

Э.И. Воронина, В.Е. Привалов, В.Г. Шеманин

Лазерное зондирование молекул HF в атмосфере: вопросы численного моделирования

Санкт-Петербургский государственный политехнический университет

Поступила в редакцию 2.03.2007 г.

Выполнены численные расчеты логарифма мощности комбинационного рассеяния в направлении назад от расстояния зондирования для молекулы HF с концентрациями 10^{16} и 10^{19} см⁻³, для выбранных длин волн YAG:Nd-лазера и диапазона расстояний 1 ... 1000 м. Выполнено численное решение лидарного уравнения для дифференциального поглощения и рассеяния и определены диапазоны концентраций молекул HF и расстояний зондирования. Определены оптимальные условия.

Широкое применение лидаров комбинационного рассеяния света (КР-лидаров) и лидаров дифференциального поглощения и рассеяния (ДПР) в инфракрасном (ИК) диапазоне для зондирования ультрамалых концентраций газовых молекул [1–7] позволяет предположить возможность использования таких лидаров для дистанционного зондирования молекул HF в атмосфере. В данной статье представлена оценка потенциальных возможностей таких лидаров для зондирования молекул HF в различных экспериментальных условиях.

Зондирование молекул фторводорода методом КР

Для выбора оптимального варианта КР-лидарной системы для измерения концентрации исследуемых молекул HF в атмосфере в различных условиях зондирования и получения максимальной мощности КР на фотоприемнике лидара необходимо численное решение лидарного уравнения для КР в виде [1]:

$$P(\lambda, R) = P_L K_1 \Delta R A_0 \times \\ \times T(\lambda_L, R) T(\lambda, R) \left[\frac{d\sigma(\lambda_L)}{d\Omega} \right] N_a / R^2, \quad (1)$$

где P_L — мощность лазера; λ_L — длина волны; K_1 — постоянная лидара; $\Delta R = (c\tau_i)/2$ — шаг по расстоянию; c — скорость света; τ_i — время одного измерения (его минимальное значение определяется длительностью лазерного импульса); A_0 — площадь приемного телескопа; $T(\lambda_L, R)$, $T(\lambda, R)$ — пропускание атмосферы соответственно на длине волны лазерного излучения и сигнала КР; $d\sigma(\lambda_L)/d\Omega$ — дифференциальное сечение КР исследуемой молекулы на длине волны лазера; N_a — концентрация молекул.

Для выполнения таких расчетов мощности излучения КР в направлении назад молекулами HF были выбраны четвертая, третья, вторая и основная гармоники YAG:Nd-лазера с длинами волн лазер-

ного излучения 266, 355, 532 и 1064 нм. Волновое число полосы КР валентного колебания молекулы HF — 3959 см⁻¹. Значения пропускания атмосферы на длинах волн лазеров и КР рассчитывались по формулам из [1].

Значения длин волн полос КР для этих длин волн лазерного излучения и значения коэффициентов ослабления в атмосфере, относительной спектральной чувствительности ФЭУ, рассчитанные для этих же длин волн лазеров и полос КР исследуемой молекулы, приведены в табл. 1. В связи с отсутствием экспериментальных данных о дифференциальном сечении КР молекулой HF эти величины были оценены по значениям интенсивностей КР молекул фторуглеродов из [8] и с учетом зависимости $1/\lambda^4$ приведены в последнем столбце табл. 1.

Таблица 1

Значения длин волн лазерного излучения, полос КР, коэффициентов ослабления в атмосфере, относительной спектральной чувствительности ФЭУ и дифференциальные сечения КР для длин волн лазеров и полос КР-света молекулами HF

Излучатель	λ , нм	$k(\lambda, R)$, км ⁻¹	$\xi_p(\lambda)$	$S_b(\lambda)$, Вт/(м ² ·ср·нм)	$(d\sigma/d\Omega) \cdot 10^{30}$, см ² /ср
Лазер	266	0,785	—	—	2,576
	355	0,310	—	—	0,812
	532	0,160	—	—	0,161
	1064	0,118	—	—	0,010
HF	297	0,480	0,290	$6 \cdot 10^{-6}$	—
	413	0,220	0,945	0,000114	—
	674	0,145	0,270	0,009	—
	1838	0,095	0,540	0,0007	—

Остальные параметры задачи были следующими: пиковая мощность лазерного излучения $P_L = 100$ кВт; шаг по расстоянию $\Delta R = 7,5$ м для времени измерения 50 нс; постоянная лидара $K_2 = 0,495$ на длине волны 532 нм [1]; площадь приемного телескопа $A_0 = 0,008$ м².

