

Ю.В. Воронина, О.Н. Сулакшина, К.М. Фирсов

## Пропускание атмосферы в полосах поглощения озона для УФ-каналов спектрофотометра SP-6

Институт оптики атмосферы СО РАН, г. Томск

Поступила в редакцию 22.05.2006 г.

Приведены оценки погрешности расчета функций пропускания в спектральном диапазоне 300–350 нм при использовании современной спектроскопической информации о сечениях поглощения озона, исследовано влияние вариаций вертикальных профилей температуры на изменчивость функции пропускания, обсуждаются особенности параметризации функции пропускания для УФ-каналов спектрофотометра SP-6.

### Введение

Общеизвестно, что озон — одна из важнейших газовых составляющих атмосферы [1], которая поглощает опасную для живых организмов УФ-радиацию, а в длинноволновом диапазоне задерживает собственное излучение Земли, приводя к парниковому эффекту. Многие эксперты обращают внимание на необходимость развития систем регулярных наблюдений за газовой-аэрозольным составом атмосферы, включая озон [2]. Тем не менее только в последние годы в Сибири на основе солнечных спектрофотометров SP-6 — SP-8 начинается создание сети для регулярных измерений аэрозольной оптической толщи и общего содержания ряда парниковых газов (таких как  $H_2O$ ,  $O_3$ ) [3].

Солнечный фотометр SP-6 в настоящее время в рутинном режиме позволяет определять вышеуказанные характеристики за исключением общего содержания озона (ОСО). Солнечная спектрофотометрия атмосферы (метод прозрачности) является одним из эффективных и достаточно простых методов определения общего содержания озона. Первыми российскими приборами, работающими по прямому солнечному излучению, были озонметры Гущина [4]. Примером современной реализации озонметров являются фотометры Добсона [4], Брюера [6].

В работе [7] приводятся результаты восстановления ОСО при использовании радиометра UV-MFRSR и показано хорошее согласие с результатами измерений фотометрами Добсона [4], Брюера [6] (различия не превышало 4%). Методика восстановления ОСО достаточно простая (описание см., например, [4, 7]). Погрешность восстановления ОСО тесно связана с погрешностью расчета функции пропускания атмосферы, которая, в свою очередь, зависит от используемой спектроскопической информации и погрешностей параметризации. В настоящее время имеется большое число экспериментальных данных по сечениям поглощения озона, полученных при различных условиях (температура, разрешение, спектральный интервал) [8, 10–12].

Целью данной работы является параметризация функции пропускания для решения задачи восстановления общего содержания озона по данным измерений прямой солнечной радиации спектрофотометром SP-6. Для этого выполнены оценки погрешностей расчета функций пропускания атмосферы в УФ-каналах спектрофотометра SP-6, обусловленные неопределенностями в сечениях поглощения озона и учетом вариаций профилей температуры; исследован вид параметрической зависимости функции пропускания от поглощающей массы озона.

### Сечения поглощения озона для расчета функций пропускания

Для атмосферных исследований в спектральном интервале 300–350 нм данные по сечениям поглощения озона можно найти в работах [10–13] и базе данных HITRAN [8]. В табл. 1 приведены некоторые характеристики этих сечений поглощения.

Таблица 1

Общие характеристики данных по сечениям поглощения озона

Разрешение, нм	Температура, К	Интервал длин волн, нм	Ссылка
0,025	200, 220, 240, 260, 280, 300	245–343	[8]
0,01	218, 228, 243, 273, 298	195–345	[10, 11]
0,5	226, 263, 298	185–350	[12]
0,2–1,9	181, 214, 243, 291	244–340	[13]
1	206, 225, 271, 298	253–370	[14]

В критическом обзоре [15] для диапазона 300–350 нм рекомендуется использовать экспериментальные данные по сечениям поглощения из работы [10] либо [8]. Следует отметить, что сечения поглощения, приведенные в базе данных HITRAN, получены на основе экспериментальных данных [16] путем пересчета, для чего использовались кубические сплайны. Вышеуказанные данные получены при высоком разрешении, охватывают наиболее

важные атмосферные температуры и имеют наименьшие систематические погрешности среди имеющихся данных.

