

Widma referencyjne cząsteczek atmosferycznych – pomiaru oraz porównanie z wynikami obliczeń ab initio

K. Bielska¹, A. A. Kyuberis², Z. D. Reed³, G. Li⁴, S. Wójtewicz¹,
J. Domysławska¹, A. A. Balashov¹, D. D. Tran¹, A. Cygan¹,
R. Ciuryło¹, E. M. Adkins³, L. Lodi⁵, N. F. Zobov⁵, V. Ebert⁴,
D. Lisak¹, J. T. Hodges³, J. Tennyson⁵, O. L. Polyansky⁵

¹*Instytut Fizyki, Wydział Fizyki, Astronomii i Informatyki Stosowanej,
Uniwersytet Mikołaja Kopernika w Toruniu, ul. Grudziądzka 5, 87-100 Toruń*

²*Van Swinderen Institute for Particle Physics and Gravity,
University of Groningen, Nijenborgh 4, 9747AG Groningen, The Netherlands*

³*Chemical Sciences Division,
National Institute of Standards and Technology,
Gaithersburg, Maryland 20899, USA*

⁴*PTB (Physikalisch-Technische Bundesanstalt),
Bundesallee 100, 38116 Braunschweig, Germany*

⁵*Department of Physics and Astronomy, University College London,
Gower Street, London WC1E 6BT, United Kingdom*

Zdalne pomiary spektroskopowe, prowadzone w atmosferze ziemskiej zarówno z naziemnych stacji badawczych jak i satelitów, umożliwiają monitorowanie stanu naszej atmosfery oraz zachodzących w niej procesów. Do kluczowych molekuł należą m.in. woda, dwutlenek węgla, ozon, podtlenek azotu, tlenek węgla, metan oraz tlen. Szczególne znaczenie mają słabe linie molekularne, gdyż w tym przypadku nawet na wielokilometrowej drodze nie dochodzi do nasycenia absorpcji.

Widma tlenu wykorzystywane są między innymi do określania ciśnienia i temperatury poszczególnych warstw atmosfery. Do niedawna wykorzystywane było głównie pasmo A, które jest najsilniejszym pasmem w czerwonej części widma tlenu. Pokazano, że równoległe użycie widm odpowiadających 15 razy słabszemu pasmu B w wielu zastosowaniach poprawia dokładność pomiaru, jednak do niedawna wysokiej jakości dane referencyjne były niedostępne. Zostaną zaprezentowane wyniki pomiarów parametrów kształtu linii widmowych z pasma B tlenu, rozszerzonych przez powietrze, wraz z ich zależnościami od temperatury [1].

W niektórych spośród zastosowań zdalnych pomiarów atmosferycznych, wymagane jest określenie zawartości poszczególnych gazów na promilowym poziomie dokładności. Przykładowo, w przypadku dwutlenku węgla określenie jego źródeł oraz dróg usuwania z atmosfery wymaga dokładności rzędu 1 ppm (część na milion) co odpowiada względnej dokładności 0.25% [2]. Podobnie w przypadku występującego w atmosferze w śladowych ilościach tlenku węgla, oczekiwane są dokładności pomiarów

rzędu 0.5% [3]. W niektórych zdalnych pomiarach satelitarnych raportuje się względną dokładności bliskie 0.2% [4].

Do niedawna nie były dostępne dane referencyjne, które umożliwiałyby określenie składu badanej próbki bez utraty deklarowanej obserwacyjnej dokładności: wyniki pomiarów natężeń linii, uzyskiwane w różnych laboratoriach, charakteryzowały się kilkuprocentowym względnym rozrzutem. Zaprezentowane zostaną najnowsze wyniki pomiarów i obliczeń natężeń linii w widmie tlenku węgla, gdzie po raz pierwszy osiągnięto zgodność na poziomie promilowym pomiarów wykonanych różnymi technikami w różnych laboratoriach oraz obliczeń *ab initio* [5]. Ponadto, pokazane zostaną wyniki pierwszych pomiarów linii z bardzo słabego pasma rowibracyjnego CO, również porównane z wynikami obliczeń [6].

Bibliografia

- [1] Bielska K. i in., w przygotowaniu.
- [2] Thompson D. R. i in., J. Quant. Spectrosc. Radiat. T. 113, 2265 (2012); Miller C. i in., J. Geophys. Res. 112, D10314 (2007).
- [3] red. Tans P., Zellweger P., 18th WMO/IAEA meeting on carbon dioxide, other greenhouse gases and related measurement techniques (GGMT-2015). GAW Report No. 229: World Meteorological Organization (2016).
- [4] Yuan Y. i in., Remote Sens. 11, 2981 (2019); Wunch D. i in., Phil. Trans. Roy. Soc. A 369, 2087 (2011).
- [5] Bielska K. i in., Phys Rev. Lett. 129, 043002 (2022).
- [6] Balashov A. A. i in., w przygotowaniu.