

TESIS DOCTORAL

presentada por

Juan Ramón PARDO CARRIÓN

para obtener el

Doctorado Europeo (Université PARIS VI - Universidad
COMPLUTENSE de Madrid)

Especialidad: Astrofísica y Técnicas Espaciales

**ESTUDIOS DE LA ATMÓSFERA TERRESTRE
MEDIANTE OBSERVACIONES EN
LONGITUDES DE ONDA MILIMÉTRICAS Y
SUBMILIMÉTRICAS**

(Traducción al Castellano del original presentado y defendido en Francés)

Defendida el 20 de Diciembre de 1996 en el anfiteatro del Instituto de Astrofísica
de París ante la comisión compuesta por:

Sr. Gérard Mégie	Presidente
Sr. Klaus Künzi	Emisor de informe
Sr. Manuel Rego	Emisor de informe
Sr. Daniel Breton	Examinador
Sra. Maryvonne Gérin	Examinador
Sr. Jesús Gómez-González	Examinador
Sres. José Cernicharo y Mr. Pierre Encrenaz	Co-directores de tesis

A mis padres y a mi hermana

Agradecimientos

Ha sido para mí un periodo vivido con gran intensidad éste de la realización de mi tesis doctoral. Durante éste tiempo me fue posible conocer y hacerme amigo de muchas personas en sitios muy diferentes. Además, a pesar de la distancia, he mantenido contacto con antiguos amigos que encontré en mi época universitaria en Madrid o incluso en épocas anteriores. Ellos siempre me han animado en los momentos importantes y nunca han dudado a la hora de ayudarme cuando los he necesitado. Todas esas personas están en mi recuerdo ahora que termino éste trabajo, al igual que mi familia que ha debido aceptar el reencontrarme sólo unas pocas veces al año.

Quisiera en primer lugar agradecer a los miembros del *Centro Astronómico de Yebes* donde inicié mi trabajo de investigación científica. Mi primer reconocimiento especial es a José Cernicharo cuyo aporte ha sido fundamental en éste trabajo tanto por sus ideas, sugerencias, ayuda en el trabajo teórico y experimental, así como por sus ánimos constantes. Quiero, asimismo, subrayar la ayuda de Jesús Gómez González (Director del OAN) y de Jesús Martín Pintado (Director del CAY) por el impulso dado a mi labor. Deseo además dar las gracias a Valentín Bujarrabal por haberme iniciado en el mundo de la investigación. También tengo palabras de agradecimiento para todos los otros colegas de Yebes, y especialmente para Eduardo González Alfonso et J. Eusebio Garrido, este último desgraciadamente desaparecido, con quienes compartí una casa en Guadalajara en los comienzos de mi tesis y cuyas calidades humanas me han tocado especialmente.

En París también tuve la suerte de tener una gran acogida en un laboratorio en el que pude llevar siempre a cabo mi trabajo con la ayuda necesaria. Tengo un que expresar un reconocimiento especial a Catherine Prigent, Maryvonne Gerin y Laurent Pagani que han colaborado directamente en mis trabajos y han sido para mí de gran ayuda en su desarrollo. Quiero agradecer de una forma especial a Pierre Encrenaz el haber sabido siempre guiar mi trabajo hacia colaboraciones con laboratorios nacionales y extranjeros; y también a Yves Viala, director actual del DEMIRM, y Gerard Beaudin por no haber dudado nunca en poner a mi disposición todo los medios que he necesitado (debo señalar su apoyo en mis necesidades específicas ya que mi trabajo versa sobre un tema ciertamente minoritario en el laboratorio). Por otro lado, agradezco a la profesora Norma Sanchez el haberme invitado repetidamente a las escuelas y coloquios que ella organiza en Erice y en París, lo que me ha permi-

tido seguir los últimos progresos en cosmología teórica y observacional, tema en el que estoy particularmente interesado a pesar de que quede fuera de mi línea principal de investigación de investigación. Quisiera asimismo tener un recuerdo para otros amigos encontrados en el seno del laboratorio y que han hecho de mi estancia algo inolvidable: Roberto Maoli, María Jesús Sempere, Catherine Guillou, François Viallefond, Corinne Boutez, Alain Maestrini, Priscilla Maréchal, Fabienne Casoli, Mireille et Bernard Fort, Cirille Viguerie, Alessandro Bosselli, Alessandra Contursi, Claudine Laurent, Maurice Gheudin, Pascal Febyre, et d'autres. Un agradecimiento muy especial para Geneviève y James Lequeux que tanto han hecho por mí desde mi llegada a París.