Действительно, сравнение данных, приведенных в [8, 10], показало, что различия в сечениях поглощения в интересующем нас спектральном диапазоне при температуре 300 К не превышали 2%, а различия в спектральном пропускании атмосферы для летних условий и различных оптических масс ( $m$ ) не превышали 1%, причем визуально эти два расчета не различимы.

Что касается данных, полученных с более грубым разрешением [12], то расчет пропусканий с их использованием приводил к более сглаженной спектральной зависимости, чем при использовании сечений поглощения из работы [8], а расхождения достигали 10%. Поэтому для расчета функции пропускания более предпочтительными являются сечения поглощения из базы данных HITRAN [8], так как они хорошо описывают спектральную зависимость сечений поглощения озона и имеют более грубое разрешение, чем спектральные данные из [10], и, следовательно, расчет осуществляется более быстро.

## Методика расчета и параметризации функций пропускания атмосферы для УФ-каналов солнечного фотометра SP-6

Детальное описание солнечных фотометров дано в [3, 17]. В УФ-диапазоне фотометр SP-6 имеет четыре спектральных канала с центрами на длинах волн 308, 324, 340, 371 нм. Аппаратные функции фотометра были рассчитаны на основе экспериментально измеренных спектральных зависимостей пропускания соответствующих интерференционных фильтров и чувствительности приемника излучения.

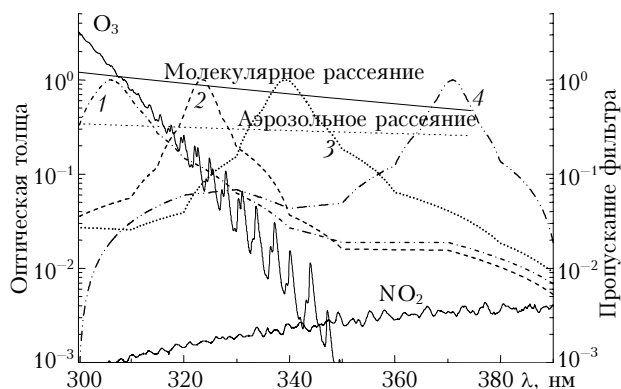


Рис. 1. Спектральные зависимости оптических толщ, обусловленные аэрозольным и молекулярным рассеянием и поглощением молекулами  $O_3$  и  $NO_2$ . Спектральное пропускание фильтров (центры фильтров: 1 – 308, 2 – 324, 3 – 340, 4 – 371 нм)

Для того чтобы в целом охарактеризовать спектральный диапазон 300–350 нм, на рис. 1 приведены спектральные зависимости оптической толщи  $O_3$ ,  $NO_2$ , аэрозольной и молекулярной, рассчи-

танные для вертикальной атмосферной трассы 0–100 км. Исходные данные для расчетов следующие: сечения поглощения озона и  $NO_2$  заимствованы из [8], аэрозольная оптическая толщина построена согласно данным AERONET для г. Томска (данные 2003 г.). Из рис. 1 видно, что аэрозольное и молекулярное рассеяния имеют выраженную спектральную зависимость и вследствие этого являются мешающими факторами для восстановления ОСО. Однако для молекулярного рассеяния существуют аналитические модели, описывающие поведение молекулярного рассеяния, поэтому его влияние можно предварительно учесть. Влияние  $NO_2$  на длинах волн 308 и 324 нм незначительно, и его можно не учитывать при решении обратной задачи.

