divergence. The velocity of atomic fragments is not known with great accuracy, but presents the characteristics of an effusive beam, at a temperature lower than 500°C. We will couple, at the exit of the source a small electron gun based on a heated filament and a stack of electrodes, in order to cross the beam of effusive oxygen atoms with a collimated electron beam, the kinetic energy of which can be easily varied from 4 to 100 eV. This gun is optimized for high current intensity to the cost of energy resolution, which is not expected to be better than 1 eV, still good enough for this prospective study. The collisions with the collimated electrons will eventually induce the production of the 1D excited state of oxygen. This process should produce an oriented population of states, similarly to what is proposed in the stratosphere. Therefore, along the path of the beam, the excited atoms should emit polarized photons. These will be detected perpendicularly to the electron beam axis by a photon counter, after passing through a visible light polarimeter, and an interferometer filter, optimized for the 630-639 nm wavelength window.

Authors expect to face problems associated to small signal as the emissions to be detected may very well be negligible in front of background emissions in the same wavelength window coming either directly

from the plasma, or from atoms in their 1D excited state following a path identical to the ground state. This is why we plan to modulate the electron intensity by acting on the lens in front of the electron gun, in order to disentangle the small signal from the background.

The very long lifetime of the excited state (110 s) is a guarantee that along the observable path (up to 20 cm), the photon flux should be almost constant, and this will be an excellent calibration for measuring beam expansion, and neutral density along the path. Therefore, by moving the observation focus along the oxygen path, we will be able to follow the decrease of the polarization due to the collisional quenching, as described in § 3.2.

4.2 Description of the polarization photometer

In order to facilitate polarization measurements of the 630.0 nm [OI] auroral emission line we will develop a Steerable Polarization Photometer (SPP) to complement the existing Meridian Scanning Photometer (MSP) and the All-Sky Imaging Photometer (ASIP) at Longyearbyen, Svalbard. The new photometer will be mounted on a steerable platform, that can rotate $\sim 200^\circ$ in azimuth and 180° in elevation, *i.e.* a flexible system that can point in any direction or sweep in any plane. A one inch photometer tube will be fitted with a front lens, a narrow band 630.0 nm interference filter, and furthest out, a linear polarization filter mounted in a rotator that can turn 360° about its polarization axis. The sampling rate will be 20 counts per second. With the photometer fixed at one position, we will perform 72×1 second measurement while stepping the polarization in 50 steps from 0° to 360° . Assuming that the polarization filter is symmetric about 180° we can achieve 2 complete polarization measurements within the excitation state life time of the 1D emission. After one cycle with the polarization wheel we can steer the photometer toward a new direction. The smartest approach to ensure that we keep pointing at active auroras is to perform measurements in the scan

plane of the Meridian Scanning Photometer. The MSP will provide us the elevation angle of the intensity maximum approximately 4 times per minute. This will allow routine measurements of the possible polarization effect. Variation in IMF and subsequent latitudinal movement of the auroral activity will ensure that we get polarization measurements at various angles with the magnetic field (Sandholt *et al.*, 1998).

5 Conclusion

The polarization of the oxygen red line has not been measured since half a century. At that time, the results did not allow to firmly conclude on its existence. A unique observation held during the last International Geophysical Year states a polarization rate of 30% (Duncan, 1959). A unique recent computation shows that this is theoretically feasible (Kazantsev *et al.*, 1999). Today, it seems possible to answer this still open question, by use of the modern sensitive remote sensing facilities, photometers or interferometers. If the red line happens to be polarized, one could deduce from this polarization some characteristics of the precipitating particles that are still out of reach by any long-term measurements, such as their distribution function. If the polarization turns to be detectable and to faithfully represent the geomagnetic activity, it would constitute a very good and easy-to-measure parameter for space weather applications.

This work also opens a new perspective for planetary atmospheres. The Jovian case is particularly rich because of the complex structure of its magnetosphere. However, it will be necessary to answer several problems. The first one is that the wavelength domain (H Lyman series and Lyman and Werner band for H_2 between 90 nm and 170 nm or the helium line at 58.4 nm) does not allow transmission measurement of the polarization. The second one is that it will be necessary to take into account the radiative transfer. The Jovian auroral lines are optically thick (Prangé *et al.*, 1998). Apart from these

structural issues, the atoms and molecules mainly involved are on the other side well known and simpler than oxygen.

Acknowledgements

This work is part of the European action COST 724 devoted to space weather, particularly in the frame of its working group 2 "interaction of solar wind disturbances with the Earth", under the leadership of J. Waterman.

6 Bibliography

- Ångström, A.J., Spectrum des Nordlichts, *Pogg. Ann.*, **137**, 161-163, 1868.
- Babcock, H.D., Note on the polarization of the night sky, *Astrophysical Journal*, **50**, 209-221, 1919.
- Blelly, P-L, J. Liliensten, A. Robineau, J. Fontanari, and D. Alcaydé, Calibration of a numerical ionospheric model using EISCAT data: effect of the neutral atmosphere and the suprathermal electrons on the ionospheric plasma structure, *Ann. geophysicae*, **14**, 1375-1390, 1996
- Bricard, J. et Kastler, A., Emploi du polariscope Savart-Lyot pour la détection des raies du ciel nocturne et crépusculaire et l'étude de leur polarization, *Compte Rendu des Séances de l'Académie des Sciences*, **224**, 1555-1556, 1947a.
- Bricard, J. et Kastler, A., Etude de la polarization de la raie verte du ciel nocturne, *Annales de Géophysique*, **3**, 308-309, 1947b.
- Bricard, J. et Kastler, A., Polarization des radiations monochromatiques du ciel nocturne et de la raie D crépusculaire, *Ann. géophys.*, **6**, 286-289, 1950.
- Campbell, W.W., Note on the spectrum of the aurora borealis, *Astrophys. J.*, **2**, 162, 1895.
- Chamberlain, J.W., On the polarization of the oxygen red line in aurorae, *Planetary and Space Science*, **2**, 73-75, 1959.
- Chamberlain, Joseph W., *Physics of the Aurora and Airglow*, International Geophysics Series vol. 2, Academic Press, New-York and London, 1961.
- Chamberlain, J.W., Polarization of the Airglow Emission $\lambda 6300$ in an Artificially Heated Ionosphere, *J. Geophys. Res.*, **79** (9), 1239-1241, 1974.
- F. Culot, Chantal Lathuillère, Jean Liliensten, The OI 630 and 557.7 nm dayglow measured by WINDII and modeled by TRANSCAR, *Ann. Geophys.*, **22**, 1-14, 2004
- F. Culot, C. Lathuillère and J. Liliensten, Influence of the geomagnetic activity on the OI 630.0 and 557.7 nm dayglow, **accepted** to *Geoph. Res. Lett.*, 2005
- Dufay, J., « Recherches sur la Lumière du Ciel Nocturne », ouvrage publié dans *Bull. Obs. Lyon*, **10**, n°9, 1-188, 1928.
- Dufay, J., Spectre, couleur et polarization de la lumière du ciel nocturne, *Journal de Physique et le Radium* [6], **10**, 219-240, 1929.
- Duncan, R.A., Polarization of the Red Oxygen auroral line, *Planet. Space Sci.*, **1**, 112-120, 1959.
- Fineschi, Silvano; degl'Innocenti, Egidio L. Electron impact polarization of atomic spectral lines. I - A general theoretical scheme. *Astrophysical Journal*, **392**, 337-352, 1992
- Ginsburg, V.L., Polarization of lines in the night sky luminescence spectrum and in the spectrum of northern lights, *Compte Rendus (Doklady) de l'Académie des Sciences de l'URSS*, **38**, 237-240, 1943.
- James, G. K.; Slevin, J. A.; Dziczek, D.; McConkey, J. W.; Bray, Igor. Polarization of Lyman- α radiation from atomic hydrogen excited by electron impact from near threshold to 1800 eV *Physical Review A*, Volume **57**, 1787-1797, 1998
- James, G. K.; Dziczek, D.; Slevin, J. A.; Bray, I. Polarization of Lyman- β radiation from atomic hydrogen excited by electron impact from near-threshold energy to 1000 eV. *Physical Review A*, **66**, 2002
- Karasheva, T.T. ; Otorbaev, D.K. ; Ochkin, V.N., Doppler broadening of spectral lines –electronically excited molecules in

- nonequilibrium plasma*, Lebedev Inst., vol. 157, pp. 124-186, Moscow Science Publisher, 1985 (in Russian).
- Kazantsev, S.; Mikhalev, A.; Petrashen, A., Spectropolarimetry of emission of the upper Atmospheric layers: III. Polarization of the radiation of optical flares in the emission of Night sky, *Optika y Spektroskopiya*, **86** (4), 559-563, 1999.
- Khvostikov, I.A., Polarization of the green line of the night sky (translated title), *Compt. Rend. Acad. Sci. URSS*, **21**, 322-324, 1938. (in Russian)
- Korobotsova, L.P., Characteristics of optical flares as observed in Yakoutsik – Inhomogeneities in Ionosphere, Yakutsk Publishing House, pp. 96-102, 1981. (in Russian)
- Lathuillère C., W. Gault, B. Lamballais, Y.J. Rochon and B. Solheim, Doppler Temperatures from OI airglow in the daylight thermosphere as observed by the WINDII interferometer on board the UARS satellite, *Annales Geophysicae*, **20**, 203-212, 2002
- Lilensten J. and P.L. Blelly, The TEC and F2 parameters as tracers of the ionosphere and thermosphere, *J. Atm. Sol. Ter. Phys.*, **64**, 775-793, 2002.
- Merabet, H.; Bailey, M.; Bruch, R.; Fursa, D. V.; Bray, I.; McConkey, J. W.; Hammond, P. Polarization study of the extreme-ultraviolet emission from helium following electron impact, *Physical Review A*, **60**, 1187-1198, 1999
- McFarlane, S. C. A Bethe theory for the polarization of impact radiation, *Journal of Physics B: Atomic, Molecular, and Optical Physics*, **7**, 1756-1771, 1974.
- Nadubovich, Y.A., Polarization effects during flares of optical emission, aurorae and twilights –Physical phenomena in atmosphere of high latitudes, Yakutsk Publishing House, pp. 40-49, 1977. (in Russian)
- Nicholas A.C., J.M. Picone, S.E. Thonnard, R.R. Meier, K. F. Dymond and D.P. Drob, A methodology for using optimal MSIS parameters retrieved from SSULI data to compute satellite drag on LEO objects, *JASTP*, 1317-1326, 2000
- Percival I.C. and M.J. Seaton. *Phil. Trans. Roy. Soc. London*, **113**, 251, 1958
- Prangé, R., D. Rego, L. Pallier, J. Connerney, P. Zarka, and J. Queinnee, Detailed study of FUV Jovian auroral features with the post-COSTAR HST faint object camera, *J. Geoph. Res.*, **103**, 20195-20216, 1998
- Rayleigh, Lord (Strutt, J.R.), Polarization of the night Sky, *Astrophys. J.*, **50**, 227-228, 1919
- Sandholt, P.E., C.J. Farrugia, J. Moen, Ø. Noraberg, B. Lybekk, T. Sten, and T.L. Hansen, A classification of dayside auroral forms and activities as a function of IMF orientation, *J. Geophys. Res.*, **103**, 23,325-23,345, 1998.
- Slipher, V.M., On the general auroral illumination of the sky and the wavelength of the chief auroral line, *Astrophys. J.*, **49**, 266-275, 1919.
- Vassy, Etienne, *Physique de l'atmosphère*, t. 1 "Phénomènes d'émission dans l'atmosphère", Gauthier-Villars, Paris, 1956 (réédité 1976).
- Wehner, R., Polarized-light navigation by insects, *Scientific American*, **235**(1), 106-115, 1976
- Witasse O., J. Lilensten, C. Lathuillere and P.L. Blelly, Modeling the OI 630.0 and 557.7 nm thermospheric dayglow during EISCAT-WINDII coordinated measurements, *J. Geophys. Res.*, **104**, 24639-24655, 1999.
- Yntema, L., On the brightness of the sky and total amount of starlight, *Publ. Ast. Groningen*, n°22, 1-55, 1909.
- Zeeman, P., On the Influence of Magnetism on the Nature of the Light Emitted by a Substance, *ApJ.*, **5**, 332, 1897
- Zöllner, F., Über das Spectrum des Nordlichts, *Pogg. Ann.*, **141**, 574-581, 1870.

Paper 5

Invited Talk and article

TRANS4: A new kinetic/fluid ionospheric code including protons and electrons

Simon, C., J. Lilensten, J. Moen, K. Oksavik and W.B. Denig, A new kinetic/fluid ionospheric code including protons and electrons: a comparison with experimental data, Invited talk presented at *Lars Vegard Symposium on Proton Aurorae*, University of Oslo, 13th and 14th oct. 2005.

A realistic modelling of the behaviour of the auroral ionospheric plasma remains a challenge. Within this framework, we present the description of a new kinetic/fluid dynamically multicoupled ionospheric model called TRANS4 able to perform simultaneous proton-electron precipitation computations. The motivation of the building of such a numerical code is clear: very few studies have been studying so far the contribution of both protons and electrons through a consistent modelling approach, and none have managed to describe the angular redistributions responsible for the redshifted Balmer emissions and its particular effect on ion densities and temperatures. After having explained the main characteristics of the model, we show here a preliminary comparison with a coordinated ground-based/satellite event where proton and electron precipitating fluxes were very intense. A brief geophysical overview of the event is also described. The effect on ion densities measured by the EISCAT Svalbard Radar (ESR) is emphasized though data processing has yet to be optimized. The computation of the Doppler profiles is still to be implemented in our code which will allow a direct comparison with optical data. Finally, the stress is laid on the future improvements of TRANS4 and the necessity of mounting in the near future coordinated experiments in the auroral ionosphere involving incoherent scatter radars and sounding rockets.

A preliminary work which led to the writing of an article:

Simon, C., J. Lilensten, J. Moen, J. M. Holmes, Y. Ogawa, K. Oksavik and W.B. Denig, TRANS4: a new electron/proton transport code – Application to the 22-01-2004 geophysical event, submitted to *Ann. Geophys.*, 2006.

Annales Geophysicae (2006) 0000: 0001–13
 SRef-ID: 1432-0576/ag/2006-0000-0001
 © European Geosciences Union 2006



TRANS4: a new electron/proton transport code – Application to the 22-01-2004 geophysical event

C. Simon¹, J. Lilensten¹, J. Moen^{2,3}, J. M. Holmes³, Y. Ogawa⁴, K. Oksavik⁵, and W. F. Denig^{6,7}

¹Laboratoire de Planétologie de Grenoble, Grenoble, France

²Plasma and Space Physics Group, Department of Physics, University of Oslo, Norway

³Department of Arctic Geophysics, University Centre in Svalbard (UNIS), Longyearbyen, Norway

⁴Solar-Terrestrial Environment Laboratory, Nagoya University, Japan

⁵The Johns Hopkins University Applied Physics Laboratory, Laurel, Maryland, USA

⁶Space Vehicles Directorate, Air Force Research Laboratory, Hanscom AFB, Mass., USA

⁷Now at National Geophysical Data Center, NOAA, Boulder, Colorado, USA

Abstract. We present for the first time a fully dynamically coupled numerical code for the ionosphere. It solves the fluid transport equations up to the 8th moment, and the kinetic equations for suprathermal particles. Its new feature is that for the latter, both electrons and protons are taken into account, while the preceding codes (TRANSCAR) only considered electrons.

This code is successfully applied to a multi-instrument data set from 22 January, 2004. We make use of measurements from the following set of instruments: the Defence Meteorological Satellite Program (DMSP) F-13 measures the precipitating particle fluxes, the EISCAT Svalbard Radar (ESR) measures the ionospheric parameters, the thermospheric oxygen lines are measured by an all sky camera and the H_{α} line is given by an Ebert-Fastie spectrometer located at Ny-Ålesund. We show that the code retrieves the H_{α} line with an excellent agreement, providing some hints on the physical state of the atmosphere. We also show the relative effects of protons and electrons to the electron densities, which are finally compared to the ESR measurements.

Keywords: 2407 Auroral ionosphere, 2455 Particle precipitation, 7859 Transport processes.

1 Introduction: on the importance of proton precipitation

1.1 Ground-based and rocket observations of hydrogen lines

In 1939 Lars Vegard at the University of Oslo identified for the first time in the auroral spectra the signature of the two first hydrogen Balmer emission lines, H_{α} (656.3 nm) and H_{β} (486.1 nm). For him, these spectroscopic signatures were due to “*showers of hydrogen or to a kind of ‘hydrogen-radiation’ coming from the sun*” (Vegard, 1939). A few years later

Correspondence to: J. Lilensten (jean.lilensten@obs.ujf-grenoble.fr)

in Tromsø, Vegard and Tønsgberg (1944) detected a Doppler broadening and a shift in the diffuse Balmer H_{β} lines.

Almost ten years after his first discovery, Vegard (1948) proposed the first interpretation and ascribes this shift to a Doppler effect due to neutralized protons precipitating down in the ionosphere, soon backed up by Gartlein (1950). High energy protons, originating from the magnetosphere and the solar-wind, precipitate along the geomagnetic field lines into the ionosphere where they encounter charge-exchange collisions, producing hydrogen atoms which in turn react with the ambient neutrals. Gartlein (1950, 1951) and then Meinel (1951) used high-resolution spectroscopy techniques to identify this shift in H_{α} , H_{β} and H_{γ} and confirm Vegard’s idea.

Definitive theoretical support was given experimentally to this interpretation by Chamberlain (1954*a, b*) and Omholt (1956). In 1965, Eather and Jacka (1966) made measurements in the magnetic horizontal and magnetic zenith directions: H_{β} appeared to be unshifted in the horizontal directions, while it experienced a 5 to 7-Å blue shift in the zenith direction, together with a significant red shift of the tail of the distribution.

