

# Исследование спектра поглощения микроволн атмосферным водяным паром для задач дистанционного зондирования окружающей среды

<u>Евгений Серов,</u> Максим Кошелев, Илья Вилков, Татьяна Одинцова, Владимир Паршин, Михаил Третьяков

Институт прикладной физики РАН, Нижний Новгород

Шестая международная Школа-семинар: «Спутниковые методы и системы исследования Земли». 02.03 - 06.03.2015, г. Таруса

### Водяной пар в атмосфере Земли



Примерно половина естественного парникового эффекта объясняется поглощением электромагнитного излучения водяным паром, присутствующим в атмосфере. Климат планеты в значительной степени определяется именно содержанием водяного пара в атмосфере.

### Приложения спектроскопии водяного пара

> Дистанционное зондирование атмосферы и подстилающей поверхности с использованием спутниковых и наземных аппаратов (Aura, Aqua, ...)

- ≻ Радиолокация
- > Наземные наблюдения астрофизических объектов (окна прозрачности)

Фундаментальные аспекты (межмолекулярные взаимодействия, природа континуума и др.)



# Поглощение атмосферы в диапазоне 0-1000 ГГц



### Поглощение атмосферы в диапазоне 0–1000 ГГц



### Форма линий атмосферного поглощения

Контур линии поглощения (Ван Флек Вейскопф):  $\Delta v_{\rm D} << \Delta v$ , f – fc <  $\tau^{-1}$  (столкновительное приближение)  $\Delta v_{\rm D} = f_{\rm c} \times (2\ln(2) \text{kT/mc}^2)^{0.5}$  – доплеровская ширина линии,

 $\tau$  - длительность соударения молекул

$$\alpha(f) = \frac{I_{line}f}{\pi f_C} \cdot \left[\frac{\Delta v}{\Delta v^2 + (f - f_C)^2} + \frac{\Delta v}{\Delta v^2 + (f + f_C)^2}\right]$$



Параметры контура линии:

 $I_{line}$  - интенсивность  $f_{\rm C}$  - центральная частота  $\Delta v$  - ширина

Поглощение вдали от центра линии  $f - fc > \tau^{-1} \sim 750 \ \Gamma \Gamma ц$  или 25 см<sup>-1</sup> не может быть рассчитано в рамках данного приближения, поэтому обычно дальние крылья линий «обрезают», а поглощение в них относят к континууму.

#### Спектроскопические параметры линий и континуума

$$\alpha_{line} = \sum \frac{I_{line} f}{\pi \cdot f_C} \cdot \left[ \frac{\Delta v}{\Delta v^2 + (f - f_C)^2} + \frac{\Delta v}{\Delta v^2 + (f + f_C)^2} \right] \quad \text{(Van Vleck-Weisskopf - Rosenkranz)}$$

$$\left( (200)^{n0} + (200)^{n1} + (200)^{n2} \right)$$

$$\alpha_{cont} = \left( C_0 \cdot p_{air}^2 \cdot \left(\frac{300}{T}\right) + C_1 \cdot p_{air} \cdot p_{H_2O} \cdot \left(\frac{300}{T}\right) + C_2 \cdot p_{H_2O}^2 \cdot \left(\frac{300}{T}\right) \right) \cdot f^2 \quad (\text{H.J. Jiebe})$$



От 8 до 12 параметров необходимо для параметризации поглощения в КАЖДОЙ спектральной линии при конкретных метеопараметрах (*p*, *T*, *RH*). 6 дополнительных параметров необходимо для параметризации континуума в мм диапазоне (выше 300 ГГц данная параметризация перестает работать)

### Требуемая точность спектральных данных

С уменьшением погрешности, вносимой измерительными приборами возрастают требования к точности спектроскопических моделей.

S. Payan, J. de La Noe, A. Hauchecorne, C. Camy-Peyret // C. R. Physique 6 (2005), 825-835:

Foreign-broadening parameters should be measured <u>with an accuracy of 5% or better</u> in order to avoid that systematic spectroscopic errors dominates the statistical retrieval error.

J.J. Harrison, P.F. Bernath, G. Kirchengast // Journal of Quantitative Spectroscopy & Radiative Transfer 112 (2011), 2374-2354: An estimation of retrieval errors for the ACCURATE mission reveals that <u>errors in</u>

spectroscopic line parameters dominate all other error sources [...] Using a simple approach, it has been shown that the <u>current line parameter errors in the</u> <u>HITRAN database are too large to allow retrievals of greenhouse gases [...]</u> <u>Line positions must be accurately known to within  $5 \times 10^{-5}$  cm<sup>-1</sup>, and absorption cross sections</u> <u>accurate to 0.1% within ± 0.002 cm<sup>-1</sup> of the channel centre.</u>