Измеряемое спектрофотометром солнечное излучение, прошедшее атмосферу, можно рассчитать по формуле

$$S = CT_a(\lambda)T_R(\lambda)T_{gas}(\lambda),$$

где  $C$  – константа калибровки;  $T_a$ ,  $T_R$  – спектральное пропускание атмосферы, обусловленное аэрозольным и молекулярным рассеянием соответственно;  $T_{gas}$  – спектральное пропускание, обусловленное молекулярным поглощением.

Функция пропускания на длине волны  $\lambda$  при зенитных углах меньше  $70^\circ$ :

$$T_{gas}(\lambda) = \int_{\lambda-\Delta\lambda}^{\lambda+\Delta\lambda} F(\lambda')I_0(\lambda') \times \exp\left(-\frac{1}{\cos\theta} \int_0^H \alpha(\lambda', h) dh\right) d\lambda' \Bigg/ \int_{\lambda-\Delta\lambda}^{\lambda+\Delta\lambda} F(\lambda, \lambda')I_0(\lambda') d\lambda',$$

где  $H$  – верхняя граница атмосферы;  $\alpha(\lambda', h)$  – объемный коэффициент поглощения на высоте  $h$  и длине волны  $\lambda'$ ;  $\theta$  – зенитный угол склонения Солнца;  $F(\lambda, \lambda')$  – аппаратная функция спектрофотометра на длине волны  $\lambda'$ ,  $\lambda$  определяет положение максимума пропускания аппаратной функции;  $I_0(\lambda)$  – поток излучения от Солнца, падающий на верхнюю границу атмосферы. Объемный коэффициент поглощения озона связан с сечением поглощения  $\sigma$  соотношением  $\alpha = \sigma n_{O_3}$ , где

$$n_{O_3} = n_0(P_{O_3}T_0/P_0T')$$

– число молекул озона в объеме  $1 \text{ см}^3$  при температуре воздуха  $T'$  и парциальном давлении озона  $P_{O_3}$ ;  $n_0$  – число Лосмидта (при нормальных атмосферных давлении и температуре:  $P_0 = 1 \text{ атм}$ ,  $T_0 = 273,15 \text{ К}$ ).

Для решения обратной задачи восстановления ОСО из измерений прямого солнечного излучения необходима функциональная зависимость пропускания от поглощающей массы газа. Как правило, чтобы получить такую зависимость, привлекают модели полос, и параметрическое выражение для функции пропускания имеет вид  $T_{gas}(\lambda) = \exp(-\beta(mW)^n)$ , где  $\beta$  и  $n$  – параметры модели, которые определяются путем подгонки к расчетной функции пропускания;  $W$  – ОСО;  $m = 1/\cos\theta$ . В том случае, ко-

гда расстояние между спектральными линиями сопоставимо с их полушириной, типичное значение параметра  $n = 1$ . Однако результаты моделирования для аппаратной функции фотометра с центром на длине волны 308 нм привели к неожиданному результату: значение параметра  $n$  менялось от 0,7 до 0,3 (рис. 2).

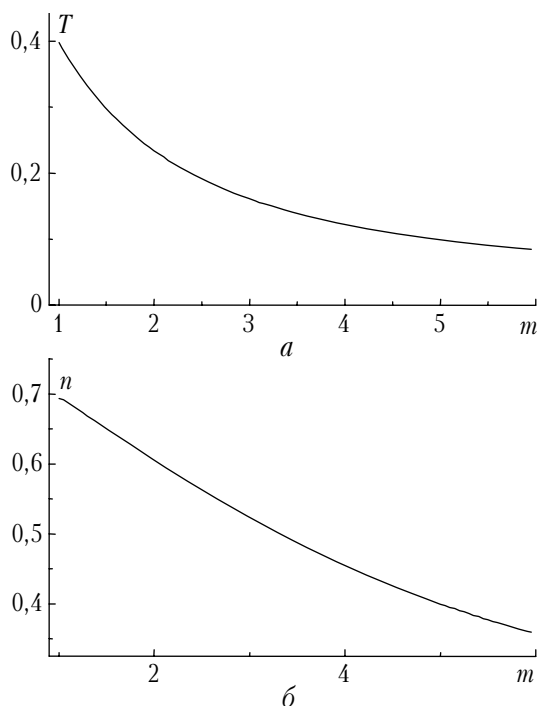


Рис. 2. Зависимость пропускания  $T$  от  $m$  (а) и параметра  $n$  от  $m$  (б)

