

СПЕКТРОСКОПИЯ АТМОСФЕРНЫХ ГАЗОВ

УДК 551.501

А.В. Поляков, Ю.М. Тимофеев, М.В. Тонков, Н.Н. Филиппов

ВЛИЯНИЕ СДВИГА ЛИНИЙ НА ФУНКЦИИ ПРОПУСКАНИЯ АТМОСФЕРЫ НА КАСАТЕЛЬНЫХ ТРАССАХ

Проведены расчеты функций пропускания атмосферы для касательных трасс при наблюдениях из космоса в линиях поглощения HCl, HF и H₂O с учетом и без учета сдвига центров спектральных линий. Показано, что учет сдвига центров линий HCl, HF, H₂O и CH₄ необходим при интерпретации измерений функций пропускания на касательных трассах из космоса при спектральном разрешении измерений $\Delta\nu \leq 0,01 \text{ см}^{-1}$. Неучет сдвига центров линий может привести к дополнительным погрешностям (2–10% и более) в определении характеристик содержания указанных выше газов.

1. В настоящее время для определения различных параметров атмосферы оптическими методами в ИК-области спектра используется аппаратура со все более высоким спектральным разрешением (до 10^{-2} см^{-1} [2]). В частности, в спутниковых исследованиях газового состава атмосферы используются интерферометры с разрешением $\sim 0,01 \text{ см}^{-1}$ [1, 2]. При этом становится все более важным учет всех особенностей трансформации излучения в атмосфере. Теория уширения спектральных линий за счет столкновений молекул предсказывает сдвиг центров линий при изменении давления в газовой среде [3]. В рамках этой теории контур линии $f(\nu)$ описывается лоренцевской кривой:

$$f(\nu) \sim \frac{1}{\pi} \frac{\alpha p}{(\nu - \nu_0 - \gamma p)^2 + \alpha^2 p^2}, \quad (1)$$

где α и γ – полуширина и сдвиг спектральной линии; ν_0 – положение центра линии; p – давление.

Анализ литературных данных [4–5] показывает, что значения γ/α максимальны для HCl и HF и достигают 1,2 и 1,5 соответственно. Существенны сдвиги для линий водяного пара в ближней ИК-области. Для метана отношения γ/α достигают 0,1 в полосе 3,3 мкм и 0,3 в полосе 7,7 мкм. Значительны сдвиги для фундаментальной полосы NO и линий полосы $A \leftarrow X(0, 0)$ при 226 нм. Исследования влияния сдвига линий на различные оптические характеристики атмосферы были проведены в [5]. В настоящей статье приведены результаты расчетов функций пропускания на касательных трассах в атмосфере при наблюдениях из космоса.

2. Расчеты функций пропускания атмосферы $P_{\Delta\nu}(H_0)$ на касательных трассах были проведены на основе известного соотношения

$$P_{\Delta\nu}(H_0) = \frac{1}{\Delta\nu} \int_{\Delta\nu} \exp \left[- \int_{-\infty}^{\infty} k(\nu, s) N(s) ds \right] d\nu, \quad (2)$$

где $\Delta\nu$ – рассматриваемый спектральный интервал; $k(\nu, s)$ – коэффициент молекулярного поглощения; $N(s)$ – молекулярная плотность поглощающего газа; s – пространственная переменная вдоль трассы распространения излучения. Зависимости $k(\nu, s)$ и $N(s)$ определяются геометрией измерений и прицельной высотой H_0 . Для расчетов $P_{\Delta\nu}(H_0)$ была разработана специальная программа, обеспечивающая погрешность расчета пропускания $P_{\Delta\nu}(H_0)$ не хуже 0,1% (0,001). В расчетах использовались профили содержания газов и состояния атмосферы из известной работы [8]. Как мы отмечали выше, максимальные отношения γ/α наблюдаются для фундаментальных полос HCl (2900 см^{-1}) и HF (4000 см^{-1}) [6]. В связи с этим нами подробно были исследованы эффекты влияния сдвига центров линий для этих полос поглощения.

На рис. 1 приведены разности монохроматических функций пропускания в контуре линии поглощения HCl R5 для различных прицельных высот (здесь $\Delta P(\nu, H_0) = \Delta P^{(1)}(\nu, H_0) - \Delta P^{(2)}(\nu, H_0)$,

где $P^{(1)}$ и $P^{(2)}$ – функции пропускания, рассчитанные с учетом и без учета сдвига центра линии). Анализ приведенного рисунка и результатов расчетов для других спектральных линий HCl позволяет сделать следующие выводы:

а) Максимальные разности монохроматических функций пропускания в линиях HCl достигают 0,02–0,04 для прицельных высот $H_0 \in [10–20 \text{ км}]$.