### Интенсивность линий воды: ab initio расчет

PHILOSOPHICAL TRANSACTIONS — OF — THE ROYAL SOCIETY

Phil. Trans. R. Soc. A (2012) **370**, 2728–2748 doi:10.1098/rsta.2011.0259

### Global spectroscopy of the water monomer

By Oleg L. Polyansky<sup>1</sup>, Nikolay F. Zobov<sup>1</sup>, Irina I. Mizus<sup>1</sup>, Lorenzo Lodi<sup>2</sup>, Sergei N. Yurchenko<sup>2</sup>, Jonathan Tennyson<sup>2,\*</sup>, Attila G. Császár<sup>3</sup> and Oleg V. Boyarkin<sup>4</sup>

<sup>1</sup>Institute of Applied Physics, Russian Academy of Sciences, Uljanov Street 46, Nizhny Novgorod, 603950, Russia <sup>2</sup>Department of Physics and Astronomy, University College London,

The global LTP2011 DMS calculated by Lodi *et al.* allows <u>extremely accurate</u> <u>calculations of intensities of conventional spectral lines</u> up to 26 000 cm<sup>-1</sup> [...].

The ultimate goal of computing a DMS accurate to <u>better than 1 per cent</u> seems to have been achieved. [...]

The preliminary results of such calculations show excellent agreement with experiment.

# Определение параметров линий водяного пара в диапазоне 0–1000 ГГц



#### Экспериментальные данные по линии 22 ГГц

1946 : Becker, Autler



FIG. 1. Diagram of apparatus. Only two thermocouple strings are shown. Actually, the thermocouples are distributed throughout the volume of the box. The copper box is approximately 8 ft. on an edge, with a volume of 15.8 m<sup>3</sup>. The walls are 0.020 inch thick, approximately plane, and are supported by an outer wooden framework.

TABLE I. Attenuation per unit density for various wave-lengths and humidities. Values of  $\gamma/\rho$  are in db/km per g/m<sup>3</sup>,  $\tilde{p}$  in cm<sup>-1</sup>, and  $\rho$  in g/m<sup>3</sup>.

ρ	<b>₽</b> →1.34	1.16	1.04	0.943	0.859	0.817	0.784	0.751	0.730	0.671	0.592
0 10 20 30 40 50	0.0086 0.0103 0.0119 0.0136 0.0152 0.0168	0.0067 0.0081 0.0095 0.0108 0.0122 0.0136	0.0068 0.0081 0.0094 0.0107 0.0120 0.0133	0.0103 0.0112 0.0120 0.0128 0.0137 0.0145	0.0142 0.0149 0.0157 0.0165 0.0172 0.0179	0.0184 0.0189 0.0194 0.0198 0.0203 0.0208	0.0230 0.0230 0.0230 0.0230 0.0230 0.0230 0.0230	0.0249 0.0245 0.0241 0.0237 0.0234 0.0230	0.0224 0.0224 0.0224 0.0224 0.0224 0.0224 0.0224	0.0128 0.0131 0.0133 0.0137 0.0139 0.0142	0.0044 0.0049 0.0055 0.0060 0.0066 0.0071

$$\gamma = a\rho + b\rho^2.$$

Воздух при различных влажностях при давлении 1 атм продувается через камеру. Т = 45 +/- 1 гр.С

$$\sigma_{WW} = 4.7 \sigma_{WA}$$



FIG. 4. Water vapor absorption curve. The attenuation in db/kilometer per gram/meter<sup>3</sup> is plotted against the wave-number. The dotted curve is for a density of 50 g/m<sup>3</sup>, the full curve for 10 g/m<sup>3</sup>.

#### Экспериментальные данные по линии 22 ГГц



### Экспериментальные данные по линии 22 ГГц

#### 2007 : Cazolli et al.



Air-broadening parameters have also been derived.

<sup>a</sup>Uncertainties in parentheses are two times the standard deviation  $(2\sigma)$ .

<sup>b</sup>Evaluated from Eq. (12).



Экспериментальные данные по линии 22 ГГц: уширение воздухом

# Экспериментальные данные по линии 22 ГГц: самоуширение



# Аппаратурный комплекс для прецизионного исследования спектров атмосферных газов

Два спектрометра разного принципа действия позволяют исследовать атмосферное поглощение в миллиметровом и субмиллиметровом диапазонах в широком диапазоне давлений: от 10<sup>-4</sup> до 2 атм. Использование двух независимых прецизионных инструментов существенно повышает надежность получаемых результатов, т.к. почти полностью исключается влияние систематики.