Extending their study to the polarization of the Balmer lines as well: they found no polarization for H_{β} and the thermo-ionospheric lines N_2^+ (4709 Å) and OI (6300 Å) they observed on occasions, but they pointed out that one possible cause of this relative failure might have been the lack of spectral resolution.

Thenceforth, the interpretation of hydrogen lines seemed clearer: the blue shift is due to the incoming protons precipitating along the geomagnetic field lines, while the red-shifted wing of the distribution originates from the H atoms escaping upwards by magnetic reflection.

Eather then made a very interesting historical review on the successive steps that led to the understanding of hydrogen emission lines at the time (Eather, 1967*a*).

The zenith Doppler-shifted profiles indicate that field-aligned protons are travelling up to 400 km s⁻¹ in the upper atmosphere when precipitating.

With the development of specific interference filters with narrow pass bands (of a few Å), new high-resolution surveys were made from the 1970s onwards. Scanning spectrophotometers such as the Ebert-Fastie configurations coupled with photomultipliers were favoured in the following years (Deehr *et al.*, 1998). H_{β} lines have also received a wide interest as no contamination from overlapping emissions occur, contrary to H_{α} , which is subject to the influence of $OH(6-1)$ bands.

Several of these instruments dedicated to H_{α} and H_{β} lines have been installed at Svalbard situated in the northern hemispheric cusp region, in Longyearbyen and Ny-Ålesund, and have been the basis of many observational and modelling studies (Sigernes *et al.* [1994], Sigernes [1996]). These high-resolution instruments showed that little variation of the auroral brightness with latitude is observed in the line profiles, except in the daytime polar cleft where profiles usually exhibit narrower shapes (Lorentzen *et al.*, 1998). Removing twilight contamination has also been recently the subject of an important motivation (Robertson *et al.*, submitted) which allows to draw new perspectives on the study of H_{β} lines in conditions where the solar zenith angle is above 90° , a condition often encountered at Svalbard.

Simultaneously to these ground-based efforts, sounding rocket campaigns were launched to study the proton aurora through its Balmer emission lines (Søraas *et al.*, 1974): the interest of such in-situ campaigns lies indeed in a new parameter that can be obtained, *i.e.* the altitude emission line profiles over the large horizontal extent of the proton aurora. Since then, many rockets have been built and launched to map *in situ* the hydrogen lines (see Søraas *et al.*, 1994 and 1996). Coordinated experiments using rockets, ground-based spectrophotometers, incoherent scatter radars and orbiting satellites are the next step in the systematic study of proton events. In northern Norway, the Andøya Rocket Range near the Tromsø EISCAT UHF radar is particularly well designed for such ambitious experiments. The SvalRak launch site in Ny-Ålesund at Svalbard, with its proximity to the EISCAT Svalbard Radar, is a great alternative as well.

1.2 The proton transport modelling issue

After the first theoretical background for emission lines established by Chamberlain (1957) and Omholt (1956) who derived for the first time the expression for magnetic horizontal profiles, Eather and Burrows (1966) computed the hydrogen line profiles in a dipole field. They introduced the magnetic mirroring effect and showed that in this case a red shift component would be expected, soon thereafter to be clearly identified in the spectra.

The quantitative treatment of (H^+, H) precipitations began at the same time with Monte Carlo simulations (Davidson, 1965) which were able to characterize the transverse spreading of an initial proton beam due to the charge-exchange processes. Following Eather (1967a and 1967b) and Edgar *et al.* (1973, 1975), Henriksen (1979) assumed a plane parallel geometry together with forward scattering.

Henriksen used the continuous slowing-down approximation (CSDA) by introducing a continuous loss function $L(E)$ to account for the energy loss of a wide stream of precipitating protons. This approximation is justified by the low energetic losses encountered in a collision with a neutral in comparison to the initial energy of the precipitating particles.

Following these huge steps, proton transport modelling became a major concern of the community in the beginning of the 1980s, and notably when Jasperse and Basu (1982) described the spreading of a proton beam (first put forward by Johnstone [1972] and then Iglesias and Vondrak [1974]) in a single-constituent N_2 atmosphere due to the charge-exchange collisions $H^+ \leftrightarrow H$ (stripping and capture). They solved numerically Boltzmann's classical linear transport equation and computed a correction factor of $\varepsilon \approx 0.75$ due to the spreading effect accounting for the damping along the line of sight of the particle flux computed by the model. This damping factor is valid for an arc 200-km wide in latitude under roughly 300 km altitude where the excitation/ionisation reactions begin to play a significant role in the spreading of the initial beam.

Following this approach, Basu *et al.* (1987, 1990, 1993) and Strickland *et al.* (1993) designed step by step a proto-electron-hydrogen model based on kinetic transport equations through an enhanced numerical scheme. However still no angular redistributions due to either magnetic or collisional mechanisms could be taken into account, which made the comparison of spectroscopic measurements and the model impossible to perform. In 1993 and though assuming forward scattering, Shen (1993) in his PhD thesis introduced magnetic mirroring to account for the observed Doppler line red shifts but failed to add collisions. His 1st-order finite difference model was however not confirmed in the following years. Another track was explored at the same time using collision-by-collision degradation Monte Carlo schemes: Kozelov and Ivanov (1992, 1994) studying monoenergetic proton beams and then Lorentzen *et al.* (1998), which allowed dealing with the Doppler profiles and beam spreading effects. Contrary to the continuous slowing down approximations often used in kinetic transport modelling, the Monte Carlo methods assume discrete stochastic energy transfers ruled by probability laws. Thanks to this method, Synnes *et al.* (1998) calculated the hydrogen line profiles for an arbitrary angle to the magnetic field and the percentage of energetic neutral atoms created in an N_2 atmosphere through charge-exchange collisions.

In 1996, Galand *et al.* (1997, 1998) solved for the first time the dissipative proton-hydrogen kinetic Boltzmann equation. The resolution consisted of an analytical solution of the coupled (H^+, H) system thanks to the introduction of dissipative forces in the divergence term of the Boltzmann equations. In Galand and Liliensten (1996), the energy losses associated to these processes were shown to be continuous, which physically validated the entire approach.

A wealth of different experimental and theoretic studies have been carried out lately (Jasperse [1997], Lorentzen [2000], Lummerzheim and Galand [2001], Solomon [2001],

Chakrabarti *et al.* [2001], Fang *et al.* [2004], Hubert *et al.* [2004], Galand and Chakrabarti [2006]). A review of proton transport modelling was presented in a JGR special section and can be usefully consulted (Basu *et al.* [2001]). We propose in the following a new theoretical approach to couple the two codes.

1.3 TRANS4: coupling protons and electrons, a multi-coupled ionospheric model

Following the study of Moen *et al.* (1998), the motivation to build a self-consistent proton-electron model is clear: no tools have been developed so far which allowed to deal with protons and electrons at the same time. The need to study combined events has become of major importance to understand quantitatively the effects of energy injection from proton and electron origins in the upper atmospheres of planets. This new dynamism is not popping up today by mere coincidence: at the very moment when we have in action one of the most comprehensive networks ever available of ground-based and satellite instruments probing simultaneously the ionosphere, the theoretical models accounting for electrons on the one hand and energetic protons on the other hand are reaching a long-sought maturity.

The numerical model TRANS4 is based on two approaches. The first set of codes is TRANSCAR. It has been fully described in Lilensten and Blelly (2002). The model describes the upper atmosphere between 90 and 3000 km, assuming it is composed of six ions N_2^+ , O_2^+ , O^+ , N^+ , NO^+ and H^+ . TRANSCAR is a coupled kinetic/fluid model which solves sequentially the Boltzmann kinetic equation for suprathermal electrons and the Boltzmann momentum equations for the 6 ions listed above. Each part is linked with the other and updated through ionisation and heating rates (produced by the kinetic transport code), and through electronic density and temperature yielded by the one-dimensional time-dependent fluid transport model (Fig. 1).

For the ion production, two mechanisms are taken into account. First, the primary production is the ionisation of the thermosphere due to solar EUV (primary photoproduction) or to electron precipitation. The proton precipitation is taken into account through the Hardy statistical study (Hardy *et al.*, 1989) and not through a transport equation. Collisions of primary suprathermal electrons can ionize the neutral gas: secondary electrons and ions are then generated, which constitutes the secondary ion production. In the latter case, we use a physical description in terms of a kinetic transport of suprathermal electrons, given by the kinetic part of TRANSCAR (Lummerzheim and Lilensten [1994]).

Recent developments include the convection transport (Blelly *et al.*, 2005) and the double ionisation of atmospheric species (Simon *et al.*, 2005).

The second set of equations describes the kinetic transport of (H^+, H) particles. It is described in Galand and Lilensten (Galand) and Galand *et al.* (1997, 1998) who solved for the first time the dissipative proton-hydrogen kinetic Boltzmann equation. The resolution consists of an analytical solution of

the coupled (H^+, H) system, with the introduction of dissipative forces. It introduces a continuous loss function as an additional external force so that the set of coupled equations takes the form of a sparse matrix to invert. This code has been successfully tested using experiments (Lilensten and Galand, 1998). The computation of the hydrogen Balmer profiles is given in Lanchester *et al.* (2003) using cross sections of Basu *et al.* (1987) (excitation and ionisation cross sections), Kozelov & Ivanov (1992) (elastic cross sections), Van Zyl and Neumann (1980) and Yousif *et al.* (1986) (emission H_α and H_β cross sections through collisions of (H, H^+) with N_2 , O_2 and O).

The two approaches have never been coupled before. In the present work, the code resulting from this coupling is called TRANS4 as it includes four transports: fluid transport, convective transport, kinetic electron transport and kinetic proton transport.

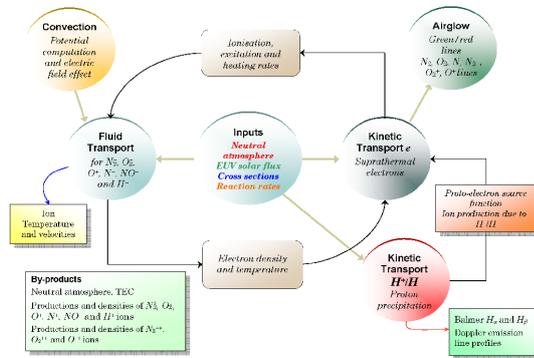


Fig. 1. – Architecture of TRANS4, a multicoupled proton-electron kinetic/fluid transport numerical model.

The TRANS4 numerical code is dynamically coupled. It means that proton precipitation is influencing the electron production and that in return, through the heating rates and ionization rates assigned to the fluid part, electron densities and temperatures modify the inputs of the model in a dynamical way (Fig. 1). It is not just stationary codes put together in a sequence, but a true coupling which evolves towards a global equilibrium through densities and temperatures.

One of the capabilities of the proton part is to include angular redistributions of magnetic and collisional origins, which are at the origin of the red-shifted component of the spectral Balmer lines. The ambition with the modelling is to obtain the emission Balmer line profiles in order to compare them directly with the spectrometer data.

2 Application to a geophysical event: 22-01-2004

2.1 General description

The case study occurred on the 22 January 2004 within half an hour about 08:45 UT at Svalbard, Norway ($78^\circ N$,

4

$16^\circ E$). Multiple instruments were observing the ionosphere simultaneously, which makes it a unique interval to study. This event was set up for the Svalbard EISCAT Rocket Study of Ion Outflows (SERSIO) rocket experiment contributed by Dartmouth College, Cornell University, Universities of Oslo and Svalbard (UNIS), Nagoya University, and University of Leicester (<http://www.dartmouth.edu/aurora/sersio.html>). The rocket was launched at 08:57 UT, roughly 10 minutes after a DMSP satellite pass that will be used in this paper, and therefore the rocket results will not be considered here.

This day was one of the most active ones in January 2004. The geophysical conditions were rated from active to very active at middle and high latitudes on Earth. Two C-class CMEs, hurled into space near sunspot 540 in the Earth's direction, were observed by SOHO in less than 48 hours prior to the measurements: a stream of fast solar-wind energetic particles ($\sim 700 \text{ km s}^{-1}$) then unleashed a geomagnetic storm which began to develop at 01:30 UT on 22-01-2004 (strong $B_z > 0$ of $\sim 20 \text{ nT}$).

Near the L1 point in the solar-wind upstream of the Earth, between 00:00 UT and 10:00 UT, the ACE spacecraft (Chiu *et al.* [1998], http://www.srl.caltech.edu/ACE/ASC/view_browser_data.html), showed interplanetary magnetic field conditions typical of lobe reconnection configurations, with B_z mostly positive and strong $B_y < 0$, which lasted for the entire period considered here.

According to ACE, the CME reached the spacecraft around 01:00 UT, when the solar-wind velocity jumped abruptly from 450 to nearly 700 km s^{-1} . For a velocity comprised between 400 and 700 km s^{-1} , it takes for the energetic particles between 30 minutes and one hour to reach the Earth. Several B_z -negative episodes appeared between 05:00 and 08:00 UT, lasting half an hour on average which may be correlated with variations in the ground-based magnetograms.

At 08:00 UT, a strong B_z -negative flow was recorded by ACE, which was responsible for the strong perturbation of the geomagnetic field seen in the Longyearbyen magnetogram one hour later. At the same time, all-sky cameras and spectrometers recorded large enhancements indicative of enhanced precipitation fluxes. The red and green emission line intensities increased by factors up to 3, a tendency observed as well for H_α spectra: one of the strongest proton showers in ten years was in action.

The ground-based magnetograms, recorded at Longyearbyen, Ny-Ålesund and Tromsø, and maintained at the Tromsø Geophysical Observatory (see <http://geo.phys.uit.no/geomag.html>), showed very sharp variations of all three magnetic components from 01:30 UT throughout the day with a very fast variation around 09:00 UT. The decimetric solar index $F_{10.7}$ equalled 130, a result of the significant increase in the solar activity from the beginning of the month. The magnetic planetary index showed huge variations over a few days before the event, and culminated to $A_p = 130$ at 09:00 UT with a daily average of 60.

Because the event was during the winter (the solar zenith angle was $\chi = 98^\circ$), barely no photoionisation was present, except at higher altitudes ($> 170 \text{ km}$). As its intensity is

very weak compared to the very intense particle precipitation, photoionisation is neglected in the following study.

2.2 Ionospheric measurements

2.2.1 DMSP F13 data

The Defense Meteorological Satellite Program (DMSP) operated by the Air Force is a programme involving numerous spacecraft orbiting the Earth since the 1960s in Sun-synchronous near-polar orbits. DMSP F13 was launched in 1995 in a 800 km-altitude orbit and carries among other instruments a precipitating electron and ion spectrometer SSI/4 sampling the range 30 eV–30 keV. DMSP F13 passed near the ESR 32m beam at 08:45:10 UT. The coordinates of the spacecraft were geographic latitude 77.5° and longitude 9.4° , *i.e.* more than 6° in longitude away from the ESR location, corresponding to roughly 150 km at this latitude when projected at an altitude of 100 km. Strictly speaking the DMSP precipitating fluxes are therefore not an exact measurement of the situation right over the ESR.

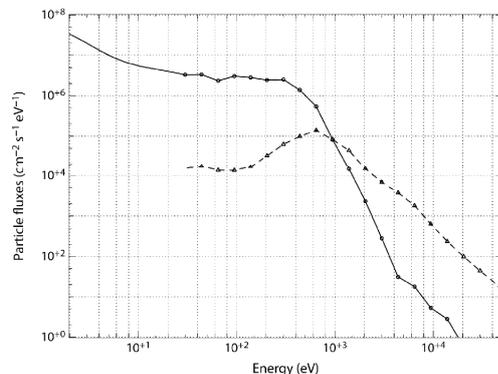


Fig. 2. – Differential particle fluxes in units of $\text{cm}^{-2} \text{s}^{-1} \text{eV}^{-1}$ versus energy (in keV) and averaged over 30 s between 08:44:55 and 08:45:25 UT as measured by DMSP. Black circles represent the particle electron flux distribution and black triangles the proton flux distribution. Though the proton fluxes at their peak are nearly 100 times less intense, their average energy is twice as high, *i.e.* 1 keV vs 400 eV for the electrons. Each spectrum is extrapolated at high and low energies (solid and dashed lines for electrons and protons respectively), where they show a behaviour very different from a Maxwellian.

The coordination period is very active. Protons have distributions centred at higher energies (around 2 keV) than for the electrons (centred around 500 eV), however with a lower intensity in general (Fig. 2).

We also notice that the electrons are distributed in a much narrower energy range than the protons, from a few tens of eV to 1 keV at the most, while the proton effective energy range spans from a few 100 eV to more than 10 keV. At low energies, the effect of the electrons is significant in comparison to the protons.

According to the beam spreading effect, the proton fluxes were averaged over 30 s centred on 08:45:10 UT (Fig. 2) and extrapolated at low and high energies, *i.e.* below 30 eV and above 30 keV. Below 30 eV, the shape of the electron spectrum is becoming strongly non-Maxwellian. We use here a shape for the extrapolation increasing slowly with the decreasing energies (of the form $\alpha e^{-\gamma}$) to reach a second maximum at 1 eV, a curve shape correlated by satellite and rocket measurements (Hardy *et al.* [1985], Winningham and Heikkila [1974]). This average over 30 s was also applied to the electronic distribution for the sake of consistency. This graph allows a much more accurate overview of the fluxes involved. We then see that two peaks are present in the electron flux distribution, a powerful one at very low energies (< 10 eV nearly reaching $10^8 \text{ cm}^{-2} \text{ s}^{-1} \text{ eV}^{-1}$), the other centred around 500 eV reaching $8 \times 10^7 \text{ cm}^{-2} \text{ s}^{-1} \text{ eV}^{-1}$. Above 10 keV however, the contribution of both ions and protons is 10^3 less than at their respective peaks and will be considered negligible in this study, which will limit the energy grid chosen for TRANS4. This assumption that very high-energy protons and electrons do not contribute significantly to the densities and temperatures is also confirmed by the model's computations, as no significant changes are encountered throughout a typical altitude profile.