б) Знак разности $\Delta P(\nu, H_0)$ в контуре линий меняется. Неучет сдвига линий занижает монохроматические функции пропускания при $(\nu - \nu_0) < 0$ и завышает $(\nu - \nu_0) > 0$.

в) Кривые разностей $\Delta P(\nu, H_0)$ симметричны относительно начала координат. Последние две особенности указывают на то, что для конечного спектрального разрешения влияние сдвига центров линий на функции пропускания будет меньше. Так, при $\Delta\nu \geq 0,02–0,03 \text{ см}^{-1}$ влияние сдвига будет пренебрежимо мало.

г) Максимальные разности монохроматических функций пропускания наблюдаются в окрестностях $|\nu - \nu_0| \approx 0,005 \text{ см}^{-1}$. С уменьшением прицельной высоты H_0 (и увеличением давления) спектральные области со значительными величинами $\Delta P(\nu, H_0)$ сдвигаются к крыльям линий.

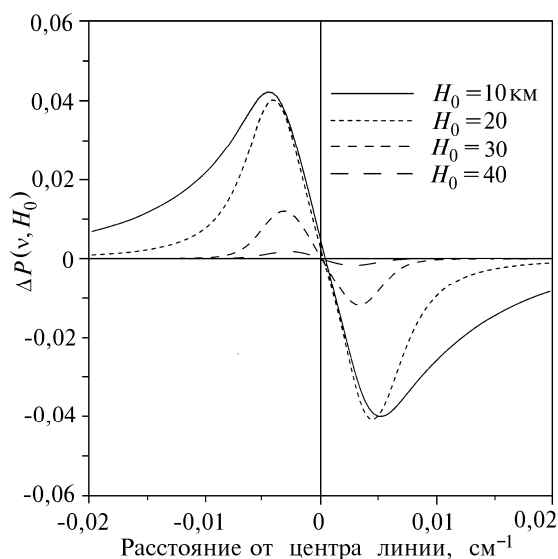


Рис. 1. Разности монохроматических функций пропускания в контуре линии поглощения HCl R5 для различных прицельных высот

Аналогичные численные исследования были проведены для линий поглощения HF. Были обнаружены подобные же эффекты сдвига линий, что и для линий HCl, но они оказались меньше. В частности, максимальные разности монохроматических функций пропускания на касательных трассах для линий поглощения HF не превышают 0,02–0,03 (линии R3 и R4).

Наибольший практический интерес представляет исследование влияния сдвигов линий на функции пропускания конечного спектрального разрешения. В таблице приведены примеры результатов, полученных для спектрального разрешения $\Delta\nu = 0,01 \text{ см}^{-1}$, которое соответствует интерферометрам ATMOS и DOP1 [2, 7].

Максимальные разности функций пропускания в линиях поглощения R-ветви HCl (в процентах абсолютного пропускания, по модулю)

$S, \text{ см}^{-1}$	Идентификация линий										
	R0	R1	R2	R3	R4	R5	R6	R7	R8	R9	R10
-0,020	0,1	0,6	0,8	0,8	0,9	0,7	0,3	0,2	0	0	0
-0,015	0,1	0,8	1,1	1,1	1,4	1,3	0,8	0,4	0	0	0
-0,010	0,2	1,2	1,5	1,9	2,4	2,4	1,8	1,0	0,4	0	0
-0,005	0,2	0,9	1,2	1,6	2,5	3,3	3,1	2,0	1,0	0,4	0,1
0	0	0	0	0,1	0,2	0,3	0,4	0,4	0,2	0,1	0,1
0,005	0,1	0,8	1,1	1,4	2,2	3,1	2,9	1,9	0,8	0,3	0
0,010	0,1	1,0	1,5	1,8	2,4	2,6	2,1	1,9	0,5	0,1	0
0,015	0,1	0,7	1,0	1,2	1,4	1,4	0,9	0,4	0,1	0,1	0
0,020	0	0,5	0,7	0,8	0,7	0,4	0,8	0,7	0,5	0,1	0

В таблице приведены максимальные разности $|\Delta P_{\Delta\nu}(\nu, H_0)|$ для различных значений $S = \nu - \nu_0$, где ν_0 – положение центра спектрального интервала измерений. Анализ данных таблицы и других многочисленных расчетов позволяет сделать следующие выводы.