1. Спектрометр с радиоакустическим детектором (РАД)

2. Резонаторный спектрометр

# Спектрометр РАД для исследования спектров высокого разрешения



A.F. Krupnov in "Modern Aspects of Microwave Spectroscopy", G.W. Chantry, Ed, 217 - 256, Acad. Press, L, (1979)

# Резонаторный спектрометр для исследования широкодиапазонных спектров атмосферных газов



# Резонаторный спектрометр для исследования широкодиапазонных спектров атмосферных газов



# Измерение параметров линий атмосферных газов

#### Спектрометр РАД



#### Резонаторный спектрометр



Измеряемый параметр						
+	Частота центра —		—			
_	Коэффициент поглощения		+			
+	Уширение давлением		+			
+	Сдвиг частоты давлением		+			
_	Столкновительная связь		+			
+	Температурные зависимости		+			

# Широкодиапазонная запись спектра атмосферного поглощения



### Линия водяного пара 183 ГГц



Изолированная линия паров воды у 183 ГГц – одна из важнейших атмосферных диагностических линий (распределение влажности в атмосфере)



# Экспериментальные данные по линии 183 ГГц: уширение воздухом



# Экспериментальные данные по линии 183 ГГц: самоуширение



	· · · · · · · · · · · · · · ·				
			· · · · · · · · · · ·		· · · · · · · · · · · · · · · · · · ·
	· · · · · · · · · · · · · · · · · · ·				· · · · · · · · · · · · · · · · · ·
		· · · · · · · · · · · · · · · · · · ·			
					· · · · · · · · · · · · · · · · · · ·
			· · · · · · · · · · ·	* * * * * * * * * *	
Parameter					
MHz/Torr	Resonator	RAD		* * * * * * * * *	
width/N <sub>2</sub>	4.09(5)	4.17(3)			
shift/N <sub>2</sub>	<u>– 0.037(11)</u>	<u>– 0.020(7)</u>	Линия г	аров во	<u>ты у 325 ГГц</u>
width/O <sub>2</sub>	220(4)	2 33(2)			
	<b>∠.</b> ∠∪(⊤)	2.00(2)			
shift/O <sub>2</sub>	<mark>0.000(40)</mark>	<u>– 0.007(5)</u>			

### Линия воды 380 ГГц



Линия паров воды 380 ГГц

### Линия воды 380 ГГц: точность экспериментальных данных

#### Сдвиг и уширение давлением линии воды 380 ГГц



### Продвижение в терагерцовый диапазон частот



Повышение рабочей частоты для дистанционного зондирования позволяет обеспечить:

- лучшее пространственное разрешение
- более высокую чувствительность

### Резонансное поглощение водяного пара в диапазоне 350 – 500 ГГц



# Извлекаемые спектроскопические параметры. Сравнение с результатами, полученными на РАД спектрометре

	0 <sub>2</sub>		
Central frequency, GHz	368	424	487
Self-broadening parameter, MHz/Torr Resonator spectrometer ( $p = 1$ atm)	2.263(190)	2.179(15)	2.138(15)
Self-broadening parameter, MHz/Torr RAD spectrometer ( $p \sim 10^{-4} \div 10^{-3}$ atm)	2.259(30)	2.192(10)	2.108(30)

$H_2O + N_2 (+Air)$					
Central frequency, GHz	380	448			
Air-broadening parameter, MHz/Torr Resonator spectrometer (p = 1 atm)	3.781(21)	3.840(18)			
Air-broadening parameter, MHz/Torr RAD spectrometer ( $p \sim 10^{-4} \div 10^{-3}$ atm)	3.813(46)	3.832(40)			
$N_2$ -broadening parameter, MHz/Torr Resonator spectrometer (p = 1 atm)	4.119(21)	3.469(11)			
$N_2$ -broadening parameter, MHz/Torr RAD spectrometer (p ~ 10 <sup>-4</sup> ÷10 <sup>-3</sup> atm)	4.187(50)	3.468(33)			





#### Континуальное поглощение

 $\alpha_{total\_absorption} = \alpha_{resonance\_lines} + \alpha_{continuum}$ 

$$\alpha_{continuum} = C_{foreign}^{water}(T, v) \cdot P_{H2O}Pair + C_{self}^{water}(T, v) \cdot P_{H2O}^{2} + C^{dry}(T, v) \cdot P_{air}^{2}$$



# Прецизионное исследования континуума в широком диапазоне температур: повышение точности эмпирической модели



#### Физическая природа континуума

Континуальное поглощение обусловлено парными взаимодействиями молекул при соударениях, что отражается в квадратичной зависимости величины поглощения от парциальных давлений.



Результатом взаимодействия молекул может стать образование димера, спектр которого и наблюдается в виде континуума. На протяжении почти полувека наибольший интерес вызывал вопрос о роли димера воды в атмосферном поглощении.



1966 => Жевакин и Викторова впервые высказывают предположение о роли димера воды в поглощении ММ и СубММ волн атмосферой (дан ссср, т.171. №5, с.1061)

Равновесная конфигурация определена на основе расчетов из первых принципов. Tschumper G.S. et al. J. Chem. Phys. **116**, 690 (2002)
#### Поиск спектральных проявлений димера воды



Колебательные полосы (ИК диапазон): частоты фундаментальных колебаний О-Н связи мономера и димера отличаются всего на ~ 3%, нужно с высокой точностью вычитать вклад огромного числа линий мономеров. Форма и ширина колебательных полос димера известна лишь приближенно.