С использованием этих значений параметров в лидарном уравнении для КР [1] были выполнены

численные расчеты для молекулы HF с концентрациями 10^{16} и 10^{19} см⁻³ для выбранных длин волн YAG:Nd-лазера и диапазона расстояний 1 ... 1000 м. Результаты расчетов представлены в виде графиков зависимости логарифма мощности КР в направлении назад от расстояния зондирования.

Для оценки мощности солнечного фона по уравнению из [9] значения $S_b(\lambda)$ для выбранных длин волн были взяты из [2] и приведены в предпоследнем столбце табл. 1. На рис. 1 приведены в виде прямых, параллельных оси абсцисс, результаты расчетов мощности солнечного фона и зависимости мощности сигнала КР молекулами HF с концентрацией $N_a = 10^{19}$ см⁻³ в направлении назад от расстояния зондирования R .

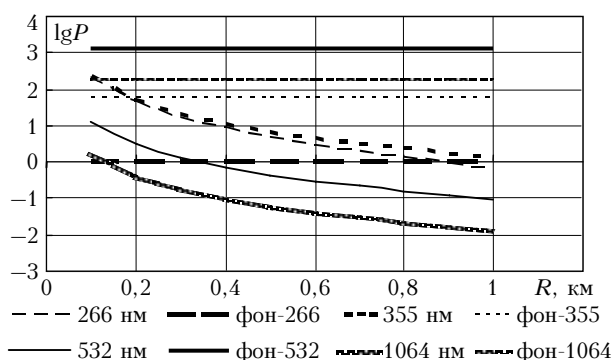


Рис. 1. Зависимости логарифма мощности сигнала КР в направлении назад от расстояния зондирования в диапазоне 0,1 ... 1,0 км молекул HF с концентрацией $N_a = 10^{19}$ см⁻³ для выбранных длин волн лазера. Для сравнения приведен уровень фоновой мощности на фотоприемнике КР-лидара

Расчеты показывают, что возможности КР-лидара в режиме однократного зондирования молекул HF с концентрацией порядка 10^{19} см⁻³ на соответствующих длинах волн в дневное время суток ограничены расстояниями: на 1064 нм — 8 м; 532 нм — 10 м; 355 нм — 190 м; 266 нм — 850 м. Минимальная концентрация молекул HF, которую можно зарегистрировать в дневных условиях зондирования на расстоянии 1 м от излучателя, составляет примерно 10^{13} см⁻³, на 10 м — 10^{15} см⁻³ и на 100 м — 10^{17} см⁻³.

Малые значения дифференциальных сечений колебательных линий КР газовых молекул требуют довольно больших концентраций молекул для получения достаточного отношения сигнала к шуму. Это вынуждает искать более эффективные методы зондирования. Из всех известных спектроскопических эффектов наибольшим сечением взаимодействия обладает резонансное поглощение в видимой и ИК-областях спектра [2].

Это и определяет возможность дистанционных измерений на больших расстояниях зондирования малых концентраций молекул.

Зондирование молекул фторводорода методом ДПР

В отличие от КР-лидара в ДПР-лидаре используются два лазерных луча с различными длинами

волн, причем одна длина волны попадает в максимум линии поглощения молекулы, вторая — вне этой полосы и ослабление этих пучков определяется по сигналам упругого рассеяния назад. Информация о распределении концентрации исследуемых молекул в атмосфере рассчитывается по отношению регистрируемых ДПР-лидарных сигналов на этих двух длинах волн в достаточно узком спектральном интервале [3, 4].

Для оценки возможностей такого метода зондирования молекул HF было выполнено численное решение лидарного уравнения для ДПР [3] и определены диапазоны концентраций молекул и расстояний зондирования.