Максимальные разности функций пропускания, рассчитанных с учетом и без учета сдвигов линий, при спектральном разрешении $\Delta\nu = 0,01 \text{ см}^{-1}$ достигают 3,3% (0,033) для HCl (линия R5) и 2,5% (0,25) для HF (линии R3 и R4). В среднем для наиболее интенсивных линий HCl и HF они составляют 1–2%.

Величины разностей $|\Delta P_{\Delta\nu}(\nu, H_0)|$ зависят от положения спектрального интервала измерений $\Delta\nu$ относительно центров линий. Максимальные разности наблюдаются при $S = \pm 0,005 \text{ см}^{-1}$. При $S = 0$, а также при измерениях в крыльях линий они очень малы.

Знак разностей $\Delta P_{\Delta\nu}(\nu, H_0)$ различен для длинноволновых и коротковолновых областей спектра в контурах линий поглощения.

Максимальные разности $|\Delta P_{\Delta\nu}(\nu, H_0)|$ наблюдаются для прицельных высот 10–20 км. Вне этого высотного диапазона эти разности не превышают 1%.

Как мы отмечали ранее, зарегистрированы значительные сдвиги центров линий поглощения H_2O в ближней ИК-области [4, 5]. На рис. 2 приведены результаты расчетов разностей монохроматических функций пропускания на касательных трассах в линии H_2O при $\nu = 13947,2608 \text{ см}^{-1}$ при учете и без учета сдвига линий (для исследованной линии отношение $\gamma/\alpha = 0,51$). Как следует из рисунка, эти разности достигают 14% ($H_0 = 10 \text{ км}$) и превышают 4% в диапазоне прицельных высот 8–12 км. Аналогичные эффекты наблюдаются для ряда других линий поглощения H_2O в рассматриваемой спектральной области. Можно также отметить, что в соответствии с опубликованными данными [9] подобное же влияние сдвигов линий на функции пропускания на касательных трассах следует ожидать для линий поглощения метана.

3. Оценим влияние неучета сдвига линий на погрешности определения характеристик газового состава атмосферы при использовании метода прозрачности из космоса [1]. Введем коэффициент R , характеризующий в линейном приближении связь между абсолютными погрешностями расчета функций пропускания на касательных трассах и относительными погрешностями определения концентрации поглощающего газа:

$$R = \Delta N/N/\Delta P_{\Delta\nu}(\nu, H_0). \quad (3)$$

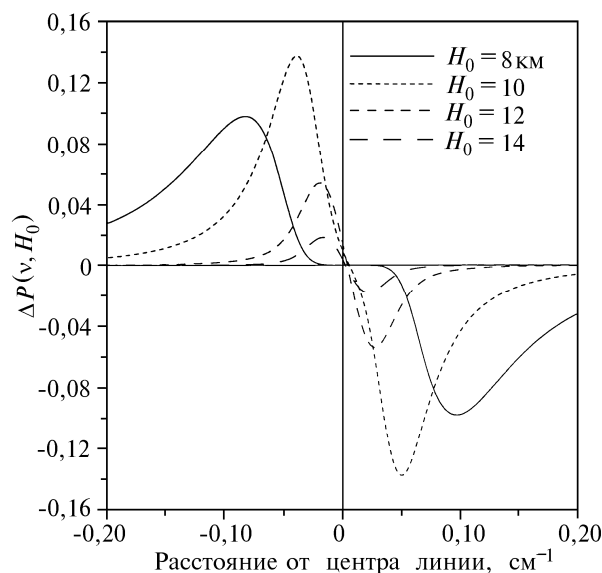


Рис. 2. Разности монохроматических функций пропускания в линии H_2O при $\nu_0 = 13947,2608 \text{ см}^{-1}$ для различных прицельных высот

В зависимости от режима поглощения солнечного излучения (слабое или сильное поглощение) значения R изменяются от 1,9 (минимальное значение) до 3–5. Следует иметь в виду, что коэффициент R зависит также от используемого метода интерпретации измерений функ-

ции пропускания. Так, если данные о характеристиках газового состава извлекаются из анализа эквивалентных ширин изолированных спектральных линий, например из интегрального поглощения в линиях HCl и HF, то дополнительные погрешности в определении содержаний HCl и HF за счет неучета сдвигов линий не превышают 0,2%.