2.2.2 ESR and optical observations

The EISCAT Svalbard Radar (ESR) is situated at (78.15° N , 16.03° E) geographic latitude/longitude. The ESR facility is composed of two antennae, one fixed dish 42-meter wide and aligned along the \mathbf{B} -field, the other antenna being steerable and 32 meters in width. The transmitter output can be routed to either antenna as required.

The original data recorded by the ESR run on 22-01-2004 show multiple occurrences of naturally enhanced ion acoustic lines (NEIAL) which corrupt the standard EISCAT analysis (using the GUIDAP software) in the topside ionosphere. The ESR data were therefore reprocessed with a technique expounded in Ogawa (2002).

The 32-meter steerable dish looked 70.8° of elevation to the west (261.1° of azimuth) of Longyearbyen. The coordination period is preceding a much active one where electron densities gradually build up to 10^{11} m^{-3} with a main peak situated around 300 km, then spreading higher up in altitudes. At the coordination point, the e^- ion temperatures are significantly high, with very high ion temperatures recorded below 400 km ($T_i \sim 3000 \text{ K}$) in comparison to the electron temperatures ($T_e \sim 1500 \text{ K}$ at 300 km altitude). High T_i can be interpreted as an evidence for the presence of strong electric fields in the lower ionosphere through frictional heating (see the review of Brekke and Kamide, 1996). These electric fields will be taken into account in our modelling.

We also checked the optical data at 08:44 UT from the all-sky imager in Ny-Ålesund (geographic 78.92° N , 11.95° E) monitoring the oxygen red line at 630.0 nm. When the image is projected to an assumed altitude of 250 km, the particle fluxes measured by DMSP are clearly representative of

the energy input at the origin of densities and temperatures for the volume measured by the Svalbard EISCAT radar at 600 km of altitude, with the radar beam and the satellite sensors making simultaneous measurements within a time span of 15 s around 08:45:10 UT.

2.2.3 The Ebert-Fastie spectrometer data: the H_α and H_β lines

Two Ebert-Fastie spectrometers were running at the time of the coordination, one located at Nordlysstasjonen (Adventdalen) near Longyearbyen, called Green, and the other situated at Ny-Ålesund called Black (Holmes *et al.*, 2006).

The focal length of the Green spectrometer is 1 m and it measures the auroral H_β line (486.1 nm). The Black spectrometer, of focal length 0.5 m, is calibrated for the H_α line (656.3 nm). Unfortunately, at the time of the coordination with DMSP, the sky was covered with a thin cloud layer, which smeared out the observed spectral lines. Moreover, the presence of a cloud cover precludes the possibility of comparing directly the measured and modelled intensities.

The H_α spectra have been averaged over 2 cycles of 1 minute each in order to improve the signal to noise ratio. At around 6560 Å, a broad peak corresponding to the H_α line is seen, testifying a slight Doppler blue shift in the line of 2 Å at the most, *i.e.* a line-of-sight velocity of 100 km s^{-1} . This shift is really weak in comparison to commonly observed blue shifts which can reach 500 km s^{-1} (Søråas *et al.*, 1994). This low value is an indication of the soft-energy proton precipitations encountered that day. Moreover an important red shift can be seen, extending almost 10 Å away from the centred wavelength λ_0 , which cannot be attributed only to instrumental broadening.

As the red line is situated far off the H_α line it is sometimes better to recalibrate manually the part of the spectrum around 6500 Å through $OH(6-1)$ rotational bands which show features at 6500, 6580 and 6600 Å. The OH contribution has been subtracted from the H_α line in the processed data by using a modelled OH spectrum based on Sigernes *et al.* (2003) and described in Holmes *et al.* (2006).

Due to the cloud coverage, the measured H_β line intensities along the line of sight were undistinguishable from the background noise.

2.3 Comparison between measurements and computations

2.3.1 Optical data: modelled parameterization of the impact of protons

H_α and H_β integrated zenith spectral profiles.

We investigate here the effects of the angular redistributions on the overall shape of the spectral lines. Several cases are studied, involving no angular redistributions, magnetic mirroring effects, angular redistributions due to elastic scattering, and combined magnetic/collisional angular redistributions.

Angular redistributions will affect the red-shifted part of the spectrum, while the blue-shifted peak's position will be unchanged, because it arises only from downward (H^+ , H) fluxes. However the peak intensities will change according to the upward supplementary contribution involved, observing a slight decrease as the impact of angular redistributions becomes more important. In the event we are studying, collisions will obviously play an important role since the energies involved in the main precipitation are mild, a sensitivity aspect already pointed out in previous works, either experimental (Gao *et al.*, 1990) or theoretical (Basu *et al.*, 1993; Galand *et al.*, 1998). Laboratory measurements on differential cross sections have shown the energy dependence of angular redistributions as well (Fleischmann *et al.* [1967], Newman *et al.* [1986]). The sensitivity that the model allows concerning these parameters are investigated through the use of different angular redistribution functions (Maxwellian and Rutherford cross section) for charge-changing reactions and elastic scattering. The magnetic mirroring issue is also addressed, though its contribution is expected to be weak for incoming proton fluxes with an isotropic angular distribution, which is assumed to be the case here (see the early work of Bagariatskii [1958a, 1958b] and the recent confirmation of Galand *et al.* [1998]).

Let us note that weak Doppler shifts, *i.e.* wavelengths close to the characteristic wavelength λ_0 , correspond to precipitating or up-flowing particles with a pitch angle near 90° : these particles arrive at nearly right angles to the magnetic field. Thus, at a given pitch angle a particle of lower energy will correspond to a fainter Doppler shift.

The input proton fluxes are taken from DMSP at 08:45 UT on 22-01-2004. They have an average energy of 1 keV with a flux of $1.5 \text{ erg cm}^{-2} \text{ s}^{-1}$, *i.e.* $9.34 \times 10^{11} \text{ eV cm}^{-2} \text{ s}^{-1}$.

The neutral atmosphere is given by the model MSIS-90 (Hedin, 1991) and O densities are divided by 2 to be more representative of a high latitude thermosphere (Lilensten *et al.*, 1996).

Without angular redistribution of magnetic and collisional origin.

The spectrum, plotted in Fig. 3 (a), is quite simple: no red shift is observed, while the blue-shifted peak is situated around 2.8 \AA short of the centred line with an intensity reaching $2 \times 10^6 \text{ cm}^{-2} \text{ s}^{-1} \text{ \AA}^{-1}$. This blue shift corresponds to a parallel velocity of 127 km s^{-1} , which is very slow in comparison to Doppler shifts commonly measured in proton events, reaching velocities up to three times as large (*e.g.* Søråas *et al.* [1974], Lanchester *et al.* [2003]). This first comment is consistent with the spectral shifts recorded from the ground in Ny-Ålesund. Incoming protons of low mean energies ($\sim 1 \text{ keV}$) precipitating in the topside ionosphere are responsible for such slight Doppler shifts, as already shown by the DMSP differential particle fluxes.

As the proton fluxes are contributing on average less than the hydrogen fluxes to the overall emission rate, they are only responsible for 5% of the total emission rate at the peak around 6560 \AA . However this tendency inclines to diminish

at large Doppler shifts (30 \AA) where the proton fluxes become larger than the hydrogen ones, resulting in a majority contribution of precipitating H^+ that have then been neutralized. This phenomenon comes intrinsically from the distribution of equilibrium charge fractions for H^+ and H , which states the proportion of each charge state as a function of energy. They are simply expressed as the ratio between electron capture cross sections (respectively ionization-stripping) and the total charge-changing collision cross section for each species N_2 , O_2 or O (see *e.g.* Rees, 1982).

At low energy, hydrogen atoms will be dominating the composition, while protons will be the major species above a few tens of keV. This preliminary remark will remain true for the following paragraphs involving angular redistributions and will be examined in the case of collisional angular redistributions.

Impact of magnetic mirroring on spectral line profiles and altitude of mirror point.

The magnetic mirroring effect, by reflecting charged particles upwards, enables the spectral distribution to get a red-shifted tail (Fig. 1 (b)). The computed intensity drops sharply near the centred wavelength (around $10^3 \text{ cm}^{-2} \text{ s}^{-1} \text{ \AA}^{-1}$), and then, more gradually, extends further down away from it. If fitted by a Gaussian-type distribution following the method explained in Lummerzheim and Galand (2001), the full width at half maximum on the red side reaches 2 \AA , a value inside the instrumental broadening, while on the blue side, it climbs up to 10 \AA . When we look at the spectra recorded at Ny-Ålesund for our investigation event, we can see clearly the red wing of the line, which is almost symmetric with a 9-\AA wide red tail at half maximum. This confirms that the magnetic mirroring cannot explain solely the shapes observed for the H_α line, a remark to be linked to the region where the magnetic mirroring becomes effective: it mainly acts at higher altitudes, converting particles having high pitch angles to particles with lower pitch angles, hence the change of slope in the spectral distribution on the red side (Lorentzen *et al.*, 1998; Kozelov, 1993).

The upward fluxes are generated by magnetic mirroring at higher altitudes, typically in the upper F_1 region, and for 10 keV protons are well above the energy deposition region usually situated between 110 and 130 km , where the main blue-shifted peak of the Balmer lines occurs induced by downward fluxes. In our case, the mean energies involved are much smaller (1 keV with a large high energy tail as shown in the DMSP data) and the energy deposition peak is occurring between 140 and 150 km , making it more sensitive to magnetic mirroring effects. For an isotropic initial distribution, the penetration depth for 1 keV protons precipitating into the ionosphere is typically around 150 km , which coincides with the altitude computed by TRANS4 where magnetic mirroring begins to act. The effect of upward fluxes arising from magnetic reflection becomes significant at the deposition peak and makes the red-shifted tail grow with increasing altitude (Fig. 4). From 140 km up to 600 km the magnetic mirroring populates preferentially the higher wavelengths,

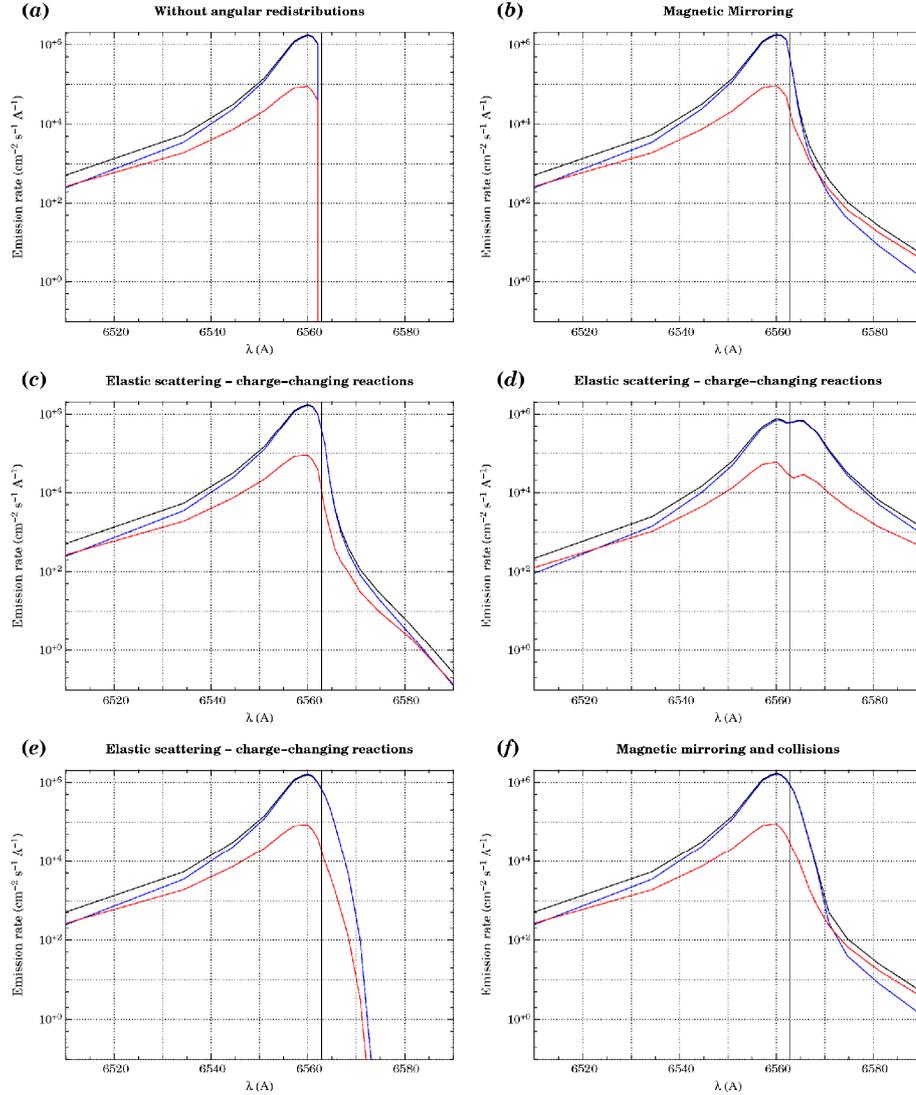


Fig. 3. $-H_{\alpha}$ spectra computed by TRANS4 with initial DMSP proton fluxes, drawn together with the centred wavelength $\lambda_0 = 6562.8 \text{ \AA}$. The overall integrated emission rate is shown in black, and the contribution from the hydrogen flux and the proton fluxes are shown in blue and red, respectively. In panel (a), the results without angular redistributions of magnetic or collisional origins are shown. Only a 3- \AA blue-shifted peak is seen. Panel (b): with magnetic mirroring, a narrow red-shifted tail appears which extends to a few Angströms off the centred wavelength. Panels (c) and (d): collisional angular redistributions make the line more symmetric. Here different configurations are shown for both phase functions of elastic and charge-changing scattering: Maxwellians with successively $\sigma = 0.05$ (c) and $\sigma = 0.20$ (d), and the more accurate approach of Rutherford (e). The spreading of the line with increasing angular scattering is clearly visible. Panel (f): combined contributions for magnetic mirroring effects and elastic scattering using Rutherford formula.

energy occur less often because of the decreasing atmospheric density.

Soft protons are more likely to be sensitive to collisions; hence the choice of the phase function is a crucial issue. If we increase the number of angles accessible for a given incoming particle colliding with a neutral species, both proton and hydrogen upward fluxes generated will be strongly enhanced, especially since collision cross sections (and charge-changing reaction cross sections even more so) remain high under 10 keV.

Forward scattering is assumed for particles having energies above 1 keV, but this limit might be increased to higher energies depending on the event chosen. This physical limit will modulate the extent of the red wing to higher energies as shown in Fig. 5 for a threshold of 10 keV instead. The blue part of the spectrum is unchanged but the red wing is more raised which confirms the sensitivity of the results to the Rutherford parameter. Including redistributions at high energies can have a dramatic effect and may change the position of the peak in the case of high-energy proton precipitation. This was already emphasized in Lanchester *et al.* (2003) in the case of H_β , and we can now extend these conclusions to H_α .

Combined effects and detail of the impact of (H, H^+) fluxes on the overall distribution.

We now compare the spectral data with the model's outputs including the magnetic mirroring and Rutherford collisional angular redistributions. These results are shown in Fig. 6. To take into account the spectrometer's resolution, the profiles produced by the models are convolved with the instrumental function which is taken as a triangle function with different widths at half maximum, spanning from the nominal FWHM (around 3 Å) to larger values (8 Å). By degrading artificially the resolution of the instrument, we show that the model can reproduce the measurements very well.

In Fig. 6, we present the first comparison between the model, drawn in black solid line, including angular redistributions (mirroring and Rutherford scattering applied below 1 keV) and the spectral intensity recorded by the Black spectrometer (noisy curve). The model is convolved with the instrumental function of successive FWHM equal to 2.8 Å (blue line) and to 8 Å (red line). The narrow nominal profile of the spectrometer cannot explain by itself the differences observed, and we have to increase substantially the width of the instrumental function to get profiles similar to those recorded by the instrument. We have degraded the resolution of the instrument, which can be interpreted as an estimate of the meteorological impact on the atmosphere, which reflects the effect of the thin cloud-coverage on the hydrogen lines.

The main results of our approach are illustrated in Fig. 7, where emission rates and volume emission rates for given altitudes are plotted.

Magnetic mirroring becomes important at higher altitudes and is particularly significant at high Doppler shifts, while the angular distributions due to elastic and charge-changing

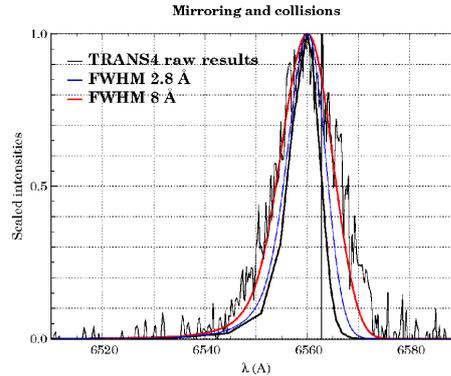


Fig. 6. – First out-of-the-box comparison between spectral data (discontinuous line) and the model (black line). A triangle function of FWHM = 2.8 Å was first chosen for the instrumental function, which was then convolved with the raw results from the model: the resulting intensity is drawn in blue. When using a triangle function of FWHM = 8 Å, the model yields the resulting line intensity drawn in red, which matches the measurements quite well.

reactions reach their full power at lower altitudes and for red shifts comprised between 1 and 8 Å.