Вращательный спектр димера (ММ и СубММ диапазоны): согласно квантовохимическим расчетам в спектре можно наблюдать серию пиков, представляющих собой группы слившихся линий димера. Линии мономера в этом диапазоне легко могут быть учтены и не мешают наблюдению димерного спектра.

# Первая экспериментальная запись спектра димера воды в теплом водяном паре



#### Освещение результата в изданиях

#### Научная Россия (http://scientificrussia.ru):



17.01.2013

### Нижегородские физики нашли двойные молекулы в теплом водяном паре



Вода является одной из главных атмосферных молекул. Составляя всего около 0.33% массы атмосферы, вода отвечает примерно за 70% поглощаемого атмосферой излучения. Величина поглощения сильно зависит от того, как общее количество воды распределено по своим многочисленным формам (отдельные молекулы, кластеры, капли, снежинки).

Еще в середине прошлого века теоретики предсказали, что при соударениях молекулы могут слипаться и образовывать двойные молекулы или димеры. Оценки их количества в атмосфере позволяли предположить, что димеры, принимая участие в физических и химических атмосферных процессах, могут оказывать заметное влияние на радиационный баланс и климат

Земли.

Димеры воды были хорошо изучены с помощью молекулярных пучков, где температура составляет всего несколько градусов Кельвина. Но эти эксперименты не могли ответить на вопрос, сколько димеров может образовываться в окружающей среде, а многочисленные попытки их обнаружения в атмосфере или в лаборатории при атмосферных температурах либо не давали надежного результата, либо впоследствии опровергались. Поэтому и сам факт существования димеров в атмосфере, и их роль в

#### Освещение результата в изданиях

#### Physics Today (http://www.physicstoday.org/):



#### Освещение результата в изданиях



#### Обработка экспериментальных данных



#### Димеры воды в воздухе



#### Димеры воды в воздухе



# Прямое наблюдение проявлений димеров в спектре яркостной температуры атмосферы

Чувствительность современных радиометров достигает 1 мК ( $\tau \sim 1c$ ) Vdovin, Zinchenko. *Radophys Quantum Electron* **52** 461 (2009)

Расчет спектра яркостной температуры атмосферы (модель MPM + наши результаты, наблюдения в зенит в летних условиях)



#### Основные результаты

1. Основные диагностические линии водяного пара в мм и субмм диапазонах исследованы с использованием двух прецизионных спектрометров разного принципа действия. Получен уникальный набор высокоточных данных, которые используются для повышения точности моделей распространения.

2. Впервые получены спектры поглощения миллиметровых волн димерами воды в теплом водяном паре в широком диапазоне температур и давлений. В результате анализа экспериментальных данных определены важные характеристики димера воды.

3. Показано, что разбавление водяного пара воздухом не приводит к уменьшению числа димеров.

4. Показана возможность обнаружения проявления димеров воды в спектре яркостной температуры атмосферы.



1. Расширение диапазона частот резонаторного спектрометра выше 500 ГГц

2. Исследование температурных зависимостей параметров атмосферных линий в широком диапазоне температур

3. Продолжение исследований атмосферного континуума: вопрос существования гетеродимеров (H<sub>2</sub>O-N<sub>2</sub>, H<sub>2</sub>O-O<sub>2</sub>), их вклад в атмосферное поглощение



#### Fabry-Perot resonator for gas absorption measurements



$$P_{\Gamma A3} = \frac{2\pi L}{c} \cdot \left(\Delta f - \Delta f_0\right) = \alpha L$$



PERGAMON

Journal of Quantitative Spectroscopy & Radiative Transfer 64 (2000) 421-437 Совместная статья представителей двух лидирующих Европейских групп, занимающихся интерпретацией данных спутникового зондирования атмосферы. 2000 г.

Product review

#### Instrumental and spectral parameters: their effect on and measurement by microwave limb sounding of the atmosphere

Hugh C. Pumphrey<sup>a,\*</sup>, Stefan Bühler<sup>b</sup>

<sup>a</sup>Department of Meteorology, The University of Edinburgh, Mayfield Road, Edinburgh EH9 3JZ, UK <sup>b</sup>Institute of Environmental Physics, University of Bremen, Kufsteiner Strasse, P.O. Box 330440, D-28334 Bremen, Germany

Accepted 22 June 1999

#### Abstract

Microwave limb sounding is an important new technique for measuring atmosphere and the concentration of various trace species in it. The spectral line. It is therefore important to model the line shape and the imaccurate modelling will lead to a poor match between the measured radia CNYTHUK the retrieved atmosphere. In this paper, we consider the 183.3 GHz radiances and ozone in the middle atmosphere by two orbiting instruments: the Mi the Upper Atmosphere Research Satellite (UARS) and the Millimetrew which was flown on the ATLAS platform on board the space shuttle. B problems matching measured and re-calculated 183 GHz radiances. We salgorithm to fit certain spectral and instrumental parameters in addition improve both the quality of the retrieved profiles and our knowledge particular the pressure shift of the line. © 1999 Elsevier Science Ltd. A

Рассматривается переход молекулы воды на частоте 183.3 ГГц.