Уравнение для самого общего случая ДПР в предположении о различии всех сомножителей, зависящих от длины волны, запишем в виде [3]:

$$\int_0^R N_a(R) dR = \frac{1}{2\sigma_0} \ln \left[\frac{P(\lambda_{L1}, R) P_{L0} K_{10} \rho_0}{P(\lambda_{L0}, R) P_{L1} K_{11} \rho_1} \right] - \frac{1}{\sigma_0} \int_0^R [k_A(\lambda_{L0}, R) - k_A(\lambda_{L1}, R)] dR, \quad (2)$$

где λ_{L0} и λ_{L1} — длины волн возбуждения, первая попадает в полосу поглощения молекулы HF, вторая — вне полосы поглощения; $P(\lambda, R)$ — мощность сигнала обратного упругого рассеяния на фотоприемнике на длине волны λ_L , приходящая с расстояния R ; ρ — коэффициент отражения топографической мишени, или суммарный коэффициент упругого рассеяния Ми и молекулярного рассеяния Рэлея; $k(\lambda_L, R)$ — коэффициенты ослабления лазерного излучения в атмосфере, которые определяются соотношением [2]:

$$k(\lambda_L, R) = k_A(\lambda_L, R) + N_a(R) \sigma_0(\lambda_L). \quad (3)$$

Здесь первое слагаемое является коэффициентом ослабления атмосферы на длине волны лазерного излучения за вычетом молекул HF, а второе — произведением концентрации молекул HF на сечение резонансного поглощения этой молекулы.

Определим значения величин, входящих в уравнение (2), в нашем случае.

Для зондирования молекул HF методом ДПР были выбраны длины волн: максимум ИК-полосы поглощения исследуемых молекул HF 2,3958 мкм и длина волны чисто вращательного перехода в молекуле R(26) 10,4578 мкм [10]. Длина волны вне этих полос была взята равной 2,1 мкм, чтобы попасть в область прозрачности атмосферы [10]. Расчеты проведены последовательно для пар 2,4; 2,1 и 10,6; 2,1 мкм.

Для экспериментальной реализации такого лидара могут быть применены импульсные твердотельные лазеры на активных элементах YAG:Cr:Er и YAG:Cr:Ho и CO₂-лазер [11, 12] и параметрический генератор на кристалле ниобата лития LiNbO₃ с накачкой второй гармоникой YAG:Nd-лазера [10].

Параметры в уравнении (2) имеют следующие значения:

— постоянная K_2 лидара равна 0,4 на длине волны 1064 нм [3];

– значения спектральной чувствительности лавинного фотодиода ЛФД-2 на выбранных длинах волн взяты из [13];

– пиковая мощность лазерного импульса $P_L = 10$ кВт;

– диапазоны расстояний зондирования $R = 1 \dots 5; 1 \dots 100; 100 \dots 1000$ м;

– концентрации исследуемых молекул $10^5 \dots 10^{14}$ см⁻³;

– значения коэффициента ослабления $k_A(\lambda_L, R)$ взяты из [2] и для интересующих нас длин волн равны: для 2,1 мкм – 0,09 км⁻¹, 2,4 мкм – 0,08 км⁻¹, 10,6 мкм – 0,045 км⁻¹;

– сечение резонансного поглощения σ_0 молекул HF оценено по данным [2] и равно $1,923 \cdot 10^{-18}$ см² для длины волны возбуждения 2,4 мкм и 10^{-18} см² для 10,6 мкм;

– коэффициенты отражения топографических мишеней оценены по данным [14]. Для матовой поверхности – 0,15, суммарный коэффициент рассеяния в атмосфере взят по данным [4] и равен 10^{-7} .

С использованием приведенных выше данных были выполнены численные расчеты отношения мощностей ДПР-сигналов по уравнению (2) в зависимости от концентраций молекул HF в диапазоне $10^5 \dots 10^{14}$ см⁻³ и расстояний зондирования от 1 до 1000 м. Результаты расчетов приведены в табл. 2.

Из табл. 2 следует, что HF с концентрациями в диапазоне $10^5 \dots 10^{13}$ см⁻³ можно зондировать во всем диапазоне расстояний, 10^{14} см⁻³ – до 100 м.

Для оценки мощности солнечного фона на фотоприемнике лидара были выбраны из [2] следующие значения $S_b(\lambda)$: 2,1 мкм – 0,00003 Вт/(м²·ср·нм), 2,4 мкм – $5 \cdot 10^{-6}$ Вт/(м²·ср·нм), 10,6 мкм – 0,00002 Вт/(м²·ср·нм).

По результатам сравнения мощности лазерного излучения, с учетом ослабления сигнала при прохождении излучения через измерительный объем, и фоновой мощности можно сделать следующие выводы. Фоновая мощность не перекрывает регистрируемый на фотоприемнике сигнал во всех диапазонах расстояний зондирования и концентраций молекул при использовании топографической мишени с коэффициентом 0,15 за исключением концентрации $N_a = 10^{14}$ см⁻³.