The ratios of emission rates drawn in Fig. 7 (right) are illustrating this double impact and can be seen as a mix of magnetic and collisional redistributions. The red wing reveals a greater impact of hydrogen atoms at lower red shifts like in the Rutherford scattering case. For higher red shifts, the protons play the major role in the emission, matching the conclusions that were drawn in the magnetic mirroring case.

Results for H_β .

Following the validation of our approach in terms of angular redistributions and spectral widths, we show in Fig. 8 the emission rates expressed in $cm^{-2} s^{-1} \text{Å}^{-1}$ for H_β . The overall intensity is smaller than for H_α by a factor 2, which is in consistent with the preliminary modelling of Galand (1996). Both collisions and magnetic mirroring are easily seen in the plot, the former at lower red shifts the latter at the higher ones.

2.3.2 Comparison to radar data and validation of the approach

ESR measurements.

Fig. 9 shows the electron density height profiles produced by the model in the case of combined electron-proton precipitation versus the electron densities recorded by ESR and averaged here over 20 minutes of sampling. This mean value is then representative of the ionospheric conditions around the coordination time at 08:45 UT while the DMSP satellite was at 800 km. The ESR error bars are drawn at altitudes higher than 300 km.

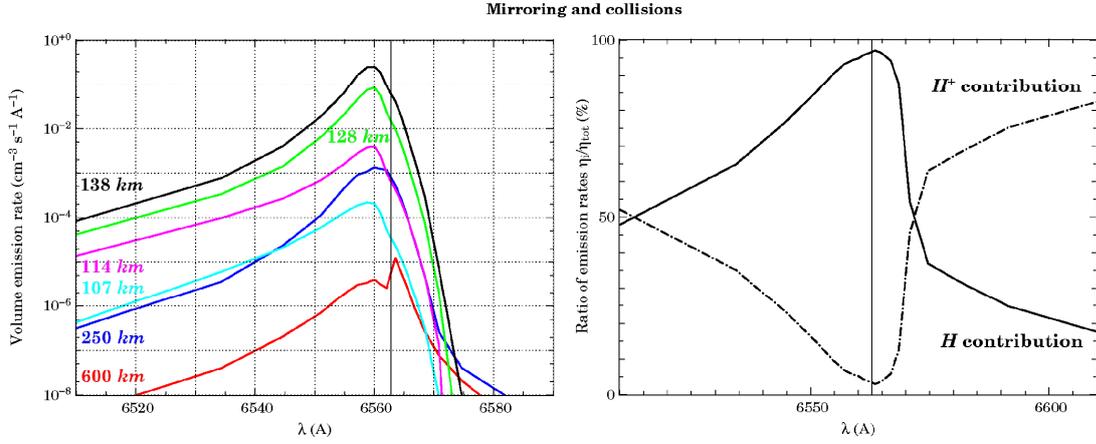


Fig. 7. – H_{α} spectra yielded by TRANS4 when taking into account angular redistributions of both magnetic and collisional origins under Rutherford’s approximation for the phase function. The left panel is the detail of altitude contributions to the total volume emission rate. The same colour code as in Fig. 4 is used: 107 km (cyan), 114 km (magenta), 128 km (green), 138 km (black), 250 km (blue) and 600 km (red). In the right panel, the ratio of the contributions of proton (dash-dot) and hydrogen (solid line) to the total H_{α} emission rate is plotted.

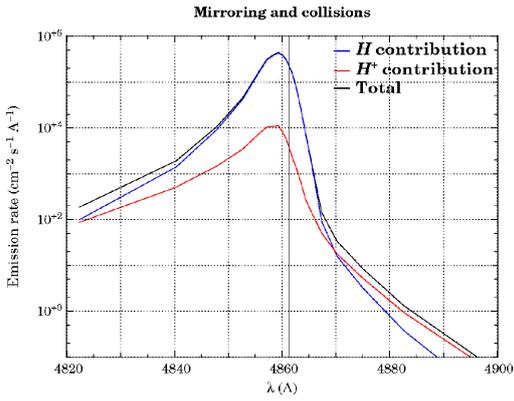


Fig. 8. – H_{β} emission rates including angular redistributions of magnetic and collisional origins. In blue the hydrogen contribution to the emission is plotted, and in red the proton contribution.

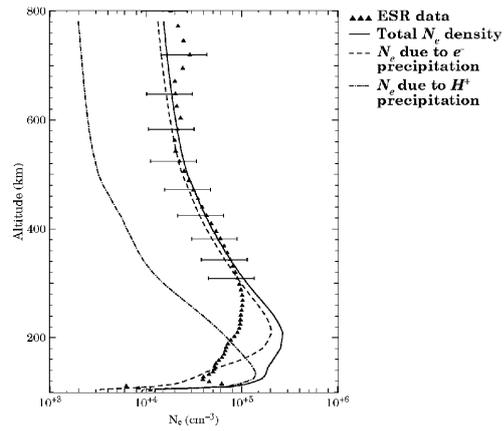


Fig. 9. – Contribution of precipitating electrons (dash line) and of proton precipitations (dash-dotted line) to the total electron density (black solid line). The model’s outputs are drawn versus the ESR averaged measured electron densities, which are indicated in black triangles.

The temperatures (not shown here) exhibit a typical electric-field event behaviour: the ion temperature reaches a value of 3400 K at 180 km which is larger than the electron temperature (1700 K). This effect implies modifications in the ion composition (Lathuillère and Kofman, 2006), which makes it meaningless to compare the IS temperatures with TRANS4 outputs. However, the electron densities are deduced from fitting of the incoherent scatter spectrum and are thus useable for our comparison. Ion velocities obtained by the ESR 32 m dish were -600 m/s at 220 km altitude at 08:45 UT. The high ion velocity indicates that a strong eastward flow at a speed of 1500 m/s ($600/\sin 24^\circ$) occurred

near Longyearbyen. The $E \times B$ drift velocities derived from the ESR measurements correspond to a first estimate of the electric field of 60-80 mV/m (not shown here). When comparing the direct model’s outputs with the incoherent scatter temperature, we can refine this value to 65 mV/m, which was used in the density computations. Because of the strong electric field encountered, we expect an electron density depletion in the F region ionosphere compared to the case where no electric field is present, and the effect is also in-

cluded in the model.

Though below 250 km the computed densities are larger than the measured densities by a factor 3, a perfect match is found between 300 and 800 km. This difference is no surprise. As emphasized in the description of the data, we expect the model to be accurate ideally in the range 600-800 km because the electron and proton fluxes recorded by DMSP are representative of the region probed by EISCAT at these altitudes. Below that and especially in the first few hundred kilometres along the ESR beam, we are geographically and magnetically far from the conditions traversed by the satellite: conditions were quite different from one probed region to another. In the all-sky cameras images (not shown here), the region probed at 100 km by the ESR beam was probably much quieter than the upper regions which were also further away from the radar site in the horizontal direction. This is also confirmed by the model and, as shown in Fig. 9, a factor 3 in electron densities is required at low altitude to account for the data.

3 Conclusion

This work presents the first coupled numerical ionospheric code that dynamically solves the fluid, electron and proton kinetic equations. It allows retrieving macroscopic parameters such as the electron density or Balmer hydrogen emission lines as well as microscopic parameters such as the distribution function and electron fluxes. We have shown the results compared to a whole set of experimental data during a coordinated experiment (DMSP, ESR, spectrometers and all-sky cameras) situated in the cusp region. This allowed us to show the respective effects of collisions and magnetic mirroring on the proton precipitation. We also showed that, in this event, protons were responsible for the low-altitude density peak and contributed up to 15% of the total ionisation above an altitude of 200 km.

Acknowledgements. The authors would like to thank Fred Sigernes and Dag Lorentzen (University Centre on Svalbard, Norway) as well as Frédéric Pitout (LPG, France) for their fruitful comments and discussions throughout the preparing of this work and the interpretation of data. We are indebted to the director and staff of EISCAT for operating the facility and supplying the data. EISCAT is an International Association supported by Finland (SA), France (CNRS), Germany (MPG), Japan (NIPR), Norway (NFR), Sweden (NFR) and the United Kingdom (PPARC). Financial support has been provided by the Norwegian Research Council and AFOSR task 2311A5.

References

Bagariatskii, B. A., The Influence of Proton Spiral Trajectories on the Doppler Profile of Auroral Hydrogen Lines., *Sov. Astron.*, **2**, 87, 1958a.
 Bagariatskii, B. A., The Zenith Angle Distribution Function of Auroral Protons., *Sov. Astron.*, **2**, 453, 1958b.
 Basu, B., J.R. Jasperse, R.M. Robinson, R.R. Vondrak and D.S. Evans, Linear transport theory of auroral proton precip-

itation: a comparison with observations, *J. Geophys. Res.*, **92**, 5920, 1987.

Basu, B., J.R. Jasperse and N.J. Grossbard, A numerical solution of the coupled proton-H atom transport equations for the proton aurora, *J. Geophys. Res.*, **95**, 19069, 1990.

Basu, B., J.R. Jasperse, D.J. Strickland and R.E. Daniell, Transport-theoretic model for the electron-proton-hydrogen atom aurora, 1.Theory, *J. Geophys. Res.*, **98**, 21017, 1993.

Basu, B., D.T. Decker and J.R. Jasperse, Proton transport model: a review, *J. Geophys. Res.*, **106**, No.A1, 93-105, 2001.

Blelly, P.-L., C. Lathuillère, B. Emery, J. Liliensten, J. Fontanari and D. Alcaydé, An extended TRANSCAR model including ionospheric convection: simulation of EISCAT observations using inputs from AMIE, *Ann. Geophys.*, **23**, 419-431, 2005.

Brekke, A. & Y. Kamide, On the relationship between Joule heating and frictional heating in the polar ionosphere, *J. Atmos. Terr. Phys.*, **58**, No. 1-4, 139-143, 1996.

Chakrabarti, S., D. Pallamraju, J. Baumgardner, and J. Vaillancourt, HiTIES: A high throughput imaging echelle spectrograph for ground-based visible airglow and auroral studies, *J. Geophys. Res.*, **106**, 30337-30348, 2001.

Chamberlain, J. W., The Excitation of Hydrogen in Aurorae, *Astrophys. J.*, **120**, 360-366, 1954a.

Chamberlain, J. W., On the Production of Auroral Arcs by Incident Protons, *Astrophys. J.*, **120**, 566-571, 1954b.

Chamberlain, J. W., On a Possible Velocity Dispersion of Auroral Protons, *Astrophys. J.*, **126**, 245-252, 1957.

Chiu, M. C., Von-Mehlem, U. I., Willey, C. E., Betenbaugh, T. M., Maynard, J. J., Krein, J. A., Conde, R. F., Gray, W. T., Hunt Jr., J. W., Mosher, L. E., McCullough, M. G., Panneton, P. E., Staiger, J. P., and Rodberg, E. H.: ACE spacecraft, *Space Sci. Rev.*, **86**, 257-284, 1998.

Davidson, G. T., Expected spatial distribution of low-energy protons precipitated in the auroral zones, *J. Geophys. Res.*, **70**, 1061, 1965.

Deehr, C.S., D.A. Lorentzen, F. Sigernes, and R.W Smith, Dayside auroral hydrogen emission as an aeronomic signature of magnetospheric boundary layer processes, *Geophys. Res. Lett.*, **25**, No. 12, 2111-2114, 1998.

Eather, R. H., and K. M. Burrows, Excitation and ionization by auroral protons, *Aust. J. Phys.*, **19**, 309-322, 1966.

Eather, R. H., and F. Jacka, Auroral hydrogen emission, *Aust. J. Phys.*, **19**, 241-274, 1966.

Eather, R. H., Auroral proton precipitation and hydrogen emissions, *Rev. Geophys.*, **5**, 207, 1967a.

Edgar, B.C., W.T. Miles and A.E.S. Green, Energy deposition of protons in molecular nitrogen and applications to proton auroral phenomena, *J. Geophys. Res.*, **78**, 6595, 1973.

Edgar, B.C., H.S. Porter and A.E.S. Green, Proton energy deposition in molecular and atomic oxygen and applications to the polar cap, *Planet. Space Sci.*, **23**, 787, 1975.

Fang, X., M.W. Liemohn, J.U. Kozyra, S.C. Solomon, Quantification of the spreading effect of auroral proton precipitation, *J. Geophys. Res.*, **109**, A04309, doi:10.1029/2003JA010119, 2004.

- Fleischmann, H. H., R. A. Young, and J. W. McGowan, Differential charge-transfer cross section for collisions of H^+ on O_2 , *Phys. Rev.*, **153**, 19-22, 1967.
- Galand, M., Transport des protons dans l'ionosphère aurorale, Thèse de l'Université Joseph Fourier, dir. J. Lilensten, Grenoble, 1996.
- Galand, M., J. Lilensten, W. Kofman and R.B. Sidje, Proton transport in the ionosphere, 1: multi-stream approach of the transport equations, *J. Geophys. Res.*, **102**, 22,261-22,272, 1997.
- Galand, M., J. Lilensten, W. Kofman and D. Lummerzheim, Proton transport model in the ionosphere: 2. Influence of magnetic mirroring and collisions on the angular redistribution in a proton beam, *Ann. Geophys.*, **16**, 1308-1321, 1998.
- Galand, M., Introduction to the special section: proton precipitation into the atmosphere, *J. Geophys. Res.*, **106**, 1-6, 2001.
- Galand, M., and S. Chakrabarti, Proton aurora observed from the ground, *J. Atmos. Terr. Phys.*, in press, 2006.
- Gao, R. S., L. K. Johnson, C. L. Hakes, K. A. Smith, and R. F. Stebbings, Collisions of kilo-electron-volt H^+ and He^+ with molecules at small angles - Absolute differential cross sections for charge transfer, *Phys. Rev. A*, **41**, 5929-5933, 1990.
- Gartlein, C. W., Auroral spectra showing broad hydrogen lines, *Trans. Am. Geophys. Union*, **31**, 18-20, 1950.
- Gartlein, C. W., Protons and the aurora, *Phys. Rev.*, **81**, 463-464, 1951.
- Hardy D.A., M.S. Gussenhoven and E. Holeman, A statistical model of auroral electron precipitation., *J. Geophys. Res.*, 90, A5, 4229-4248, 1985.
- Hardy D.A., M.S. Gussenhoven and D. Brautigam, A statistical model of auroral ion precipitation, *J. Geophys. Res.*, **94**, 370, 1989.
- Hedin, A. E., Extension of the MSIS thermosphere model into the middle and lower atmosphere, *J. Geophys. Res.*, **96**, 1159-1172, 1991.
- Henriksen, K., Variations of proton energy and pitch angle spectra in the upper atmosphere, *J. Atmos. Terr. Phys.*, **41**, 633-641, 1979.
- Holmes, J. M., B. Kozelov, F. Sigernes, D. A. Lorentzen, C. S. Deehr, Dual site observations of dayside Doppler-shifted hydrogen profiles: preliminary results, *Can. J. Phys.*, in press, 2006.
- Hubert, B., J.-C. Gérard, S. A. Fuselier, S. B. Mende, and J. L. Burch, Proton precipitation during transpolar auroral events: Observations with the IMAGE-FUV imagers, *J. Geophys. Res. (Space Phys.)*, **109**, A06204, doi:10.1029/2003JA010136, 2004.
- Iglesias, G., and R.R. Vondrak, Atmospheric spreading of protons in auroral arcs, *J. Geophys. Res.*, 79, No. 1, 280-282, 1974.
- Jasperse, J.R. and B. Basu, Transport theoretic solutions for auroral proton and H atom fluxes and related quantities, *J. Geophys. Res.*, **87**, 811, 1982.
- Jasperse, J.R., Transport theoretic solutions for the beam-spreading effect in the proton-hydrogen aurora, *Geophys. Res. Lett.*, **24**, No. 11, 1415-1418, 1997.
- Johnstone, A. D., The spreading of a proton beam in the atmosphere, *Planet. Space Sci.*, **20**, 295-297, 1972.
- Kozelov, B. V., Influence of the dipolar magnetic field on transport of proton-H atom fluxes in the atmosphere, *Ann. Geophys.*, **11**, 697-704, 1993.
- Kozelov, B. V., V. E. Ivanov, Monte Carlo calculation of proton-hydrogen atom transport in N_2 , *Planet. Space Sci.*, **40**, No.11, 1503-1511, 1992.
- Kozelov, B. V., V. E. Ivanov, Effective energy loss per electron-ion pair in proton aurora, *Ann. Geophys.*, **12**, No.10-11, 1071-1075, 1994.
- Lanchester, B.S., M. Galand, S.C. Robertson, M.H. Rees, D. Lummerzheim, I. Furniss, L.M. Peticolas, H.U. Frey, J. Baumgardner, and M. Mendillo, High resolution measurements and modeling of auroral hydrogen emission line profiles, *Ann. Geophys.*, **21**, 1629-1643, 2003.
- Lathuillère, C., W. Kofman, A short review on the F1-region ion composition in the auroral and polar ionosphere, *Adv. Space Res.*, **37**, 913-918, 2006.
- Lilensten J., P-L. Blelly, W. Kofman and D. Alcaydé, Auroral ionospheric conductivities: a comparison between experiment and modeling, and theoretical f_{107} dependant model for EISCAT and ESR, *Ann. Geophys.*, **14**, 1297-1304, 1996.
- Lilensten, J. & M. Galand, Proton/electron precipitation effects on the electron production and density above EISCAT and ESR, *Ann. Geophys.*, **16**, 1299-1307, 1998.
- Lilensten, J. and P-L. Blelly, The TEC and F2 parameters as tracers of the ionosphere and thermosphere, *J. Atmos. Solar & Terrest. Phys.*, **64**, 775-793, 2002.
- Lorentzen, D. A., F. Sigernes, and C.S. Deehr, Modeling and observations of dayside auroral hydrogen emission Doppler profiles, *J. Geophys. Res.*, **103**, No. A8, 17,479-17,488, 1998.
- Lorentzen, D. A., Latitudinal and longitudinal dispersion of energetic auroral protons, *Ann. Geophys.*, **18**, 81-89, 2000.
- Lummerzheim, D., *Electron transport and optical emissions in the aurora*, PhD Thesis, University of Alaska, Fairbanks, 1987.
- Lummerzheim, D., and M. Galand, The profile of the hydrogen H_β emission line in proton aurora, *J. Geophys. Res.*, **106**, 23-31, 2001.
- Lummerzheim, D., and J. Lilensten, Electron transport and energy degradation in the ionosphere: evaluation of the numerical solution, comparison with laboratory experiments and auroral observations, *Ann. Geophys.*, **12**, 1039-1051, 1994.
- Meinel, A.B., The spectrum of the airglow and the aurora, *Rep. Prog. Phys.*, **14**, 121-146, 1951.
- Moen, J., D. A. Lorentzen, and F. Sigernes, Dayside moving auroral forms and bursty proton auroral events in relation to particle boundaries observed by NOAA 12, *J. Geophys. Res.*, 103, 14,854-14,864, 1998.