Показано, что варьирование сдвига частоты линии давлением позволяет улучшить описание наблюдаемого со спутников профиля поглощения и определить значение параметра сдвига.

До этой работы сдвиг линии не учитывался, хотя был предсказан теоретически. 436 H.C. Pumphrey, S. Bühler / Journal of Quantitative Spectroscopy & Radiative Transfer 64 (2000) 421-437



Полученные значения параметра отличаются в зависимости от спутника и метода обработки до 2-х раз

to compute the error in these values according to a Gaussian distribution. Instead, one can the maximum and minimum values to estimate the error. This procedure result  $f_offs = 0.130 \pm 0.015$  MHz and  $p_shift = -0.20 \pm .04$  MHz/mb. The value of  $p_shi$ slightly higher than the MLS value of  $-0.14 \pm 0.03$  MHz/mb. It has to be noted that retrieval of the frequency offset has a very strong impact on the pressure shift parant Fixing the frequency offset to a value of 0 MHz results in a completely different  $p_shift$ of  $-0.10 \pm .03$  MHz/mb, which is now *lower* than the MLS value. Still, as stated above fit residuals indicate that the frequency offset is really there and should be taken account.

To conclude, the MAS data allows the retrieval of the pressure shift parameter of the vapour line at 183 GHz. The obtained value is consistent with MLS but somewhat hi A retrieval of the water vapour air broadening parameter is not possible with the current poi accuracy.

Некоторые параметры, включая сдвиг частоты давлением трудно измерить в лаборатории. Нам представляется, что MLS инструмент может обеспечить лучшее измерение сдвига линии водяного пара на 183 ГГц, чем любая лабораторная техника, о которой нам известно.

#### 5. Conclusions

The radiances measured by a microwave limb-sounding instrument often core an enough information for both the desired constituent profile and various spectral and instrument parameters to be retrieved. Of course, it is better if these things are known before such and efforts are (hopefully) being made to ensure that this is the case for future instruments. However, certain parameters, including the pressure shift, are hard to measure in the laboratory. Microwave limb-sounding instruments appear to be capable of providing a better measurement of the pressure shift of the 183 GHz water vapour line than any laboratory technique of which we are aware.

Acknowledgements

Различные компоненты спектра димера воды (ЗТорр, 270К, 30 МГц/Торр)





Красная сплошная линия – спектр мономера

- Пунктир
- Вертикальные линии
- поглощение, индуцированное соударениями
- амплитуды и положения характерных спектральных особенностей димера

Часть 3. Лабораторные исследования атмосферного поглощения

### Простейшая схема измерения атмосферного поглощения в MM/СубММ диапазоне длин волн



Атмосферное поглощение в пике линии O2 у 118 ГГц составляет ~1 дБ/км или ~3.10<sup>-6</sup> см<sup>-1</sup>. Т.е. на 1м длины поглощается ~0.03% мощности изучения.

Обратные отражения излучения от элементов спектрометра приводят к сильным амплитудно-частотным зависимостям мощности принимаемого излучения от частоты с характерным периодом C/2L (для ячейки длиной 1м период стоячей волны ~150 МГц при ширине (HWHM) линии O2 ~ 2000 МГц )

Это приводит к невозможности использования метода для точных лабораторных измерений атмосферного поглощения. Метод довольно успешно применялся при полевых измерениях.

#### ПРЕИМУЩЕСТВА ИСПОЛЬЗОВАНИЯ РЕЗОНАТОРНОГО СПЕКТРОМЕТРА

Использование резонаторного спектрометра для исследования характеристик спектральных линий имеет ряд преимуществ перед другими методами:

**1.** Поглощение на каждой частоте (собственной моде резонатора) рассчитывается через изменение ширины резонансной кривой и является частотным измерением – наиболее точным на сегодняшний день по сравнению с другими методами, например, амплитудными.

2. Резонатор эквивалентен поглощающей ячейке с некоторой эффективной длиной  $L_{
m add} = \lambda Q/2\pi$ 

где Q – добротность резонатора, а  $\lambda$  – длина волны. То есть, чем добротней резонатор, тем больше эффективная длина пути, а значит увеличиваются потери в газе  $P_{\Gamma A3} = 1 - \exp(-\gamma L_{3\varphi\varphi})$  и чувствительность спектрометра по поглощению.