Из рис. 2 видно, что зондирование HF с концентрацией $N_a = 10^{14}$ см⁻³ на длинах волн 2,1 и 2,4 мкм возможно только до 420 м, а на 2,1 и 10,6 мкм – до 700 м.

Сопоставляя данные табл. 2 и рис. 2, можно сказать, что фоновая мощность практически не ограничивает возможности лидара ДПР, поэтому зондирование HF с концентрацией $N_a = 10^{14}$ см⁻³ возможно только до 100 м.

Другая ситуация складывается при расчетах с использованием суммарного коэффициента упругого рассеяния в атмосфере 10^{-7} . В данном случае фон не оказывает влияния на зондирование HF с концентрациями $10^5 \dots 10^{14}$ см⁻³ для диапазонов 1 ... 100 м. Для расстояний в диапазоне 100 ... 1000 м и концентраций HF в диапазоне $10^5 \dots 10^{13}$ см⁻³ полезный сигнал превышает фоновый на расстояниях до 450 м, за исключением длин волн 10,6 и 2,1 мкм, на которых зондировать HF с концентрацией 10^{13} см⁻³ можно только до 400 м. При $N_a = 10^{14}$ см⁻³ HF можно зондировать на длинах волн 10,6 и 2,1 мкм – до 150 м, на 2,4 и 2,1 мкм – до 110 м. Некоторые детали видны на рис. 3, 4.

Сопоставляя результаты расчетов и табл. 2, можно сделать вывод о том, что для суммарного

Таблица 2

Отношение мощностей сигналов ДПР при зондировании молекул HF в атмосфере на расстояниях 1 ... 1000 м и при концентрациях $N_a = 10^5 \dots 10^{14}$ см⁻³

N_a , см ⁻³	R , м						
	1	5	10	50	100	500	1000
$P(\lambda_{2,3958} R)/P(\lambda_{2,1}, R)$							
10^5	1,00002	1,00008	1,00016	1,0008003	1,001601	1,008032	1,016129
10^6	1,00002	1,00008	1,00016	1,0008003	1,001601	1,008032	1,016128
10^7	1,00002	1,00008	1,00016	1,0008001	1,001601	1,00803	1,016125
10^8	1,00002	1,00008	1,000122	1,0006079	1,001216	1,006096	1,012228
10^9	1,00002	1,000078	1,000156	1,0007811	1,001563	1,007838	1,015738
10^{10}	1,000016	1,000061	1,000122	1,0006079	1,001216	1,006096	1,012228
10^{11}	0,999982	0,999888	0,999775	0,9988776	0,997757	0,988833	0,97779
10^{12}	0,999635	0,998159	0,996321	0,9817388	0,963811	0,831686	0,691702
10^{13}	0,996181	0,981032	0,962424	0,8257196	0,681813	0,47342	0,02171
10^{14}	0,962289	0,825125	0,680832	0,462848	0,21399		
$P(\lambda_{10,6} R)/P(\lambda_{2,1}, R)$							
10^5	1,00009	1,00043	1,00086	1,004309	1,008637	1,043938	1,089806
10^6	1,00009	1,00043	1,00086	1,004309	1,008637	1,043938	1,089806
10^7	1,00009	1,00043	1,00086	1,004309	1,008637	1,043937	1,089804
10^8	1,00009	1,00043	1,00086	1,004308	1,008635	1,043927	1,089785
10^9	1,00009	1,000429	1,000858	1,004299	1,008617	1,043834	1,089588
10^{10}	1,000088	1,00042	1,00084	1,004209	1,008435	1,042894	1,087629
10^{11}	1,00007	1,00033	1,00066	1,003305	1,006622	1,033551	1,068227
10^{12}	0,99989	0,99943	0,998861	0,994316	0,988665	0,944594	0,892258
10^{13}	0,998092	0,990476	0,981042	0,908737	0,825802	0,384043	0,147489
10^{14}	0,980287	0,905227	0,819435	0,369465	0,136504		