- Newman, J. H., Y. S. Chen, K. A. Smith, and R. F. Stebbings, Differential cross sections for scattering of 0.5-, 1.5-, and 5.0-keV hydrogen atoms by He, H₂, N₂, and O₂, *J. Geophys. Res.*, **91**, 8947-8954, 1986.
- Ogawa, Y., Generation Mechanisms of Ion Upflow in the Polar Topside Ionosphere, PhD Thesis, Nagoya University, Japan, 2002.
- Omholt, A., Characteristics of auroras caused by angular dispersed protons, *J. Atmos. Terr. Phys.*, **9**, 18-27, 1956.
- Rees, M.H., On the interaction of auroral protons with the Earth's atmosphere, *Planet. Space Sci.*, **30**, No.5, 463-472, 1982.
- Robertson, S. C., B. S. Lanchester, M. Galand, D. Lummerzheim, A. B. Stockton-Chalk, A. D. Aylward, I. Furniss, and J. Baumgardner, First ground-based optical observation of H_β Doppler profiles near local noon in the cusp, submitted to *Ann. Geophys.*, 2006.
- Shen, D., *Proton transport and auroral optical emissions*, Ph.D. thesis, Geophysical Institute, University of Alaska, Fairbanks, 1993.
- Sigernes, F., Estimation of initial auroral proton energy fluxes from Doppler profiles, *J. Atmos. Terr. Phys.*, **58**, 1871-1883, 1996.
- Sigernes, F., D. A. Lorentzen, C. S. Deehr, and K. Henriksen, Calculation of auroral Balmer volume emission height profiles in the upper atmosphere, *J. Atmos. Terr. Phys.*, **56**, 503-508, 1994.
- Sigernes, F., N. Shumilov, C. S. Deehr, K. P. Nielsen, T. Svenøe, and O. Havnes, The Hydroxyl rotational temperature record from the Auroral Station in Adventdalen, Svalbard (78° N, 15° E), *J. Geophys. Res.*, 108 (A9), 1342, doi:10.1029/2001JA009023, 2003.
- Simon, C., J. Lilensten, O. Dutuit, R. Thissen, O. Witasse, C. Alcaraz and H. Solid-Lose, Prediction and modelling of doubly-charged ions in the Earth's upper atmosphere, *Ann. Geophys.*, **23**, 781-797, 2005.
- Solomon, S. C., Auroral particle transport using Monte Carlo and hybrid methods, *J. Geophys. Res.*, **106**, 107-116, 2001.
- Strickland, D.J., R.E. Daniell Jr., J.R. Jasperse and B. Basu, Transport theoretic model for the electron-proton-hydrogen atom aurora, *J. Geophys. Res.*, **98**, No. A12, 21,533-21,548, 1993.
- Synnes, S. A., F. Søråas, and J. P. Hansen: Monte-Carlo simulations of proton aurora, *J. Atmos. Sol. Terr. Phys.*, **60**, 1695-1705, 1998.
- Søråas, F., H.R. Lindalen, K. Måseide, A. Egeland, T.A. Sten, and D.S. Evans, Proton precipitation and the H_β emission in a postbreakup auroral glow, *J. Geophys. Res.*, **79**, No. 13, 1851-1859, 1974.
- Søråas, F., K. Måseide, P. Torheim, and K. Aarsnes, Doppler-shifted auroral H_β emission: a comparison between observations and calculations, *Ann. Geophys.*, **12**, 1052-1064, 1994.
- Søråas, F., and K. Aarsnes, Observations of ENA in and near a proton arc, *Geophys. Res. Lett.*, **23**, No. 21, 2959-2962, 1996.
- Van Zyl, B., and H. Neumann, H_α and H_β emission cross sections for low-energy H and H⁺ collisions with N₂ and O₂, *J. Geophys. Res.*, **85**, 6006, 1980.
- Vegard, L., Hydrogen showers in the auroral region, *Nature*, **144**, 1089, 1939.
- Vegard L. and E. Tønsberg, Results from auroral spectrograms obtained at Tromsø observatory during the winters 1941-1942 and 1942-1943, *Geophys. Publik.*, **16**, No. 2, 1-12, 1944.
- Vegard, L., Emission spectra of night sky and aurora, *Report of the Gassiot Committee*, **82**, The Physical Society London, 1948.
- Winningham, J. D., and W. J. Heikkila, Polar cap auroral electron fluxes observed with Isis 1, *J. Geophys. Res.*, **79**, No. 7, 949-957, 1974.
- Yousif, F. B., J. Geddes, and H. B. Gilbody, Balmer alpha emission in collisions of H, H⁺, H₂⁺ and H₃⁺ with N₂, O₂ and H₂O, *J. Phys. B: At. Mol. Phys.*, **19**, 217-231, 1986.

Références scéniques

Pour connaître le chemin devant toi, demande à ceux qui en reviennent.
To know the road ahead, ask those coming back. **Proverbe chinois.**

- Ahmad, M., Dynamique et dissociation des dications N_2^{2+} et NO_2^+ préparés par double photoionisation à l'aide du rayonnement synchrotron, Thèse de Doctorat, Université Paris VI, 2002.
- Aitken K.L. and M.F.A. Harrison, Measurement of the cross sections for electron impact ionization of multi-electron ions: I. O^+ to O^{2+} and O^{2+} to O^{3+} , *J. Phys. B: Atom. Molec. Phys.*, **4**, 1176-1188, 1971.
- Akasofu, S.-I. and S. Chapman, Solar-Terrestrial Physics, an account of the wave and particle radiations from the quiet and the active sun, and of the consequent terrestrial phenomena, The International Series of Monographs on Physics, Clarendon Press, Oxford, 1972.
- Alcaraz, C., C. Nicolas, R. Thissen, J. Žabka, and O. Dutuit, $^{15}N^+ + CD_4$ and $O^+ + ^{13}CO_2$ state-selected ion-molecule reactions relevant to the chemistry of planetary ionospheres, *J. Phys. Chem. A*, **108**, 9,998-10,009, 2004.
- Angel, G.C. and J.A.R. Samson, Total photoionization cross sections of atomic oxygen from threshold to 44.3 Å, *Phys. Rev. A*, **58**, No. 11, 5578-5585, 1988.
- Aston, F.W., *Philos. Mag.*, **40**, 628, 1920.
- Avakyan, S.V., Doubly charged ions of atomic oxygen in the disturbed ionosphere, *Cosmic Res.*, **16**, No. 1, 115-119, 1978*a*.
- Avakyan, S.V., Doubly charged molecular ions in the auroral ionosphere, *Geomag. Aeron.*, **18**, No. 4, 444-446, 1978*b*.
- Avakyan, S.V., R.N. Il'in, V.M. Lavrov, G.N. Ogurtsov, Collision Processes and Excitation of UV Emission from Planetary Atmospheric Gases —a Handbook of Cross Sections, Gordon & Breach Science Publishers, Amsterdam, 1998.

- Backes, H., F. M. Neubauer, M. K. Dougherty, N. Achilleos, N. André; C. S. Arridge, and 5 colleagues, Titan's Magnetic Field Signature During the First Cassini Encounter, *Science*, **308**, 992-995, 2005.
- Bagariatskii, B. A., The Influence of Proton Spiral Trajectories on the Doppler Profile of Auroral Hydrogen Lines, *Sov. Astron.*, **2**, 87, 1958a.
- Bagariatskii, B. A., The Zenith Angle Distribution Function of Auroral Protons., *Sov. Astron.*, **2**, 453, 1958b.
- Bahati, E.M., J.J. Jureta, D.S. Belic, H. Cherkani-Hassani, M.O. Abdellahi and P. Defrance, Electron-impact dissociation and ionization of $N\frac{1}{2}$, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.*, **34**, 2963-2973, 2001.
- Baluja, K.L. and C.J. Zeippen, The photoionisation of the $O^+(^4S^0)$ ground state, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.*, **21**, 2441-2454, 1988.
- Banks, P.M. and G. Kockarts, *Aeronomy*, parts I and II, Academic Press Inc., London, 1973.
- Banks, P.M., Energy sources of the high latitude upper atmosphere, in *Exploration of the polar upper atmosphere, Proceedings of the NATO Advanced Study Institute held at Lillehammer, Norway*, ed. C.S. Deehr and J.A. Holtet, D. Reidel Publishing Company, Dordrecht, Holland, 1981.
- Barthélemy, M., Modélisation du transfert radiatif dans les atmosphères de Jupiter et Saturne, Thèse de Doctorat, Université Joseph Fourier, Grenoble, 2003.
- Barthélemy, M., J. Lilensten, and C. Parkinson, H_2 vibrational temperatures in the upper atmosphere of Jupiter, *Astron. Astrophys.*, **437**, 329-331, 2005.
- Basu, B., J.R. Jasperse, R.M. Robinson, R.R. Vondrak and D.S. Evans, Linear transport theory of auroral proton precipitation: a comparison with observations, *J. Geophys. Res.*, **92**, 5920, 1987.
- Basu, B., J.R. Jasperse and N.J. Grossbard, A numerical solution of the coupled proton-H atom transport equations for the proton aurora, *J. Geophys. Res.*, **95**, 19069, 1990.
- Basu, B., J.R. Jasperse, D.J. Strickland and R.E. Daniell, Transport-theoretic model for the electron-proton-hydrogen atom aurora, 1.Theory, *J. Geophys. Res.*, **98**, 21017, 1993.
- Basu, B., D.T. Decker and J.R. Jasperse, Proton transport model: a review, *J. Geophys. Res.*, **106**, No.A1, 93-105, 2001.
- Birkeland, K., Sur les rayons cathodiques sous l'action de forces magnétiques intenses, *Arch. Sci. Phys. Nat. Gen.*, No. 4, **T1**, 497-512, 1896.
- Blelly, P-L, J. Lilensten, A. Robineau, J. Fontanari and D. Alcaydé, Calibration of a numerical ionospheric model using EISCAT data: effect of the neutral atmosphere and the suprathermal electrons on the ionospheric plasma structure, *Ann. Geophys.*, **14**, 1375-1390, 1996.

RÉFÉRENCES SCÉNIQUES

- Blelly, P.-L., C. Lathuillère, B. Emery, J. Lilensten, J. Fontanari and D. Alcaydé, An extended TRANSCAR model including ionospheric convection: simulation of EISCAT observations using inputs from AMIE, *Ann. Geophys.*, **23**, 419-431, 2005.
- Boltzmann, L., Weitere Studien über das Wärmegleichgewicht unter Gasmolekülen, *Wien. Ber.*, **66**, 275–30, 1872.
- Boltzmann, L., On the Methods of Theoretical Physics, *Proceedings of the Physical Society of London*, **12**, No. 1, 336–345, 1892.
- Breig, E.L., M.R. Torr, D.G. Torr, W.B. Hanson, J.H. Hoffman, J.C.G. Walker and A.O. Nier, Doubly charged atomic oxygen ions in the thermosphere 1. Photochemistry, *J. Geophys. Res.*, **82**, No. 7, 1008-1012, 1977.
- Breig, E.L., M.R. Torr, D.C. Kayser, Observations and photochemistry of O⁺⁺ in the daytime thermosphere, *J. Geophys. Res.*, **87**, No. A9, 7653-7665, 1982.
- Breig, E.L., S. Sanatani and W.B. Hanson, Thermospheric hydrogen: the long-term solar influence, *J. Geophys. Res.*, **90**, n°A6, 5247-5260, 1985.
- Brekke, A. & Y. Kamide, On the relationship between Joule heating and frictional heating in the polar ionosphere, *J. Atmos. Terr. Phys.*, **58**, No. 1-4, 139–143, 1996.
- Brown, R.A., D. Shemansky and R.E. Johnson, A deficiency of OIII in the Io plasma torus, *Ap. J.*, **264**, 309-323, 1983.
- Carlson, B.G. and K.D. Lathrop, “Transport theory – the method of discrete ordinates”, in *Computing methods in reactor physics*, H. Greenspan, C.N. Kelber and D. Okrent Eds., Gordon & Breach, New York, 171-266, 1968.
- Carlson, H. C., K. Oksavik, J. Moen, and T. Pedersen, Ionospheric patch formation: Direct measurements of the origin of a polar cap patch, *Geophys. Res. Lett.*, **31**, 8806, 2004.
- Carlson, H. C., J. Moen, K. Oksavik, C. P. Nielsen, I. W. McCrea, T. R. Pedersen, and P. Gallop, Direct observations of injection events of subauroral plasma into the polar cap, *Geophys. Res. Lett.*, **33**, 5103, 2006.
- Chakrabarti, S., D. Pallamraju, J. Baumgardner, and J. Vaillancourt, HiTIES: A high throughput imaging echelle spectrograph for ground-based visible airglow and auroral studies, *J. Geophys. Res.*, **106**, 30337-30348, 2001.
- Chamberlain, J. W., The Excitation of Hydrogen in Aurorae, *Astrophys. J.*, **120**, 360-366, 1954a.
- Chamberlain, J. W., On the Production of Auroral Arcs by Incident Protons, *Astrophys. J.*, **120**, 566-571, 1954b.
- Chamberlain, J. W., On a Possible Velocity Dispersion of Auroral Protons, *Astrophys. J.*, **126**, 245-252, 1957.

- Chamberlain, J. W., *Physics of the aurora and the airglow*, Academic press, New York, 1961.
- Chandrasekhar, S., *Radiative transfer*, Dover, New York, 1960.
- Chapman, S., The absorption and dissociative or ionising effect of monochromatic radiation in an atmosphere on a rotating earth, *Proc. Phys. Soc.*, **43**, 483-501, 1931.
- Chatterjee, B.K. and R. Johnsen, Thermal-energy reactions of $O^{\frac{1}{2}+}$ ions with O_2 , N_2 , CO_2 , NO and Ne , *J. Chem. Phys.*, **91**, No. 2, 1378-1379, 1989.
- Chiu, M. C., Von-Mehlem, U. I., Willey, C. E., Betenbaugh, T. M., Maynard, J. J., Krein, J. A., Conde, R. F., Gray, W. T., Hunt Jr., J. W., Mosher, L. E., McCullough, M. G., Panneton, P. E., Staiger, J. P., and Rodberg, E. H.: ACE spacecraft, *Space Sci. Rev.*, **86**, 257-284, 1998.
- Cole, K. D., Electrodynamical heating and movement of the thermosphere, *Planet. Space Sci.*, **19**, 59-75, 1971.
- Cossart, D., F. Launay, J.M. Robbe and G.J. Gandara, The optical spectrum of the doubly charged molecular nitrogen ion-rotational analysis of the (0-0) and (1-1) bands of the $D^1\Sigma^+_g - X^1\Sigma^+_g$ transition of $N^{\frac{2}{2}+}$: comparison of observations with ab-initio calculation results, *J. Mol. Spectrosc.*, **113**, 142-158, 1985.
- Cossart, D. and F. Launay, The vacuum UV emission spectrum of the $^{15}N^{\frac{2}{2}+}$ molecular ion, *J. Mol. Spectrosc.*, **113**, 159-166, 1985.
- Cravens, T. E., J. Vann, J. Clark, J. Yu, C. N. Keller, and C. Brull, The ionosphere of Titan: an updated theoretical model, *Adv. Space Res.*, **33**, 212-215, 2004.
- Cravens, T. E., I. P. Robertson, J. Clark, J.-E. Wahlund, J. H. Waite, S. A. Ledvina, and 10 colleagues, Titan's ionosphere: Model comparisons with Cassini Ta data, *Geophys. Res. Lett.*, **32**, 12108, 2005.
- Cravens, T. E., I. P. Robertson, J. H. Waite, R. V. Yelle, and 12 colleagues, Composition of Titan's ionosphere, *Geophys. Res. Lett.*, **33**, 7105, 2006.
- Culot, F., C. Lathuillère, J. Lilensten, O. Witasse, The OI 630.0 and 557.7nm dayglow measured by WINDII and modeled by TRANSCAR, *Ann. Geophys.*, **22**, No. 6, 1947-1960, 2004.
- Davidson, G. T., Expected spatial distribution of low-energy protons precipitated in the auroral zones, *J. Geophys. Res.*, **70**, 1061, 1965.
- Deehr, C.S., D.A. Lorentzen, F. Sigernes, and R.W Smith, Dayside auroral hydrogen emission as an aeronomic signature of magnetospheric boundary layer processes, *Geophys. Res. Lett.*, **25**, No. 12, 2111-2114, 1998.
- Decker, D. T., B. V. Kozelov, B. Basu, J. R. Jasperse, and V. E. Ivanov, Collisional degradation of the proton-H atom fluxes in the atmosphere: A comparison of theoretical techniques, *J. Geophys. Res.*, **101**, 26,947-26,960, 1996.