Можно несколько модифицировать выражение для эффективной



Для используемого нами резонатора с длиной *L* ~ 300 мм, радиусом кривизны зеркал ~ 240 мм и запиткой излучением через тефлоновую пленку связи толщиной 6 микрон, установленную под углом 45<sup>°</sup> к оси резонатора, эффективная длина составляет ~ 300 м.

3. Резонаторный спектрометр позволяет измерять одну из важнейших характеристик спектральных линий – интегральную интенсивность.

#### **ДИСТАНЦИОННОЕ ЗОНДИРОВАНИЕ АТМОСФЕРЫ**

#### восстановление температурного профиля



Справа: Контур линии поглощения кислорода на 118 ГГц, записанный на разных высотах. Линия расщеплена магнитным полем Земли вследствие эффекта Зеемана. Внизу показан остаток обработки данных теоретической моделью.

<u>Слева</u>: Восстановленный вертикальный профиль температуры.



#### ДИСТАНЦИОННОЕ ЗОНДИРОВАНИЕ АТМОСФЕРЫ



Средняя частота, ГГц	Используемые переходы
50-56	О <sub>2</sub> , 60 ГГц
89	окно прозрачности атмосферы
183	Н <sub>2</sub> О, 183.3 ГГц
340	окно прозрачности атмосферы
380	Н <sub>2</sub> О, 380 ГГц



#### Исследование 60-ГГц полосы поглощения кислорода

Экспериментальные записи 60-ГГц полосы поглощения, полученные в чистом кислороде и сухом воздухе при атмосферном давлении и комнатной температуре.



Для анализа записи использовались точные значения ширин и частот ( $\Delta v_i$  и  $f_{Ci}$ ) отдельных линий, входящих в полосу, которые были измерены нами с помощью спектрометра РАД.

# Определение параметров интерференции линий составляющих 60-ГГц полосу поглощения кислорода

Профиль поглощения:  $\alpha(f) = \sum_{i} \frac{\alpha_{i}f}{\pi f_{C}^{i}} \cdot \left[ \frac{\Delta v_{i} + Y_{i}(f - f_{C}^{i})}{\Delta v_{i}^{2} + (f - f_{C}^{i})^{2}} + \frac{\Delta v_{i} - Y_{i}(f_{C})}{\Delta v_{i}^{2} + (f - f_{C}^{i})^{2}} + \frac{\Delta v_{i} - Y_{i}(f_{C})}{\Delta v_{i}^{2} + (f - f_{C}^{i})^{2}} + \frac{\Delta v_{i} - Y_{i}(f_{C})}{\Delta v_{i}^{2} + (f - f_{C}^{i})^{2}} + \frac{\Delta v_{i} - Y_{i}(f_{C})}{\Delta v_{i}^{2} + (f - f_{C}^{i})^{2}} + \frac{\Delta v_{i} - Y_{i}(f_{C})}{\Delta v_{i}^{2} + (f - f_{C}^{i})^{2}} + \frac{\Delta v_{i} - Y_{i}(f_{C})}{\Delta v_{i}^{2} + (f - f_{C}^{i})^{2}} + \frac{\Delta v_{i} - Y_{i}(f_{C})}{\Delta v_{i}^{2} + (f - f_{C}^{i})^{2}} + \frac{\Delta v_{i} - Y_{i}(f_{C})}{\Delta v_{i}^{2} + (f - f_{C}^{i})^{2}} + \frac{\Delta v_{i} - Y_{i}(f_{C})}{\Delta v_{i}^{2} + (f - f_{C}^{i})^{2}} + \frac{\Delta v_{i} - Y_{i}(f_{C})}{\Delta v_{i}^{2} + (f - f_{C}^{i})^{2}} + \frac{\Delta v_{i} - Y_{i}(f_{C})}{\Delta v_{i}^{2} + (f - f_{C}^{i})^{2}} + \frac{\Delta v_{i} - Y_{i}(f_{C})}{\Delta v_{i}^{2} + (f - f_{C}^{i})^{2}} + \frac{\Delta v_{i} - Y_{i}(f_{C})}{\Delta v_{i}^{2} + (f - f_{C}^{i})^{2}} + \frac{\Delta v_{i} - Y_{i}(f_{C})}{\Delta v_{i}^{2} + (f - f_{C}^{i})^{2}} + \frac{\Delta v_{i} - Y_{i}(f_{C})}{\Delta v_{i}^{2} + (f - f_{C}^{i})^{2}} + \frac{\Delta v_{i} - Y_{i}(f_{C})}{\Delta v_{i}^{2} + (f - f_{C}^{i})^{2}} + \frac{\Delta v_{i} - Y_{i}(f_{C})}{\Delta v_{i}^{2} + (f - f_{C}^{i})^{2}} + \frac{\Delta v_{i} - Y_{i}(f_{C})}{\Delta v_{i}^{2} + (f - f_{C}^{i})^{2}} + \frac{\Delta v_{i} - Y_{i}(f_{C})}{\Delta v_{i}^{2} + (f - f_{C}^{i})^{2}} + \frac{\Delta v_{i} - Y_{i}(f_{C})}{\Delta v_{i}^{2} + (f - f_{C}^{i})^{2}} + \frac{\Delta v_{i} - Y_{i}(f_{C})}{\Delta v_{i}^{2} + (f - f_{C}^{i})^{2}} + \frac{\Delta v_{i} - Y_{i}(f_{C})}{\Delta v_{i}^{2} + (f - f_{C}^{i})^{2}} + \frac{\Delta v_{i} - Y_{i}(f_{C})}{\Delta v_{i}^{2} + (f - f_{C}^{i})^{2}} + \frac{\Delta v_{i} - Y_{i}(f_{C})}{\Delta v_{i}^{2} + (f - f_{C}^{i})^{2}} + \frac{\Delta v_{i} - Y_{i}(f_{C})}{\Delta v_{i}^{2} + (f - f_{C}^{i})^{2}} + \frac{\Delta v_{i} - Y_{i}(f_{C})}{\Delta v_{i}^{2} + (f - f_{C}^{i})^{2}} + \frac{\Delta v_{i} - Y_{i}(f_{C})}{\Delta v_{i}^{2} + (f - f_{C}^{i})^{2}} + \frac{\Delta v_{i} - Y_{i}(f_{C})}{\Delta v_{i}^{2} + (f - f_{C}^{i})^{2}} + \frac{\Delta v_{i} - Y_{i}(f_{C})}{\Delta v_{i}^{2} + (f - f_{C}^{i})^{2}} + \frac{\Delta v_{i} - Y_{i}(f_{C})}{\Delta v_{i}^{2} + (f - f_{C}^{i})^{2}} + \frac{\Delta v_{i} - Y_{i}(f_{$ 