Был также проведен расчет зависимости функции пропускания от поглощающей массы озона, когда использовалась треугольная аппаратная функция шириной 2 нм на полувысоте (разрешение, подобное радиометру UV-MFRSR). Оказалось, что в этом случае параметр  $n$  принимал стандартное значение  $n = 1$ , соответствующее теоретическим предсказаниям.

Чтобы объяснить причины такого поведения параметра  $n$ , мы обратились к модели изолированной линии с лоренцевским контуром (рис. 3, б).

Если пропускание рассчитывается для прямоугольной аппаратной функции, то в зависимости от значения оптической толщи в центре линии ( $\tau$ ) справедливо либо приближение слабой линии  $T = \exp(-\beta m W)$  при  $\tau < 1$ , либо приближение сильной линии  $T = \exp(-\beta \sqrt{m W})$  при  $\tau \gg 1$ , т.е. приближение сильного поглощения ( $n = 0,5$ ) выполняется при условии, что в центре линии наблюдается насыщение ( $\tau \gg 1$ ). Если полосу поглощения озона рассматривать как некую эффективную линию с центром на длине волны 300 нм, то с ростом воздушной массы  $m$  происходит насыщение вблизи центра аппаратной функции фотометра SP-6. Область спектра левее 300 нм можно не принимать во внимание, так как для всех значений  $m$

спектральное пропускание близко к 0 и вклад в функцию пропускания нет. Из вышесказанного становится ясной причина того, что параметр  $n$  отличен от 1.

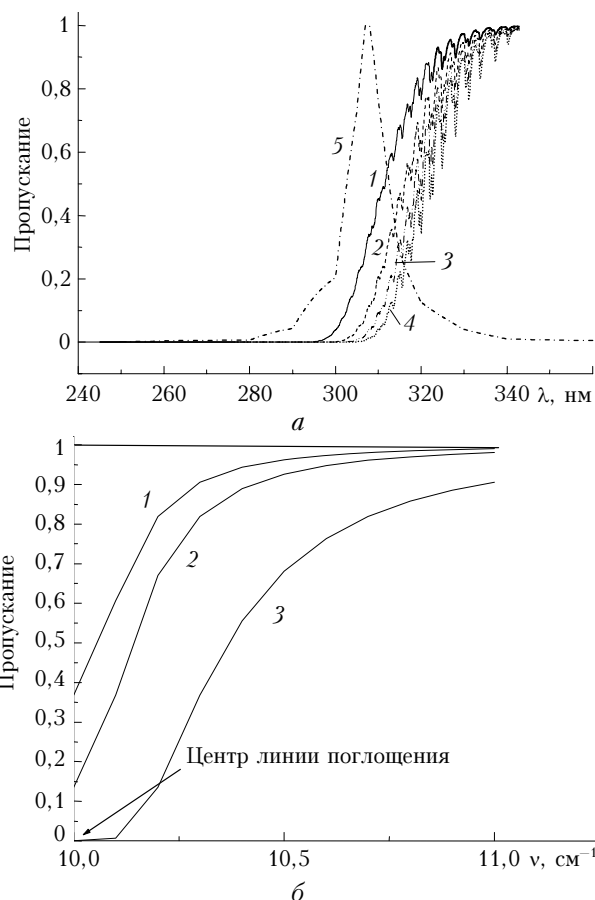


Рис. 3. Спектральная прозрачность атмосферы для разных воздушных масс  $m$ : кривые 1–4 – для  $m = 1, 2, 3, 4$ ; кривая 5 – спектральное пропускание приборного фильтра с центром 308 нм (а); спектральное пропускание изолированной линии для разных значений  $\tau$  (1 –  $\tau = 0,5$ ; 2 – 1; 3 – 3) (б)