RÉFÉRENCES SCÉNIQUES

- Dutuit, O., C. Alcaraz, D. Gerlich, P. M. Guyon, J. W. Hepburn, C. Métayer-Zeitoun, J. B. Ozenne, M. Schweizer, T. Weng, A state-selected study of $\text{Ar}^+(2P_{3/2,1/2}) + \text{O}_2$ charge transfer at collision energies below 4 eV using synchrotron radiation and guided ion beam techniques, *Chem. Phys.*, **209**, 177-194, 1996.
- Eather, R. H., Redshift of auroral hydrogen profiles, *J. Geophys. Res.*, **71**, 5027, 1966.
- Eather, R. H., and K. M. Burrows, Excitation and ionization by auroral protons, *Aust. J. Phys.*, **19**, 309-322, 1966.
- Eather, R. H., and F. Jacka, Auroral hydrogen emission, *Aust. J. Phys.*, **19**, 241-274, 1966.
- Eather, R. H., Auroral proton precipitation and hydrogen emissions, *Rev. Geophys.*, **5**, 207, 1967a.
- Eather, R. H., Secondary processes in proton auroras, *J. Geophys. Res.*, **72**, 1481, 1967b.
- Edgar, B.C., W.T. Miles and A.E.S. Green, Energy deposition of protons in molecular nitrogen and applications to proton auroral phenomena, *J. Geophys. Res.*, **78**, 6595, 1973.
- Edgar, B.C., H.S. Porter and A.E.S. Green, Proton energy deposition in molecular and atomic oxygen and applications to the polar cap, *Planet. Space Sci.*, **23**, 787, 1975.
- Edlén, B., *Arkiv Mat. Astron. Fysik*, **28**, 1941.
- Ehresmann, A., H. Liebel, H. Schmoranzler, B. Zimmermann, S. Kammer, K.-H. Schartner, Ph.V. Demekhin and V.L. Sukhorukov, Double photoionization of N_2 into the $\text{N}\frac{1}{2}^+ D^1\Sigma\frac{1}{2}^-$ -state, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.*, **36**, 3669-3681, 2003.
- Ehresmann A., S. Machida, M. Kitajima, M. Ukai, K. Kameta, N. Kouchi, Y. Hatano, E. Shigemasa and T. Hayaishi, Dissociative single and double photoionization with excitation between 37 and 69 eV in N_2 , *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.*, **33**, 473-490, 2000.
- Fang, X., M.W. Liemohn, J.U. Kozyra, S.C. Solomon, Quantification of the spreading effect of auroral proton precipitation, *J. Geophys. Res.*, **109**, A04309, doi:10.1029/2003JA010119, 2004.
- Fennelly, J.A., and D.G. Torr, Photoionization and photoabsorption cross sections of O, N_2 , O_2 and N for aeronomic calculations, *At. Dat. Nucl. Dat. Tab.*, **51**, 321-363, 1992.
- Flamm, D., Ludwig Boltzmann and his influence on science, *Stud. Hist. Philos. Sci.*, **14**, 255-278, 1983.
- Fleischmann, H. H., R. A. Young, and J. W. McGowan, Differential charge-transfer cross section for collisions of H^+ on O_2 , *Phys. Rev.*, **153**, 19-22, 1967.

RÉFÉRENCES SCÉNIQUES

- Fournier, J., P.G. Fournier, M.L. Langford, M. Mousselmal, J.M. Robbe and G. Gandara, An experimental and theoretical study of the doubly-charged ion O_2^+ , *J. Chem. Phys.*, **96**, No. 5, 3594-3602, 1992.
- Fox, J.L. and G.A. Victor, O^{++} in the Venusian ionosphere, *J. Geophys. Res.*, **86**, No. A4, 2438-2442, 1981.
- Fox, J. L., Chemistry of the nightside ionosphere of Venus, *Planet. Space Sci.*, **40**, 1663-1681, 1992.
- Fox, J. L. and H. A. Taylor, A signature of auroral precipitation in the nightside ionosphere of Venus, *Geophys. Res. Lett.*, **17**, 1625-1628, 1990.
- Fox, J. L., Heating efficiencies in the thermosphere of Venus reconsidered, *Planet. Space Sci.*, **36**, 37-46, 1988.
- Fox, J. L. and R. V. Yelle, Hydrocarbon ions in the ionosphere of Titan, *Geophys. Res. Lett.*, **24**, 2179, 1997.
- Franceschi, P., R. Thissen, J. Žabka, J. Roithová, Z. Herman, O. Dutuit, Internal energy effects in the reactivity of CO_2^{2+} doubly charged molecular ions with CO_2 and CO , *Int. J. Mass Spectrom.*, **228**, 507-516, 2003.
- Fälthammar, C.-G., *Space Physics*, after the undergraduate course given at KTH Royal Institute of Technology, Alfvén Laboratory, Stockholm, 1999.
- Galand, M., Transport des protons dans l'ionosphère aurorale, Thèse de l'Université Joseph Fourier, dir. J. Lilensten, Grenoble, 1996.
- Galand, M., J. Lilensten, W. Kofman and R.B. Sidje, Proton transport in the ionosphere, 1: multi-stream approach of the transport equations, *J. Geophys. Res.*, **102**, 22,261-22,272, 1997.
- Galand, M., J. Lilensten, W. Kofman and D. Lummerzheim, Proton transport model in the ionosphere: 2. Influence of magnetic mirroring and collisions on the angular redistribution in a proton beam, *Ann. Geophys.*, **16**, 1308-1321, 1998.
- Galand, M., J. Lilensten, D. Toubanc and S. Maurice, The ionosphere of Titan: ideal diurnal and nocturnal cases, *Icarus*, **140**, 92-105, 1999.
- Galand, M. and A.D. Richmond, Magnetic mirroring in an incident proton beam, *J. Geophys. Res.*, **104**, 4447-4455, 1999.
- Galand, M., Introduction to the special section: proton precipitation into the atmosphere, *J. Geophys. Res.*, **106**, 1-6, 2001.
- Galand, M., T.J. Fuller-Rowell, and M.V. Codrescu, Response of the upper atmosphere to auroral protons, *J. Geophys. Res.*, **106**, 127-139, 2001.
- Galand, M., D. Lummerzheim, A.W. Stephan, B.C. Bush, and S. Chakrabarti, Electron and proton aurora observed spectroscopically in the far ultraviolet, *J. Geophys. Res.*, **107**(A7), doi: 10.1029/2001JA000235, 2002.

RÉFÉRENCES SCÉNIQUES

- Galand, M. and D. Lummerzheim, Contribution of proton precipitation to space-based auroral FUV observations, *J. Geophys. Res.*, **109** (A3), A03307, doi: 10.1029/2003JA010321, 2004.
- Galand, M., and S. Chakrabarti, Proton aurora observed from the ground, *J. Atmos. Terr. Phys.*, in press, 2006.
- Ganguli, S.B., The polar wind, *Rev. Geophys.*, **34** (3), 311-348, 1996.
- Gao, R. S., L. K. Johnson, C. L. Hakes, K. A. Smith, and R. F. Stebbings, Collisions of kilo-electron-volt H^+ and He^+ with molecules at small angles - Absolute differential cross sections for charge transfer, *Phys. Rev. A*, **41**, 5929-5933, 1990.
- Gartlein, C. W., Auroral spectra showing broad hydrogen lines, *Trans. Am. Geophys. Union*, **31**, 18-20, 1950.
- Gartlein, C. W., Protons and the aurora, *Phys. Rev.*, **81**, 463-464, 1951.
- Gérard, J.-C., B. Hubert, D.V. Bisikalo, and V.I. Shematovich, A model of the Lyman- α line profile in the proton aurora, *J. Geophys. Res.*, **105**, No. A7, 15,795-15,805, 2000.
- Gérard, J.-C., B. Hubert, M. Meurant, V.I. Shematovich, D.V. Bisikalo, H. Frey, S. Mende, G.R. Gladstone, C.W. Carlson, Observation of the proton aurora with IMAGE FUV imager and simultaneous ion flux in situ measurements, *J. Geophys. Res.*, **106**, No. A12, 28,939-28,948, 2001.
- Ghosh, S., K.H. Mahajan, J.M. Grebowsky and N. Nath, Morphology of O^{++} ions and their maintenance in the nightside Venus ionosphere, *J. Geophys. Res.*, **100**, No. A12, 23983-23991, 1995.
- Geiss J. and D.T. Young, Production and Transport of O^{++} in the ionosphere and plasmasphere, *J. Geophys. Res.*, **86**, No. A6, 4739-4750, 1981.
- Glosik, J., A.B. Rakshit, N.D. Twiddy, N.G. Adams and D. Smith, Measurement of the rates of reaction of the ground and metastable excited states of $O\frac{1}{2}$, NO^+ and O^+ with atmospheric gases at thermal energies, *J. Phys. B: Atom. Molec. Phys.*, **11**, No. 19, 1978.
- Halas, S. and B. Adamczyk, Cross sections for the production of $N\frac{1}{2}$, N^+ and $N\frac{3}{2}^+$ from nitrogen by electrons in the energy range 16-600 eV, *Int. J. Mass Spectrom. Ion Phys.*, **10**, 157, 1972.
- Hall, R.I., G. Dawber, A. McConkey, M.A. MacDonald and G.C. King, Vibrational structure of the $O\frac{1}{2}^+$ ground state observed by threshold photoelectron coincidence spectroscopy, *Phys. Rev. Lett.*, **68**, No. 18, 2751-2754, 1992.
- Hardy D.A., M.S. Gussenhoven and E. Holeman, A statistical model of auroral electron precipitation., *J. Geophys. Res.*, **90**, A5, 4229-4248, 1985.
- Hardy, D.A., M.S. Gussenhoven, R. Raistrick, and W.J. McNeil, Statistical and functional representations of the pattern of auroral energy flux, number flux and conductivity, *J. Geophys. Res.*, **92**, No. A11, 12275-12294, 1987.

RÉFÉRENCES SCÉNIQUES

- Hardy D.A., M.S. Gussenhoven and D. Brautigam, A statistical model of auroral ion precipitation, *J. Geophys. Res.*, **94**, 370, 1989.
- Heaps, M. G., B. C. Edgar, and A. E. S. Green, Jovian proton aurora, *Icarus*, **24**, 78-85, 1975.
- He, Z.X., R. Moberg and J.A.R. Samson, Threshold behaviour in single-photon double ionisation of atomic oxygen, *Phys. Rev. A: At. Mol. Opt. Phys.*, **52**, No. 6, 4595-4598, 1995.
- Hedin, A.E., MSIS-86 Thermospheric model, *J. Geophys. Res.*, **92**, No. A5, 4649-4662, 1987.
- Hedin, A. E., Extension of the MSIS thermosphere model into the middle and lower atmosphere, *J. Geophys. Res.*, **96**, 1159-1172, 1991.
- Heelis, R. A., R. J. Moffett, and D. W. Windle, Theoretical vertical profiles of minor ions at the equator, *J. Atmos. Terr. Phys.*, **35**, No. 2, 223-231, 1973.
- Hellner, L., M.J. Besnard and G. Dujardin, Photoionization study of quasibound states of doubly charged molecular nitrogen ions, *Chem. Phys.*, **119**, 391-397, 1988.
- Henriksen, K., Variations of proton energy and pitch angle spectra in the upper atmosphere, *J. Atmos. Terr. Phys.*, **41**, 633-641, 1979.
- Heroux, L. and H.E. Hinteregger, Aeronomical reference spectrum for solar UV below 2000 Å, *J. Geophys. Res.*, **83**, No. A11, 5305-5308, 1978.
- Hinteregger, H.E., The extreme ultraviolet solar spectrum and its variation during a solar cycle, *Ann. Geophys.*, **26**, 547-554, 1970.
- Hinteregger, H.E., K. Fukui and B.R. Gilson, Observational, reference and model data on solar EUV, from measurements on AE-E, *Geophys. Res. Lett.*, **8**, 1147-1150, 1981.
- Hoffman, J.H., Composition measurements of the topside ionosphere, *Science*, **115**, 322-324, 1967.
- Hoffman, J.H., Studies and composition of the ionosphere with a magnetic deflection mass spectrometer, *Int. J. Mass Spect. Ion Phys.*, **4**, 315, 1970.
- Hoffman, J.H., W.B. Hanson, C.R. Lippincott, and E.E. Ferguson, The magnetic ion-mass spectrometer on Atmosphere Explorer, *Radio Sci.*, **8**, 315-322, 1973.
- Holmes, J. M., B. Kozelov, F. Sigernes, D. A. Lorentzen, C. S. Deehr, Dual site observations of dayside Doppler-shifted hydrogen profiles: preliminary results, *Can. J. Phys.*, in press, 2006.
- Horwitz, J.L., ISEE 1 observations of O⁺⁺ in the magnetosphere, *J. Geophys. Res.*, **86**, No. A11, 9225-9229, 1981.
- Howorka, F., A.A. Viggiano, D.L. Albritton, E.E. Ferguson and F.C. Fehsenfeld, Laboratory studies of O⁺⁺ reactions of ionospheric importance, *J. Geophys. Res.*, **84**, No. A10, 5941-5942, 1979.

RÉFÉRENCES SCÉNIQUES

- Hubert, B., J.-C. Gérard, S. A. Fuselier, S. B. Mende, and J. L. Burch, Proton precipitation during transpolar auroral events: Observations with the IMAGE-FUV imagers, *J. Geophys. Res. (Space Phys.)*, **109**, A06204, doi:10.1029/2003JA010136, 2004.
- Iglesias, G., and R.R. Vondrak, Atmospheric spreading of protons in auroral arcs, *J. Geophys. Res.*, **79**, No. 1, 280-282, 1974.
- Itikawa, Y. and A. Ichimura, Collisions of electrons and photons with atomic oxygen, *J. Phys. Chem. Ref. Data*, **19**, No. 3, 637-651, 1990.
- Ivchenko, N., M.H. Rees, B.S. Lanchester, D. Lummerzheim, M. Galand, K. Throp, and I. Furniss, Observations of O^+ ($^4P\text{-}^4D_0$) lines in electron aurora over Svalbard, *Ann. Geophys.*, **22**, 2805-2817, 2004.
- Ivchenko, N., M. Galand, B.S. Lanchester, M.H. Rees, D. Lummerzheim, I. Furniss, and J. Fordham, Observation of O^+ ($^4P\text{-}^4D_0$) lines in proton aurora over Svalbard, *Geophys. Res. Lett.*, **31**, L10807, doi: 10.1029/2003GL019313, 2004.
- Jasperse, J.R., Boltzman-Fokker-Plank model for the electron distribution function in the Earth's atmosphere, *Planet. Space Sci.*, **24**, 33, 1976.
- Jasperse, J.R. and D.J. Strickland, Approximate analytic solutions for the primary auroral electron flux and related quantities, *Environmental research paper*, Air Force Geophysics Lab., Space Physics Division, Massachusetts, 01731, 1981.
- Jasperse, J.R. and B. Basu, Transport theoretic solutions for auroral proton and H atom fluxes and related quantities, *J. Geophys. Res.*, **87**, 811, 1982.
- Jasperse, J.R., Transport theoretic solutions for the beam-spreading effect in the proton-hydrogen aurora, *Geophys. Res. Lett.*, **24**, No. 11, 1415-1418, 1997.
- Johnsen, R. and M.A. Biondi, Measurements of the reaction rates of O^{++} ions with N_2 and O_2 at thermal energy and their ionospheric implications, *Geophys. Res. Lett.*, **5**, No. 10, 847-848, 1978.
- Johnson, B.C., P.L. Smith and R.D. Knight, The radiative lifetime of the $^5S_2^0$ metastable level of O^{++} , *Ap. J.*, **281**, 477-481, 1984.
- Johnson, L. K., R. S. Gao, K. A. Smith, and R. F. Stebbings, Absolute differential cross sections for very-small-angle scattering of keV H and He atoms by H_2 and N_2 , *Phys. Rev. A*, **38**, 2794-2797, 1988.
- Johnstone, A. D., The spreading of a proton beam in the atmosphere, *Planet. Space Sci.*, **20**, 295-297, 1972.
- Jones, G.O.L., P.J.S. Williams and K.J. Winser, Large ionospheric plasma flows along magnetic field lines: EISCAT observations and their interpretation, *Adv. Space Res.*, **12**, No. 6, 157-160, 1992.
- Kallio, E., and S. Barabash, Atmospheric effects of precipitating energetic hydrogen atoms on the Martian atmosphere, *J. Geophys. Res.*, **106**, 165-177, 2001.