В случае использования спектральных зависимостей измеренных функций пропускания на касательных трассах (как это делается в большинстве современных методов интерпретации) дополнительные погрешности в определении содержания HCl и HF будут составлять 2–10% в зависимости от используемой линии поглощения, спектрального разрешения ($\Delta\nu \leq 0,01 \text{ см}^{-1}$) и прицельной высоты измерений.

Многие современные методы интерпретации измеренных функций пропускания основаны на минимизации спектральных разностей измеренных и рассчитываемых величин. В этом случае, учитывая разные знаки в спектральных разностях $\Delta P(\nu, H_0)$ (см. рис. 1 и 2), можно утверждать, что неучет сдвига линий приведет к значениям R в уравнении (3), даже превышающим указанные выше величины.

Таким образом, основной вывод данной работы состоит в том, что при интерпретации измерений прозрачности атмосферы на касательных трассах из космоса при спектральном разрешении измерений $\Delta\nu \leq 0,01 \text{ см}^{-1}$ необходимо учитывать сдвиги центров линий для фундаментальных полос HCl и HF, полос поглощения H₂O в ближней ИК-области спектра, а возможно также полос поглощения метана. В противном случае полученные данные о характеристиках содержания указанных газов в атмосфере будут отягощены дополнительными систематическими погрешностями, значения которых могут достигать 2–10% и более.

Данная работа выполнена при частичном финансировании Российского фонда фундаментальных исследований (гранты N 94-05-17409 и 96-05-64616) и ESTEC (Contract No 10603/93/NL/NB).

1. Тимофеев Ю. М. // Изв. АН СССР. Сер. ФАО. 1989. Т. 25. N 5. С. 451–469.
2. Farmer C. B. // Microchim. Acta. 1987. V. IV. N 2. P. 189–214.
3. Goody R. M., Yung J. L. Atmospheric Radiation. 2nd ed. N 4. Oxford Univ. Press., 1989. 519 с.
4. Быков А. Д., Пономарев Ю. Н., Саница Л. Н. // Оптика атмосферы и океана. 1992. Т. 5. N 9. С. 931–938.
5. Hollweg H.-D., Kostsov V. S., Schlüssel G., Schlüssel P., Timofeyev Yu. M., Tonkov M. V., Polyakov A. V., Filippov N. N. // Interaction at mm Optical Frequencies, Part II: Specific Atmospheric Absorption and Emission Features: Investigation and Modelling. Berichte aus dem Zentrum für Meeres- und Klimaforschung, Reihe A: Meteorologie. 1995. Nr. 18 (Contract No. 10603/93/NL/NB. Final Report). Hamburg. 224 p.
6. Pine A. S., Looney J. P. // J. Mol. Spectroscop. 1987. V. 122. N 1. P. 41–55.
7. Тимофеев Ю. М., Длугоборская Л. И., Косцов В. С., Осипов В. М., Фуррер Р. // Исследование Земли из космоса. 1995. N 1. С. 12–24.
8. Anderson G. P., Chetwynd J. H., Clough S. A., Shettle E. P., Kneizys F. X. AFGL Atmospheric Constituent Profiles (0–120 km). AFGL-TR-86-0110, AFGL, 1986. 43 P.
9. Rothman L. S., Gamache R. R., Tipping R. H., Rinsland C. P., Smith M. A. H., Benner D. C., Malathy-Devi V., Flaud J. M., Camy-Peyret C., Perrin A., Goldman A., Massie S. T., Brown L., and Toth R. A. The HITRAN molecular database: editions of 1991 and 1992 // J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer. 1992. V. 48. P. 469–507.

Санкт-Петербургский
государственный университет

Поступила в редакцию
15 июля 1996 г.

A. V. Polyakov, Yu. M. Timofeyev, M. V. Tonkov, N. N. Filippov. **Line Shift Influence on Atmospheric Slant Path Transmittance Functions.**

Atmospheric slant path transmittance functions in HCl, HF, and H₂O absorption lines are calculated with and without account for line center shifts for a case of remote sensing from space. It has been shown that line shift effect in HCl, HF, H₂O and CH₄ lines has to be taken into account in interpreting the space measurements of slant path transmittance with spectral resolution $\Delta\nu \leq 0,01 \text{ см}^{-1}$. For above gases the additional errors of content characteristic retrieval caused by neglecting these effects may range up to 2–10%.