На графике значения параметров интерференции (связи) линий тонкой структуры молекулы О<sub>2</sub> отложены в зависимости от вращательного квантового числа *N*.

- Наши измерения для воздуха Наши измерения для О<sub>2</sub>
  - Расчет Smith для О<sub>2</sub>

 $Y_i(\overline{T})/p$ .  $(T_0/T)$ 

Данные МРМ92 для воздуха

Точные значения параметров интерференции линий тонкой структуры молекулы О<sub>2</sub> в чистом кислороде получены впервые.

### Уширение, сдвиг, интерференция линии *N*=1-. Измерения при атмосферном давлении.





При атмосферном давлении проявляется эффект интерференции линий тонкой структуры кислорода. При обработке экспериментальных спектров контуром Ван Флека - Вейскопфа наблюдается искажение профиля (рис. Б). Профиль изолированной линии *N*=1- описывается контуром Розенкранца (рис. А).

#### Исследование линии поглощения паров воды у 183 ГГц Интенсивность линии



## Исследование линии поглощения паров воды у 325 ГГц в азоте и кислороде



#### Блок-схема резонаторного спектрометра



Элемент, который обеспечил существенные преимущества спектрометра по сравнению с существующими аналогами

### Цифровое сканирование частоты излучения ЛОВ в режиме ФАПЧ

 $\mathsf{F}_{\mathsf{ЛOB}} = \mathsf{n} \cdot \mathsf{F}_{\mathsf{CИHT}} \pm \mathsf{m} \cdot \mathsf{F}_{\mathsf{OII}}$ 

#### Сканирование за счет переключения частоты опорного сигнала Fоп

Относительно низкая частота опорного сигнала в кольце ФАПЧ ЛОВ позволяет использовать цифровые синтезаторы прямого синтеза типа AD9850

При переключении частоты скачок фазы не происходит.

Частота тактового сигнала до 100 МГц

Частота выходного сигнала 20 – 40 МГц

Время переключения частоты ~ 200 нс.

Дискретность частоты ~ 0.03 Гц.

Минимальное время между переключениями ~ 60 мкс.



Применение синтезатора прямого синтеза в качестве источника опорного сигнала фазового детектора позволяет осуществлять быстрое цифровое сканирование частоты излучения СубММ ЛОВ в режиме ФАПЧ без фазовых скачков при переключениях.

#### Определение ширины резонансной кривой (учет дрейфа частоты собственной моды)



На графике отложены усредненные значения ширины резонансного отклика при прямом (красным) и обратном (синим) сканировании частоты излучения в зависимости от числа измерений. Черным показано усредненное значение между прямым и обратным сканом.

После определенного числа усреднений результирующая величина ширины отклика сходится к истинному значению с точностью ~20 Гц.