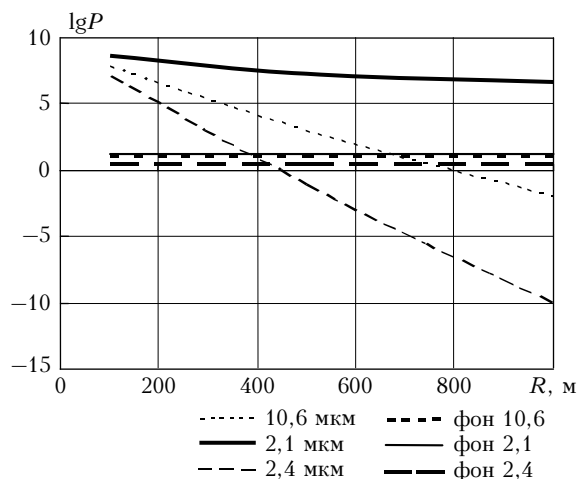


Рис. 2. Зависимости регистрируемого сигнала рассеянного лазерного излучения на топографической мишени с коэффициентом 0,15, прошедшего через измерительный объем с концентрацией HF $N_a = 10^{14} \text{ см}^{-3}$, в атмосфере от расстояния зондирования R . Горизонтальные линии – уровень фоновой мощности на фотоприемнике лидара

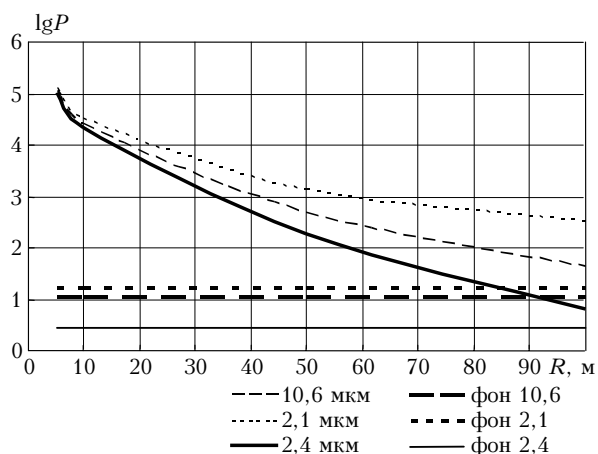


Рис. 3. Зависимости регистрируемого сигнала рассеянного лазерного излучения на топографической мишени с коэффициентом 10^{-7} , прошедшего через измерительный объем с концентрацией HF $N_a = 10^{14} \text{ см}^{-3}$, в атмосфере от расстояния зондирования R (для диапазона 1 ... 100 м). Горизонтальные линии – уровень фоновой мощности на фотоприемнике лидара

коэффициента рассеяния в атмосфере 10^{-7} HF с концентрациями $N_a = 10^5 \dots 10^{13} \text{ см}^{-3}$ можно зондировать на выбранных длинах волн только до 450 м, с $N_a = 10^{13} \text{ см}^{-3}$ на 10,6 и 2,1 мкм – до 400 м, с $N_a = 10^{14} \text{ см}^{-3}$ – до 100 м.

Все расчеты выполнены для мощности лазерного излучения 10 кВт. Увеличение мощности лазерного излучения повысит эффективность зондирования пропорционально увеличиваемому порядку. А использование He–Ne-лазера с длиной волны 2,3958 мкм и мощностью 1 мВт позволит зондировать молекулы HF в свободной атмосфере с концентрациями в диапазоне $N_a = 10^5 \dots 10^{14} \text{ см}^{-3}$ на расстоянии до 0,3 м от излучателя. При увеличении расстояния зондирования фоновая мощность превышает полезный сигнал.

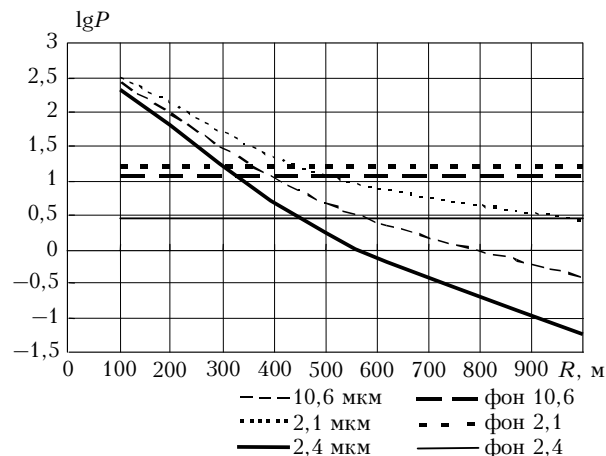


Рис. 4. Зависимости регистрируемого сигнала рассеянного лазерного излучения на топографической мишени с коэффициентом 10^{-7} , прошедшего через измерительный объем с концентрацией HF в атмосфере $N_a = 10^{13} \text{ см}^{-3}$, от расстояния зондирования R (для диапазона 100 ... 1000 м). Горизонтальные линии – уровень фоновой мощности на фотоприемнике лидара