- Kallio, E., I. Sillanpää, and P. Janhunen, Titan in subsonic and supersonic flow, *Geophys. Res. Lett.*, **31**, 15703, 2004.
- Khare, S.P., Mean energy expended per ion pair by electrons in atmospheric gases, *J. Phys. B: At. Mol. Phys.*, **3**, 971-975, 1970.
- Kivelson, M.G. and C.T. Russell editors, *Introduction to Space Physics*, CUP ed., New York, 1996.
- Kjeldsen, H., B. Kristensen, R.L. Brooks, F. Folkmann, H. Knudsen and T. Andersen, Absolute, state-selective measurements of the photoionization cross sections of N^+ and O^+ ions, *Astrophys. J. supplement series*, **138**, 219-227, 2002.
- Kockarts, G., *Aéronomie, physique et chimie de l'atmosphère*, éd. De Boeck Université, Bruxelles, 2000.
- Kozelov, B. V., Influence of the dipolar magnetic field on transport of proton- H atom fluxes in the atmosphere, *Ann. Geophys.*, **11**, 697-704, 1993.
- Kozelov, B. V., V. E. Ivanov, Monte Carlo calculation of proton-hydrogen atom transport in N_2 , *Planet. Space Sci.*, **40**, No.11, 1503-1511, 1992.
- Kozelov, B. V., V. E. Ivanov, Effective energy loss per electron-ion pair in proton aurora, *Ann. Geophys.*, **12**, No.10-11, 1071-1075, 1994.
- Kretzschmar, Matthieu, *Caractérisation et modélisation du flux EUV solaire*, Thèse de doctorat préparée au LPG, UJF Grenoble 1, 2002.
- Krishnakumar, E. and S.K. Srivastava, Cross sections for the production of $N \dot{z}$, $N^+ + N \dot{z}^+$ and N^{2+} by electron impact on N_2 , *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.*, **23**, 1893-1903, 1990.
- Krishnakumar, E. and S.K. Srivastava, Cross sections for electron impact ionization of O_2 , *Int. J. Mass Spectrom. Ion Proc.*, **113**, 1-12, 1992.
- Lanchester, B.S., M. Galand, S.C. Robertson, M.H. Rees, D. Lummerzheim, I. Furniss, L.M. Peticolas, H.U. Frey, J. Baumgardner, and M. Mendillo, High resolution measurements and modeling of auroral hydrogen emission line profiles, *Ann. Geophys.*, **21**, 1629-1643, 2003.
- Larson, H. V., Energy loss per ion pair for protons in various gases, *Phys. Rev.*, **112**, No. 6, 1927-1928, 1958.
- Lathuillère, C., W. Kofman, A short review on the F_1 -region ion composition in the auroral and polar ionosphere, *Adv. Space Res.*, **37**, 913-918, 2006.
- Lebonnois, S. and D. Toublanc, Actinic fluxes in Titan's atmosphere, from one to three dimensions: Application to high-latitude composition, *J. Geophys. Res.*, **104**, 22,025-22,034, 1999.
- Lilensten, J., W. Kofman, J. Wisenberg, E.S. Oran and C.R. Devore, Ionization efficiency due to primary and secondary photoelectrons: a numerical model, *Ann. Geophys.*, **7**, 83-90, 1989.

RÉFÉRENCES SCÉNIQUES

- Lilensten, J. & M. Galand, Proton/electron precipitation effects on the electron production and density above EISCAT and ESR, *Ann. Geophys.*, **16**, 1299-1307, 1998.
- Lilensten, J. et P.-L. Blelly, Du Soleil à la Terre, aéronomie et météorologie de l'espace, éd. PUG, Grenoble, 1999.
- Lilensten, J. and P.-L. Blelly, The TEC and F2 parameters as tracers of the ionosphere and thermosphere, *J. Atmos. Solar & Terrest. Phys.*, **64**, 775-793, 2002.
- Lilensten, J., J. Bornarel, *Space Weather, Environment and Societies*, Springer, Dordrecht, the Netherlands, 2006.
- Lilensten, J., C. Simon, O. Witasse, O. Dutuit, R. Thissen and C. Alcaraz, A fast computation of the diurnal secondary ion production in the ionosphere of Titan, *Icarus*, **174**, 285-288, 2005a.
- Lilensten, J., O. Witasse, C. Simon, H. Soldi-Lose, O. Dutuit, R. Thissen and C. Alcaraz, Prediction of a N_2^{++} layer in the upper atmosphere of Titan, *Geophys. Res. Lett.*, **32**, L03203, doi:10.1029/2004GL021432, 2005b.
- Lilensten, J., C. Simon, M. Barthélemy, J. Moen, R. Thissen, D.A. Lorentzen, Considering the polarization of the oxygen thermospheric red line for Space Weather studies, *accepted in Space Weath. J.*, 2006.
- Lockwood, M., J.A. Davies, J. Moen, A.P. van Eyken, K. Oksavik, I.W. McCrea and M. Lester, Motion of the dayside polar cap boundary during substorm cycles: II. Generation of poleward-moving events and polar cap patches by pulses in the magnetosphere reconnection rate, *Ann. Geophys.*, **23**, 3513–3532, 2005.
- Lockwood, M., J. Moen, A. P. van Eyken, J. A. Davies, K. Oksavik, and I. W. McCrea, Motion of the dayside polar cap boundary during substorm cycles: I. Observations of pulses in the magnetopause reconnection rate, *Ann. Geophys.*, **23**, 3495-3511, 2005.
- Lorentzen, D. A., F. Sigernes, and C.S. Deehr, Modeling and observations of dayside auroral hydrogen emission Doppler profiles, *J. Geophys. Res.*, **103**, No. A8, 17,479-17,488, 1998.
- Lorentzen, D.A., Auroral signatures of dayside particle precipitation in the polar cap boundary region: modelling and measurements, Ph.D. thesis, Department of Physics, University of Tromsø, 1999.
- Lorentzen, D. A. and J. Moen, Auroral proton and electron signatures in the dayside aurora, *J. Geophys. Res.*, **105**, 12,733-12,746, 2000.
- Lorentzen, D. A., Latitudinal and longitudinal dispersion of energetic auroral protons, *Ann. Geophys.*, **18**, 81-89, 2000.
- Lummerzheim, D., *Electron transport and optical emissions in the aurora*, PhD Thesis, University of Alaska, Fairbanks, 1987.

RÉFÉRENCES SCÉNIQUES

- Lummerzheim, D., and M. Galand, The profile of the hydrogen H_{β} emission line in proton aurora, *J. Geophys. Res.*, **106**, 23-31, 2001.
- Lummerzheim, D., M. Galand, J. Semeter, M.J. Mendillo, M.H. Rees, and F.J. Rich, Emission of OI(630 nm) in proton aurora, *J. Geophys. Res.*, **106**, 141-148, 2001.
- Lummerzheim, D., and J. Liliensten, Electron transport and energy degradation in the ionosphere: evaluation of the numerical solution, comparison with laboratory experiments and auroral observations, *Ann. Geophys.*, **12**, 1039-1051, 1994.
- Mathis, J. S. and X.-W. Liu, Observations of the [O III] $\lambda 4931/\lambda 4959$ line ratio and O^{2+} abundances in ionized nebulae, *Astrophys. J.*, **521**, 212-216, 1999.
- Mathur D., L.H. Andersen, P. Hvelplund, D. Kella and C.P. Safvan, Long-lived, doubly charged diatomic and triatomic molecular ions, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.*, **28**, 3415-3426, 1995.
- Mayaud, P.N., Derivation, Meaning, and Use of Geomagnetic Indices, *Geophys. Mono.*, **22**, American Geophysical Union, Washington, DC, 1980.
- Meinel, A.B., The spectrum of the airglow and the aurora, *Rep. Prog. Phys.*, **14**, 121-146, 1951.
- Menzel, D.H., L.H. Aller, Physical Processes in gaseous nebulae. XVI. The abundance of OIII, *Ap. J.*, **94**, 30-36, 1941.
- Michael, M. and R. E. Johnson, Energy deposition of pickup ions and heating of Titan's atmosphere, *Planet. Space Sci.*, **53**, 1510-1514, 2005.
- Miller, J. H., and A. E. S. Green, Proton energy degradation in water vapour, *Radiat. Res.*, **54**, 343, 1973.
- Moen, J., D. A. Lorentzen, and F. Sigernes, Dayside moving auroral forms and bursty proton auroral events in relation to particle boundaries observed by NOAA 12, *J. Geophys. Res.*, **103**, 14,854-14,864, 1998.
- Moen, J., A. P. van Eyken, and H. C. Carlson, EISCAT Svalbard Radar observations of ionospheric plasma dynamics in relation to dayside auroral transients, *J. Geophys. Res.*, **106**, 21,453-21,462, 2001.
- Moen, J., M. Lockwood, K. Oksavik, H. Carlson, W. Denig, A. Eyken, and I. McCrea, The dynamics and relationships of precipitation, temperature and convection boundaries in the dayside auroral ionosphere, *Ann. Geophys.*, **22**, 1973-1987, 2004a.
- Moen, J., K. Oksavik, and H. C. Carlson, On the relationship between ion upflow events and cusp auroral transients, *Geophys. Res. Lett.*, **31**, 11808, 2004b.
- Morel, L., O. Witasse, R. Warnant, J.-C. Cerisier, P.-L. Blelly and J. Liliensten, Diagnostic of the dayside ionosphere of Mars using the Total Electron Content measurement by the NEIGE/Netlander experiment: an assessment study, *Planet. Space Sci.*, **52**, No. 7, 603-611, 2004.

- Mrázek, L., J. Zabka, Z. Dolejšek, J. Hrusak and Z. Herman, Dynamics of chemical and charge-transfer reactions of molecular dications: III Beam scattering and total cross section data for processes in system $\text{CO}_2^+ + \text{D}_2$, *J. Phys. Chem. A*, **104**, 7294-7303, 2000.
- Märk, T.D., Cross sections for single and double ionization of N_2 and O_2 molecules by electron impact from threshold up to 170 eV, *J. Chem. Phys.*, **63**, No. 9, 3731-3736, 1975.
- Nakada, M.P. and S.F. Singer, Thermal diffusion and multiply-charged atoms in the magnetosphere, *Geophys. J. Roy. astr. Soc.*, **15**, 163-181, 1968.
- Newman, J. H., Y. S. Chen, K. A. Smith, and R. F. Stebbings, Differential cross sections for scattering of 0.5-, 1.5-, and 5.0-keV hydrogen atoms by *He*, *H₂*, *N₂*, and *O₂*, *J. Geophys. Res.*, **91**, 8947-8954, 1986.
- Nicolas, C., C. Alcaraz, R. Thissen, J. Zabka, and O. Dutuit, Effects of ion excitation on ion-molecule reactions of the Mars, Venus, and Earth ionospheres, *Planet. Space Sci.*, **50**, 877-887, 2002.
- Northrop, T. G. and E. Teller, Stability of the Adiabatic Motion of Charged Particles in the Earth's Field, *Phys. Rev.*, **117**, 215-225, 1960.
- Ogawa, Y., Generation Mechanisms of Ion Upflow in the Polar Topside Ionosphere, PhD Thesis, Nagoya University, Japan, 2002.
- Oksavik, K., J. Moen, and H. C. Carlson, High-resolution observations of the small-scale flow pattern associated with a poleward moving auroral form in the cusp, *Geophys. Res. Lett.*, **31**, 11807, 2004.
- Olsson, B.J., G. Kindvall and M. Larsson, Experimental and theoretical studies of the radiative properties of the $\text{N}_2^+ \text{D}^1\Sigma_u^+$ state, *J. Chem. Phys.*, **88**, No. 12, 7501-7507, 1988.
- Omholt, A., Characteristics of auroras caused by angular dispersed protons, *J. Atmos. Terr. Phys.*, **9**, 18-27, 1956a.
- Omholt, A., Secondary processes due to absorption of the Lyman lines emitted from aurorae, *J. Atmos. Terr. Phys.*, **9**, 28-35, 1956b.
- Opal, C.B., E. C. Beaty, and W. K. Peterson, Tables of Secondary-Electron-Production Cross Sections, *At. Data*, **4**, No. 3, 209-253, 1972.
- Opgenoorth, H. J., M. Lockwood, D. Alcaydé, E. Donovan, M.J. Engebretson, A.P. van Eyken, K. Kauristie, M. Lester, J. Moen, J. Waterman and 49 colleagues, Coordinated ground-based, low altitude satellite and Cluster observations on global and local scales during a transient post-noon sector excursion of the magnetospheric cusp, *Ann. Geophys.*, **19**, 1367-1398, 2001.
- Peterson, L. R., and A. E. S. Green, The relation between ionization yields, cross sections and loss functions, *J. Phys. B. (Proc. Phys. Soc.)*, No. 2, **1**, 1131-1140, 1968.

- Pitout, F., The polar cusp and its ionospheric footprint, Dynamics and transients, Ph.D. thesis, Uppsala University, 2002.
- Pitout, F. and P.-L. Blelly, Electron density in the cusp ionosphere: increase or depletion?, *Geophys. Res. Lett.*, **30**, 2-1, 2003.
- Prasad, S.S. and D.R. Furman, On the importance of doubly-charged ions in the auroral ionosphere, *J. Geophys. Res.*, **80**, 1360-1362, 1975.
- Rees, M.H., A.I. Stewart, and J.C.G. Walker, Secondary electrons in Aurora, *Planet. Space Science*, **17**, 1997, 1969.
- Rees, M.H., On the interaction of auroral protons with the Earth's atmosphere, *Planet. Space Sci.*, **30**, No.5, 463-472, 1982.
- Rees, M.H., *Physics and Chemistry of the Upper Atmosphere*, Cambridge atmospheric and space science series, Cambridge University Press, United Kingdom, 1989.
- Richards, P.G., J.A. Fennelly and D.G. Torr, EUVAC: a solar EUV flux model for aeronomic calculations, *J. Geophys. Res.*, **99**, 8981-8992, 1994.
- Rishbeth, H. and O.K. Garriott, *Introduction to ionospheric physics*, International Geophysics Series, Academic press, New York and London, 1969.
- Robertson, S. C., B. S. Lanchester, M. Galand, D. Lummerzheim, A. B. Stockton-Chalk, A. D. Aylward, I. Furniss, and J. Baumgardner, First ground-based optical observation of H_{β} Doppler profiles near local noon in the cusp, submitted to *Ann. Geophys.*, 2006.
- Saha, M.N., On the action of ultraviolet sunlight upon the upper atmosphere, *Proc. Roy. Soc. London Ser. A*, **160**, 155-173, 1937.
- Samson, J.A.R., Proportionality of electron-impact ionization to double photoionization, *Phys. Rev. Lett.*, **65**, n°23, 2861-2864, 1990.
- Samson, J.A.R., and G.C. Angel, Single- and double-photoionization cross sections of atomic nitrogen from threshold to 31 Å, *Phys. Rev. A*, **42**, n°3, 1307-1312, 1990.
- Samson, J.A.R., T. Masuoka, P.N. Pareek and G.C. Angel, Total and dissociative photoionization cross sections of N_2 from threshold to 107 eV, *J. Chem. Phys.*, **86**, n°11, 6128-6132, 1987.
- Samson, J. A. R., W. C. Stolte, Z.-X. He, J. N. Cutler, Y. Lu, and R. J. Bartlett, Double photoionization of helium, *Phys. Rev. A*, **57**, 1906-1911, 1998.
- Schneider, T., P.L. Chocian, J.-M. Rost, Separation and identification of dominant mechanisms in double photoionization, *Phys. Rev. Lett.*, **89**, n°7, 73002, 2002.
- Schunk, R.W., Mathematical structure of transport equations for multispecies flow, *Rev. Geophys. Space Phys.*, **15**, 429-445, 1977.
- Schunk, R.W. and A.F. Nagy, *Ionospheres, Plasma Physics and Chemistry*, ed. CUP, Atmospheric and Space Science Series, New York, 2000.

- Shen, D., *Proton transport and auroral optical emissions*, Ph.D. thesis, Geophysical Institute, University of Alaska, Fairbanks, 1993.
- Sheperd, G.C., Auroral structure and dynamics, in Dynamical and chemical coupling between the neutral and ionized atmosphere, Proceedings of the NATO Advanced Study Institute held at Spâtind, Norway, ed. B. Grandal and J.A. Holtet, D. Reidel Publishing Company, Dordrecht, the Netherlands, 1977.
- Seiersen, K., O. Heber, M.J. Jensen, C.P. Safvan and L.H. Andersen, Dissociative recombination of dications, *J. Chem. Phys.*, **119**, No. 2, 2003.
- Sidje, R.B., Expokit, a software package for computing matrix exponentials, *ACM Trans. Math. Softw.*, **24**, 1, 130-156, 1998.
- Sigernes, F., Estimation of initial auroral proton energy fluxes from Doppler profiles, *J. Atmos. Terr. Phys.*, **58**, 1871-1883, 1996.
- Sigernes, F., D. A. Lorentzen, C. S. Deehr, and K. Henriksen, Calculation of auroral Balmer volume emission height profiles in the upper atmosphere, *J. Atmos. Terr. Phys.*, **56**, 503-508, 1994.
- Sigernes, F., G. Fasel, J. Minow, C. S. Deehr, R. W. Smith, D. A. Lorentzen, L. T. Wetjen, and K. Henriksen, Calculations and ground-based observations of pulsed proton events in the dayside aurora, *J. Atmos. Terr. Phys.*, **58**, 1281-1291, 1996.
- Sigernes, F., N. Shumilov, C. S. Deehr, K. P. Nielsen, T. Svenøe, and O. Havnes, The Hydroxyl rotational temperature record from the Auroral Station in Adventdalen, Svalbard (78°N, 15°E), *J. Geophys. Res.*, **108** (A9), 1342, doi:10.1029/2001JA009023, 2003.
- Sigernes, F., T. Svenøe, D.A. Lorentzen and L.T.W. Sigernes, An upgrade of the auroral Ebert-Fastie spectrometer, *communication personnelle*, article to be submitted, 2006.
- Simon, C., J. Liliensten, O. Dutuit, R. Thissen, O. Witasse, C. Alcaraz and H. Solid-Lose, Prediction and modelling of doubly-charged ions in the Earth's upper atmosphere, *Ann. Geophys.*, **23**, 781-797, 2005.
- Singh, V., and R.P. Singhai, Binary encounter calculations of proton energy deposition in N₂, *J. Geophys. Res.*, **83**, 1655, 1978.
- Singh, V., and B.N. Dwivedi, Proton loss function in atomic oxygen, *Ind. J. Space Phys.*, **9**, 127, 1980.
- Singh, V., Energy loss function in molecular oxygen, *Planet. Space Sci.*, **29**, 261, 1981.
- Smith, D. and N.G. Adams, Elementary plasma reactions of environmental interest, *Topics Curr. Chem.*, **89**, 1-43, 1980.
- Solomon, S. C., Auroral particle transport using Monte Carlo and hybrid methods, *J. Geophys. Res.*, **106**, 107-116, 2001.