### Влияние вариаций температуры на изменчивость функций пропускания

Пропускание в полосах атмосферных газов зависит не только от поглощающей массы, но и от вертикальных профилей давления и температуры воздуха. Если для используемого спектрального канала спектрофотометра наблюдается заметная зависимость пропускания атмосферы от этих профилей, то разработка методики восстановления общего содержания газа проблематична, так как процесс измерения солнечной радиации, как правило, не сопровождается измерениями профилей температуры. Поэтому было исследовано влияние вариаций метеопараметров на функцию пропускания в каналах, используемых для восстановления ОСО. Для этого профиль температуры сдвигался на величину стандартного отклонения, взятого из [18]. Были получены 6 профилей температуры: для каждой высоты температура воздуха изменялась на

величину  $\pm\sigma_t$ ,  $\pm 2\sigma_t$ ,  $\pm 3\sigma_t$  ( $\sigma_t$  — стандартное отклонение температуры). В табл. 2 приведены значения стандартного отклонения температуры воздуха для диапазона высот атмосферы от 0,12 до 60 км.

Таблица 2  
Стандартные отклонения температуры для высоты от 0,12 до 60 км

H, км	Температура, К	Стандартное отклонение, К
0,12	293,7	7
10	235,3	5,8
20	219,2	5,5
30	233,7	4,5
40	257,5	9
50	275,7	8,4
60	257,1	7

Результаты моделирования показали, что отклонения пропускания при изменении профиля температуры на величину  $\pm\sigma_t$  для канала 308 нм составляют не более 0,7%, при изменении на  $\pm 2\sigma_t$  — не более 1,3%, а при изменении на  $\pm 3\sigma_t$  — не более 3%. Аналогичные цифры для канала 324 нм составили 0,6, 1,7 и 2,8% соответственно, т.е. вариации температуры не приводят к большой изменчивости функций пропускания атмосферы в каналах зондирования озона.

### Заклучение

В настоящее время расчет пропускания атмосферы в полосах поглощения озона в УФ-диапазоне спектра 300–350 нм возможен с высокой точностью при использовании сечений поглощения [8, 10]. Показано, что вариации температуры воздуха для летних условий не приводят к заметной изменчивости функций пропускания атмосферы для каналов 308 и 324 нм спектрофотометра SP-6. Выявлено, что для спектрального канала 308 нм оптическая толщина нелинейно зависит от поглощающей массы озона.

Работа выполнялась при финансовой поддержке гранта РФФИ № 04-07-90123.

1. Хргиан А.Х., Кузнецов Г.И. Проблемы наблюдений и исследований атмосферного озона. Л.: Гидрометеоиздат, 1981. 291 с.
2. Кондратьев К.Я. Глобальные изменения климата: факты, предположения и перспективы разработок // Оптика атмосф. и океана. 2002. Т. 15. № 10. С. 851–866.
3. Сакерин С.М., Кабанов Д.М., Ростов А.П., Турчинович С.А., Турчинович Ю.С. Система сетевого мониторинга радиационно-активных компонентов атмосферы. Часть I. Солнечные фотометры // Оптика атмосф. и океана. 2004. Т. 17. № 4. С. 354–360.
4. Гуцин Г.П. Методы, приборы и результаты измерения спектральной прозрачности атмосферы. Л.: Гидрометеоиздат, 1988. 200 с.