Таким образом, полученные нами результаты показывают эффективность зондирования молекул HF-, КР- и ДПП-лидарами. Молекулы HF с концентрацией $N_a = 10^{13} \text{ см}^{-3}$ можно обнаружить на расстояниях до 450 м.

1. Воронина Э.И., Привалов В.Е., Шеманин В.Г. Зондирование молекул водорода на лабораторном лидаре КР // Письма в ЖТФ. 2004. Т. 30. Вып. 5. С. 14–17.
2. Межерис Р. Лазерное дистанционное зондирование. М.: Мир, 1987. 550 с.
3. Привалов В.Е., Шеманин В.Г. Оптимизация лидара дифференциального поглощения и рассеяния для зондирования молекулярного водорода в атмосфере // Ж. техн. физ. 1999. Т. 69. Вып. 8. С. 65–68.
4. Привалов В.Е., Шеманин В.Г. Параметры лидара дифференциального поглощения для обнаружения молекулярного йода в атмосфере // Опт. ж. 1999. Т. 66. № 2. С. 40–42.
5. Креков Г.М., Крекова М.М. Об эффективности лидарных методов дифференциального поглощения в условиях облачной атмосферы // Оптика атмосфер. и океана. 2005. Т. 18. № 10. С. 903–913.
6. Борейшо А.С., Коняев М.А., Морозов А.В., Пикуль А.В., Савин А.В., Трилис А.В., Чакчир С.Я., Бойко Н.И., Власов Ю.Н., Никитаев С.П., Рожнов А.В. Мобильные многоволновые лидарные комплексы // Квант. электрон. 2005. Т. 35. № 12. С. 1167–1178.
7. Lidar. Range-Resolved Optical Remote Sensing of the Atmosphere – Series: Springer Series in V. 102. Claus, Weitkamp (Ed.). 2005. 460 p. Optical Sciences.
8. Свердлов Л.М., Ковнер М.А., Крайнов Е.П. Колебательные спектры многоатомных молекул. М.: Наука, 1970. 560 с.
9. Privalov V.E., Shemanin V.G. Molecular iodine laser monitoring in the atmosphere // Proc. SPIE. 2000. V. 4316. P. 36–42.
10. Справочник по лазерам. Т. I / Под ред. А.М. Прохорова. М.: Сов. радио, 1978. 504 с.

11. Weber H., Bass M., Varitimos T., Bua D. Laser action from Ho³⁺, Er³⁺ and Tm³⁺ in YAlO₃ // IEEE J. Quantum Electron. 1973. V. 9. N 11. P. 1079–1086.
12. Sigimoto N., Sims N., Chan K., Killinger D.K. Eye-safe 2.1 μm Ho lidar for measuring atmospheric density profiles // Opt. Lett. 1990. V. 15. N 8. P. 302–304.
13. Аксененко М.Д., Бараночников М.Л. Приемники оптического излучения: Справочник. М.: Радио и связь, 1987. С. 68–69.
14. Енгоян Т.М., Жильцов В.И., Козинцев В.И., Сильницкий А.Ф., Назаров И.М., Рождественская В.И., Фридман Ш.Д. Методика определения концентрации двуокиси азота в атмосферном воздухе с помощью лидара // Тр. Ин-та прикладной геофизики им. акад. Е.К. Федорова «Дистанционные средства и методы измерения загрязнения атмосферы и выбросов». М.: Гидрометеопиздат, 1986. С. 53–61.

E.I. Voronina, V.E. Privalov, V.G. Shemanin. Laser investigation of HF molecules in the atmosphere: problems of numerical modeling.

Numerical calculations of the logarithm of Raman scattering capacity in the backward direction for molecule HF with concentration of 10¹⁶ and 10¹⁹ cm⁻³, for the chosen lengths of YAG waves – Nd laser and a range of distances 1 ... 1000 m. The numerical decision of the lidar equations for DAS is obtained. Also ranges of concentration of molecules HF and distances of sounding are determined. Optimum conditions are determined.