В зависимости от направления сканирования частоты источника излучения ширина резонансного отклика различна.

Это обусловлено дрейфом центральной частоты отклика, вызванным температурными и механическими воздействиями на резонатор.



#### Определение ширины резонансной кривой

Моделирование формы резонанса:

$$S(f) = \left[\frac{A_0}{\Delta f^2 + (f - f_0)^2}\right] \cdot \left[1 + A_1(f - f_0)\right] + A_2$$

 $\Delta f$  и  $f_0$  – ширина и центр отклика,  $A_{\rm i}$  – варьируемые параметры

Пример записи резонансной кривой на частоте ~ 85 ГГц и результат математической подгонки параметров модели к эксперименту.

Измеренная ширина резонансной кривой - 164 728 (20) Гц.

Точность измерения соответствует чувствительности по коэффициенту поглощения ~4 10<sup>-9</sup> см<sup>-1</sup> или 0.002 дБ/км.



#### Измерение поглощения с применением открытого резонатора

> Частоты собственных мод резонатора

$$L \approx \frac{\lambda_q}{2} q$$
 или  $L = \frac{\lambda_q}{2} \left( q + \frac{1}{\pi} \arccos \left( 1 - \frac{L}{R} \right) - \frac{\lambda_q}{4\pi^2 R} \right)$ 

(L-длина резонатора, q-число полуволн,  $\lambda_q-$ длина волны излучения, R-радиус зеркал.)

 $P_{T}$ 

- > Ширина резонансной кривой резонатора:
- Суммарные относительные потери мощности излучения на один проход резонатора:
- Потери излучения, определяющиеся резонатором (\(\Delta f\_0 - ширина резонанса откачанного резонатора):
- Потери излучения на поглощение в газе:
- Относительные потери интенсивности излучения при прохождении через газ (*аL*<<1)</li>
- Коэффициент поглощения газа:

$$\Delta f = \frac{c \cdot P_{\Sigma}}{2\pi L}$$

$$P_{\Sigma} = P_{\text{PE3OHATOP}} + P_{\Gamma A3}$$

$$P_{\text{CBЯ3b}} + P_{\text{ОТРАЖЕНИЕ}} + P_{\text{ДИФРАКЦИЯ}}$$

$$P_{PE3OHATOP} = \frac{2\pi L\Delta f_0}{C}$$

$$P_{\Gamma A3} = \frac{2\pi L}{c} \cdot \left(\Delta f - \Delta f_0\right)$$

$$I_{A3} = \frac{(I_0 - I)}{I_0} = \frac{(I_0 - I_0 \exp(-\alpha L))}{I_0} \cong \alpha L$$

$$\alpha = \frac{2\pi}{c} \cdot \left(\Delta f - \Delta f_0\right)$$

Континуальное поглощение

#### Возможные механизмы возникновения:

- 🗸 дальние крылья линий;
- ✓ димеризация молекул воды (H<sub>2</sub>O)<sub>2</sub> и образование слабосвязанных комплексов типа H<sub>2</sub>O-N<sub>2</sub>,H<sub>2</sub>O-O<sub>2</sub>;



✓ поглощение, индуцированное столкновениями типа N<sub>2</sub>-N<sub>2</sub>, N<sub>2</sub>-O<sub>2</sub> и O<sub>2</sub>-O<sub>2</sub>.

### Ни один из механизмов не подтвержден во всем диапазоне атмосферных параметров!

Эмпирическая параметризация атмосферного континуального поглощения:

$$\alpha_{cont} = \left[ C_{H_2O-H_2O} P_{H_2O}^2 \left( \frac{T_0}{T} \right)^{X_{H_2O-H_2O}} + C_{H_2O-air} P_{H_2O} P_{air} \left( \frac{T_0}{T} \right)^{X_{H_2O-air}} + C_{air-air} P_{air}^2 \left( \frac{T_0}{T} \right)^{X_{air-air}} \right] \cdot v^{X_v}$$

Точные значения параметров линий и континуума могут быть получены только из лабораторных исследований.

#### Измерение малого нерезонансного поглощения в атмосфере



Экспериментально полученная зависимость ширины резонансной кривой от номера моды резонатора на частоте 140.286 ГГц и результат ее подгонки к теоретической кривой.

Варьируемый параметр - атмосферное поглощение определяется, как 0.4301(27) дБ/км

### Континуальное поглощение в смеси водяного пара с азотом. Трудности исследования.




## Континуальное поглощение в смеси водяного пара с азотом. Измерения при комнатной температуре (T = 297 K).



Континуальное поглощение в смеси водяного пара с азотом. Контрольный эксперимент при -3.5 °С (T = 269.5 K)

Давление 982 гПа, влажность 2.83 г/м<sup>3</sup> (70% отн. влажн.)



Континуум при более низкой температуре также лежит выше расчетного.





## Методика измерения континуума