5. Komhyr W.D. Operation handbook-Ozone observations with a Dobson spectrophotometer // WMO Global Ozone Research and Monitoring Project Rep. N 6 (World Meteorological Organization, Geneva Switzerland). 1980. 125 p.
6. Kerr J.B., McElroy C.T., Evans W.F. The automated Brewer spectrophotometer for measurements of SO<sub>2</sub>, O<sub>3</sub>, and aerosols // Proc. of the WMO/ AMS/ CMOS Symp. on meteorol. observat. and instrument. 1985. P. 396–401.
7. Slusser J.R., Gibson J., Bigelow D.S., Kolinski D., Mou W., Koenig G., Beaubien A. Comparison of column ozone retrievals by use of an UV multifilter rotating shadow-band radiometer with those from Brewer and Dobson spectrophotometers // Appl. Opt. 1999. V. 38. N 9. P. 1543–1551.
8. Rothman L.S., Jacquemart D., Barbe A., Chris Benner D., Birk M., Brown L.R., Carleer M.R., Chackerian C., Jr., Chance K., Coudert L.H., Dana V., Devi V.M., Flaud J.-M., Gamache R.R., Goldman A., Hartmann J.-M., Jucks K.W., Maki A.G., Mandin J.-Y., Massie S.T., Orphal J., Perrin A., Rinsland C.P., Smith M.A.H., Tennyson J., Tolchenov R.N., Toth R.A., Vander Auwera J., Varanasi P., Wagner G. The HITRAN-2004 Molecular Spectroscopy Database // J. Quant. Spectrosc. and Radiat. Transfer. 2005. V. 96. N 2. P. 139–204.
9. Anderson G., Clough S., Kneizys F., Chetwynd J., Shettle E. AFGL Atmospheric Constituent Profiles (0–120 km) // Air Force Geophysics Laboratory. AFGL-TR-86-0110. Environ. Res. Paper. 1986. N 954. 25 p.
10. Daumont D., Brion J., Charbonnier J., Malicet J. Ozone UV spectroscopy I: Absorption cross section at room temperature II // J. Atmos. Chem. 1992. V. 15. N 2. P. 145–155.
11. Malicet J., Daumont D., Charbonnier J., Parisse C., Chakir A., Brion J. Ozone UV Spectroscopy II: Absorption Cross-Sections and Temperature Dependence // J. Atmos. Chem. 1995. V. 21. N 3. P. 263–273.
12. Molina L.T., Molina M.J. Absolute absorption cross sections of ozone in the 185 to 350 nm wavelength range // J. Geophys. Res. D. 1986. V. 91. N 13. P. 14500–14508.
13. Vigroux E. Absorption d'ozone dans le domain spectral situe au-dessous de 3130 A effect de la temperature // Comptes Rendus. 1952. V. 234. P. 2439–2440.
14. Davenport J.E. Parameters for Ozone Photolysis as a Function of Temperature at 280–330 nm FAA-EE-80-44 R. 1982.
15. Orphal J. A critical review of the absorption cross-sections of O<sub>3</sub> and NO<sub>2</sub> in the ultraviolet and visible // J. Photochem. and Photobiol. A: Chemistry. 2003. V. 2–3. N 157. P. 185–209.
16. Bass A.M., Paur R.J. UV absorption cross-sections for ozone: the temperature dependence // J. Photochem. 1981. V. 17. N 1. P. 141.
17. Кабанов Д.М., Сакерин С.М., Турчинович С.А. Солнечный фотометр для научного мониторинга (аппаратура, методики, алгоритмы) // Оптика атмосф. и океана. 2001. Т. 14. № 12. С. 1162–1169.
18. Зуев В.Е., Комаров В.С. Статистические модели температуры и газовых компонент атмосферы. Л.: Гидрометеоиздат, 1985. 199 с.

Yu.V. Voronina, O.N. Sulakshina, K.M. Firsov. Atmospheric transmission in ozone absorption bands for SP-6 spectrophotometer UV channels.

Calculation errors for the transmission function in a 300–350 nm spectral range are estimated involving the present-day information on ozone absorption cross-sections; the effect of temperature vertical profile variations on the transmission function variability is studied; and peculiarities of the transmission function parametrization for SP-6 spectrophotometer UV channels are discussed.