- Stamnes, K., Analytic approach to auroral electron transport and energy degradation, *Planet. Space Sci.*, **28**, 427-441, 1980.
- Stamnes, K., On the two-stream approach to electron transport and thermalization, *J. Geophys. Res.*, **86**, No.44, 2405-2410, 1981.
- Stamnes, K. and M. H. Rees, Inelastic scattering effects on photoelectron spectra and ionospheric electron temperature, *J. Geophys. Res.*, **88**, 6301-6309, 1983.
- Stamnes, K., S.-C. Tsay, W. Wiscombe and K. Jayaweera, Numerical stable algorithm for discrete-ordinate-method radiative transfer in multiple scattering and emitting layered media, *Applied Optics*, **27**, No. 12, 2502-2509, 1988.
- Stolte, W. C., Z. X. He, J. N. Cutler, Y. Lu, and J. A. R. Samson, Dissociative Photoionization Cross Sections of N_2 and O_2 from 100 to 800 eV, *At. Data Nucl. Data Tab.*, **69**, 171-179, 1998.
- Straub, H.C., P. Renault, B.G. Lindsay, K.A. Smith and R.F. Stebbings, Absolute partial cross sections for electron-impact ionisation of H_2 , N_2 and O_2 from threshold to 1000 eV, *Phys. Rev. A*, **54**, No. 3, 2146-2152, 1996.
- Strickland, D.J., R.E. Daniell Jr., J.R. Jasperse and B. Basu, Transport theoretic model for the electron-proton-hydrogen atom aurora, *J. Geophys. Res.*, **98**, No. A12, 21,533-21,548, 1993.
- Swartz, W.E., J.S. Nisbet and A.E.S Green, Analytical expression for the expression for the energy transfer rate from photoelectrons to thermal electrons, *J. Geophys. Res.*, **76**, No. 34, 8425-8426, 1971.
- Swartz, W.E. and J.S. Nisbet, Revised calculations of the F region ambient electron heating by photoelectrons, *J. Geophys. Res.*, **77**, No. 31, 6259-6261, 1972.
- Søraas, F., H.R. Lindalen, K. Måseide, A. Egeland, T.A. Sten, and D.S. Evans, Proton precipitation and the H_β emission in a postbreakup auroral glow, *J. Geophys. Res.*, **79**, No. 13, 1851-1859, 1974.
- Søraas, F., K. Måseide, P. Torheim, and K. Aarsnes, Doppler-shifted auroral H_β emission: a comparison between observations and calculations, *Ann. Geophys.*, **12**, 1052-1064, 1994.
- Søraas, F., and K. Aarsnes, Observations of ENA in and near a proton arc, *Geophys. Res. Lett.*, **23**, No. 21, 2959-2962, 1996.
- Søraas, F., K. Aarsnes, K. Oksavik, and D.S. Evans, Ring current intensity estimated from low-altitude proton observations, *J. Geophys. Res.*, **107**, No. A7, doi:10.1029/2001JA000123, 30.1–30.10, 2002.
- Synnes, S. A., F. Søraas, and J. P. Hansen: Monte-Carlo simulations of proton aurora, *J. Atmos. Sol. Terr. Phys.*, **60**, 1695--1705, 1998.
- Tanenbaum, B.S., *Plasma Physics*, McGraw-Hill, New York, 1967.

RÉFÉRENCES SCÉNIQUES

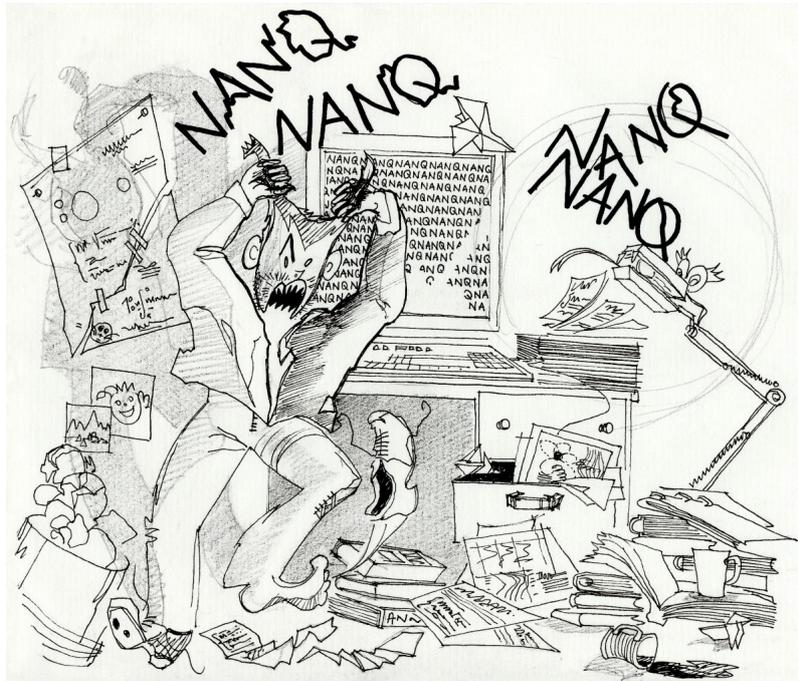
- Taylor, H.A., H.C. Brinton, S.J. Bauer, R.E. Hartle, P.A. Cloutier, R.E. Daniell and T.M. Donahue, The ionosphere of Venus: first observation of the day-night variation of the ion composition, *Science*, **205**, 96-99, 1979.
- Taylor, P.R. and H. Partridge, Theoretical determination of the ground state of N_2^+ , *J. Phys. Chem.*, **91**, No. 24, 6148-6151, 1987.
- Tobiska, W.K. and A. Barth, C. A solar EUV flux model, *J. Geophys. Res.*, **95**, 8243-8251, 1990.
- Tobiska, W.K., Revised solar extreme ultraviolet flux model, *J. Atmos. Terrest. Phys.*, **53**, No. 11/12, 1005-1018, 1991.
- Tobiska, W.K., Recent solar extreme ultraviolet irradiance observations and modeling: a review, *J. Geophys. Res.*, **98**, n°A11, 18879-18893, 1993.
- Tobiska, W.K. and F.G. Eparvier, EUV97: improvements to EUV irradiance modelling in the soft X-rays and FUV, *Solar Phys.*, **177**, n°1, 147-159, 1998.
- Thomson, J.J., Rays of positive electricity and their application to chemical analysis, 2nd ed., Longmans Green and Co., London, 1921.
- Torr, M.R., D.G. Torr, R.A. Ong, and H.E. Hinteregger, Ionization frequencies for major thermospheric constituents as a function of solar cycle 21, *Geophys. Res. Lett.*, **6**, n°10, 771-774, 1979.
- Torr, M.R., and D.G. Torr, The role of metastable species in the thermosphere, *Rev. Geophys. Space Phys.*, **20**, n°1, 91-144, 1982.
- Torr, M.R., D.G. Torr, Ionization frequencies for solar cycle 21: revised, *J. Geophys. Res.*, **90**, n°A7, 6675-6678, 1985.
- Toublanc, D., J.-P. Parisot, J. Brillet, D. Gautier, F. Raulin, C.P. McKay, Photochemical modeling of Titan's atmosphere, *Icarus*, **113**, 2-16, 1995.
- Van Dyke, M., *Perturbation Methods in Fluid Mechanics*, Academic Press, New York, 1964.
- Van Zyl, B., H. Neumann, T.Q. Le and R.C. Amme, $H + N_2$ and $H + O_2$ collisions: experimental charge-production cross sections and differential scattering calculations, *Phys. Rev. A.*, **18**, No.2, 506-516, 1978.
- Van Zyl, B., and H. Neumann, H_α and H_β emission cross sections for low-energy H and H^+ collisions with N_2 and O_2 , *J. Geophys. Res.*, **85**, 6006, 1980.
- Van Zyl, B., M.W. Gealy, and H. Neumann, Prediction of photon yields for proton aurorae in an N_2 atmosphere, *J. Geophys. Res.*, **89**, 1701, 1984.
- Vegard, L., Hydrogen showers in the auroral region, *Nature*, **144**, 1089, 1939.
- Vegard, L. and E. Tønsberg, Results from auroral spectrograms obtained at Tromsø observatory during the winters 1941-1942 and 1942-1943, *Geophys. Publik.*, **16**, No. 2, 1-12, 1944.

- Vegard, L., Emission spectra of night sky and aurora, *Report of the Gassiot Committee*, **82**, The Physical Society London, 1948.
- Victor, G.A, and E.R. Constantinides, Double photoionization and doubly charged ions in the thermosphere, *Geophys. Res. Lett.*, **6**, No. 6, 519-522, 1979.
- Wahlund, J.-E., H. J. Opgenoorth, I. Häggström, K. J. Winser, and G. O. L Jones, EISCAT observations of topside ionospheric ion outflows during auroral activity: Revisited, *J. Geophys. Res.*, **97**, 3019-3037, 1992.
- Wahlund, J.-E., R. Boström, G. Gustafsson, D. A. Gurnett, W. S. Kurth, and 10 colleagues, The inner magnetosphere of Saturn: Cassini RPWS cold plasma results from the first encounter, *Geophys. Res. Lett.*, **32**, 20, 2005.
- Wahlund, J.-E., R. Boström, G. Gustafsson, D. A. Gurnett, W. S. Kurth and 13 colleagues, Cassini Measurements of Cold Plasma in the Ionosphere of Titan, *Science*, **308**, 986-989, 2005.
- Walker, J.C.G., The density of O²⁺ ions in the topside ionosphere, *Planet. Space Sci.*, **18**, 559-564, 1970.
- Walker, I.K., J. Moen, L. Kersley, D.A. Lorentzen, On the possible role of cusp-cleft precipitation in the formation of polar cap patches, *Ann. Geophys.*, **17**, 1298-1305, 1999.
- Wilson, E. H. and S. K. Atreya, Current state of modeling the photochemistry of Titan's mutually dependent atmosphere and ionosphere, *J. Geophys. Res.: Plan.*, **109**, 6002, 2004.
- Winningham, J. D., and W. J. Heikkila, Polar cap auroral electron fluxes observed with Isis 1, *J. Geophys. Res.*, **79**, No. 7, 949-957, 1974.
- Witasse, O., Modélisation des ionosphères planétaires et de leur rayonnement : la Terre et Mars, Thèse de Doctorat, UJF/CNRS, Université Grenoble I, 2000.
- Witasse, O., O. Dutuit, J. Lilensten, R. Thissen, J. Zabka, C. Alcaraz, P.-L. Blelly, S.W. Bougher, S. Engel, L.H. Andersen and K. Seiersen, Prediction of a CO^{½+} layer in the atmosphere of Mars, *Geophys. Res. Lett.*, **29**, No. 8, 104-1, 2002.
- Witasse, O., O. Dutuit, J. Lilensten, R. Thissen, J. Zabka, C. Alcaraz, P.-L. Blelly, S.W. Bougher, S. Engel, L.H. Andersen and K. Seiersen, Correction to "Prediction of a CO^{½+} layer in the atmosphere of Mars", *Geophys. Res. Lett.*, **30**, No. 7, 12-1, 2003.
- Yamada, I., A. Danjo, T. Hirayama, A. Matsumoto, S. Ohtani, H. Suzuki, H. Tawara, T. Takayanagi, K. Wakiya and M. Yoshino, Electron impact ionization of O⁺, S⁺ and S²⁺ ions, *J. Phys. Soc. Jpn.*, **57**, No. 8, 2699-2704, 1988.
- Young, D.T., J. Geiss, H. Balsiger, P. Eberhardt, A. Ghielmetti, and H. Rosenbauer, Discovery of He²⁺ and O²⁺ ions of terrestrial origin in the outer magnetosphere, *Geophys. Res. Lett.*, **4**, No. 12, 561-564, 1977.

- Yousif, F. B., J. Geddes, and H. B. Gilbody, Balmer alpha emission in collisions of H , H^+ , H_2^+ and H_3^+ with N_2 , O_2 and H_2O , *J. Phys. B: At. Mol. Phys.*, **19**, 217-231, 1986.
- Ziegler, D.L., J.H. Newman, K.A. Smith, and R.F. Stebbings, Double ionisation of atomic oxygen by electron impact, *Planet. Space Sci.*, **30**, No. 5, 451-456, 1982.
- Zipf, E.C., The ionisation of atomic oxygen by electron impact, *Planet. Space Sci.*, **33**, No. 11, 1303-1307, 1985.

Ouvrages cités

- Conan Doyle, A., *The adventures of Sherlock Holmes*, Penguin Popular Classic, Reading, 1994, first publication 1892.
- De Mairan, J.-J. Dortous de, *Traité historique et physique de l'aurore boréale*, disponible en édition électronique Gallica-BNF, édition originale 1733.
- Kourouma, A., *En attendant le vote des bêtes sauvages*, Seuil, Paris, 1998.
- Saint-Exupéry, A. de, *Le Petit Prince*, Gallimard, Paris, 1999, édition originale 1943.
- Shakespeare, W., *As you like it*, Club Français du Livre, Paris, 1988, première édition 1623.
- Shakespeare, W., *Macbeth*, Club Français du Livre, Paris, 1988, première édition 1623.
- Shakespeare, W., *Romeo and Juliet*, Club Français du Livre, Paris, 1988, première édition 1599.



CONTRIBUTION À L'ÉTUDE DES ENTRÉES D'ÉNERGIE SOLAIRE DANS L'IONOSPHERE : IONS DOUBLEMENT CHARGÉS ET TRANSPORT CINÉTIQUE DES PROTONS – LA TERRE ET TITAN

Ce travail de thèse porte sur la modélisation des ionosphères planétaires comme celle de la Terre et de Titan à travers les processus de transport cinétique des électrons et des protons. La modélisation des ions doublement chargés N_2^{++} , O_2^{++} et O^{++} créés par photoionisation a constitué la première étape de ce travail. Les résultats de la simulation sont comparés avec succès aux seules données disponibles sur Terre pour O^{++} . De cette validation expérimentale, nous prédisons ainsi la présence d'ions moléculaires doublement chargés dans l'ionosphère de la Terre et de Titan. Dans un deuxième temps, nous détaillons la genèse du modèle d'ionosphère TRANS4, à travers le couplage et l'optimisation de différents codes de transport cinétique et fluide capables de modéliser simultanément les précipitations d'électrons et de protons. Ce modèle constitue un outil unique et cohérent de diagnostic de l'impact combiné des protons et des électrons sur l'ionosphère en permettant notamment le calcul des profils de raies Balmer de l'hydrogène. La comparaison aux données a permis ensuite une approche quantitative du comportement de l'ionosphère soumis à un événement actif proton-électrons, sous le triple angle des données radar, satellite et optique. Les perspectives sont nombreuses et le portage du code dans d'autres ionosphères telles Titan, Mars ou Vénus est une voie de recherche privilégiée, qui coïncide avec les mesures en direct des sondes Cassini, Mars Express et Vénus Express. Une collaboration étroite avec le Laboratoire de Chimie Physique (LCP, Orsay) ainsi qu'avec les universités d'Oslo et de Svalbard (UNIS) a été menée tout au long de ce travail.

Mots-clés : Ionosphères planétaires – Planétologie comparée – Modélisation numérique – Ions doublement chargés N_2^{++} , O_2^{++} et O^{++} – Transport cinétique des protons et des électrons – Terre – Titan – Coordinations sol/satellite – radars EISCAT.

CONTRIBUTION TO THE STUDY OF ENERGY INPUTS OF SOLAR ORIGIN IN THE IONOSPHERE: DOUBLY-CHARGED IONS AND PROTON KINETIC TRANSPORT – THE EARTH AND TITAN

This PhD project consists in the modelling of planetary ionospheres such as those of the Earth and Titan through high-energy transport processes occurring on the dayside and on the nightside at auroral latitudes. The modelling of the doubly-charged ions N_2^{++} , O_2^{++} and O^{++} created through photoionisation constitutes the first step of this work. The results are compared to the few atmospheric O^{++} data available on Earth, for which a very good agreement has been found, leading to the first prediction of molecular dications in the Earth's and Titan's ionospheres. In a second step, as a dynamical coupling and an updating of different kinetic codes, a consistent kinetic/fluid proto-electron numerical model called TRANS4 has been built, which makes it a unique tool to get a precise diagnostics of combined proton and electron impacts in the ionosphere. Perspectives are numerous, and one privileged track is to port the whole model to other planetary atmospheres, such as Mars, Venus or Titan, a will that coincides with the exciting success of Mars Express, Venus Express and Cassini-Huygens planetary missions. A fruitful collaboration with the Physico-Chemistry Laboratory (LCP, Orsay, France) as well as with the University of Oslo and the University Centre in Svalbard (UNIS, Norway) was successfully led throughout the building of this work.

Keywords: Planetary ionospheres – Comparative planetology – Numerical modelling – Doubly-charged ions N_2^{++} , O_2^{++} and O^{++} – Kinetic transport of protons and electrons – Earth – Titan – Coordinated satellite and ground-based instruments – EISCAT radars.