En mi trabajo en Francia siempre he encontrado el estímulo de gentes de otros laboratorios como Emmanuel Lellouch, Guy Rochard, Pascal Brunel, Daniel Breton, Jérôme de la Nöe, Philippe Ricaud, Alain Hauchecorne, y otros

En lo concerniente a las observaciones presentadas en éste trabajo, estas no hubiesen sido posibles sin la ayuda del personal del IRAM en Pico Veleta y del Observatorio de Grenoble en Plateau de Bure. Por ello doy las gracias a Laurent Pagani, Gilles Duvert y Bernard Fouilleux en lo concerniente a las observaciones en POM-2, así como a José Cernicharo y Gabriel Pauvert para les observations en Pico Veleta.

En los últimos meses de mi tesis he realizado una estancia en el Instituto Tecnológico de California (CalTech), donde mi trabajo ha encontrado toda clase de facilidades gracias a Thomas Phillips y Eugene Serabyn, y una ayuda inestimable de Jean Bruston. Por mi estancia en el telescopio JCMT doy las gracias a Richard Hills.

También quiero señalar la ayuda recibida del Departamento de Astrofísica de la *Université Complutense* de Madrid, y especialmente de su director Manuel Rego.

Finalment, no quiero dejar pasar ésta oportunidad de dar las gracias a todos mis amigos en España que siempre han estado dispuestos a ayudarme. Tengo un reconocimiento especial hacia Gonzalo Rueda, José Ángel Fernández-Cano, Silvia García, Carmen Vázquez, Eusebio Sánchez, Antonio Rúa, Juan José Ródenas y Ventura Martínez.

Éste trabajo es, repito, algo inolvidable porque ha sido posible gracias a cada una de las personas que acabo de citar. La continuación se prepara ya en Nueva York para el año próximo. Será en el *Goddard Institute for Space Studies* bajo la dirección

de William Rossow y Catherine Prigent a los que agradezco por esta ocasión de enriquecer mi formación.

Objetivos y descripción general del trabajo

Mi intención a la hora de abordar la redacción de este trabajo es la de, a partir de mi experiencia en estos últimos años de investigación, dar una visión general de las posibilidades que ofrecen las técnicas de observación en los dominios milimétrico y submilimétrico del espectro electromagnético para el estudio de la atmósfera terrestre así como la de tratar en profundidad ciertos aspectos sobre los que he centrado mi trabajo.

Para abordar un trabajo de física experimental es muy importante la realización de unos modelos que permitan de forma sencilla y rápida la reproducción aproximada del sistema físico a estudiar. La relación modelo-experimentación puede ser de dos tipos: por un lado el modelo se puede usar para predecir e interpretar resultados de un experimento o, por el contrario, el modelo puede contener una serie de parámetros libres que las medidas deben determinar. Los dos tipos de relación teoría-práctica se encuentran presentes en éste trabajo.

Teniendo en cuenta el tema de mi tesis y lo que acabamos de exponer, no cabe duda que la primera parte del trabajo debía ser la realización de un modelo sobre la transmisión de ondas electromagnéticas en la atmósfera terrestre en los dominios de longitudes de onda milimétricas y submilimétricas; éste modelo constituye entonces una herramienta de trabajo muy importante a posteriori. Por ello dedicaré una parte relativamente importante de éste manuscrito a la descripción de tal modelo y a los trabajos posteriores basados en él. Veremos en el capítulo 3, por ejemplo, mi principal aportación desde el punto de vista de la modelización consistente en la integración del efecto del campo magnético terrestre sobre la radiación de varias moléculas.

Las observaciones en la zona milimétrica y submilimétrica del espectro electromagnético sirven hoy en día para estudiar las abundancias de distintas especies moleculares atmosféricas que poseen transiciones rotacionales (O_3 , N_2O , SO_2 , etc...). También es posible mediante observaciones de líneas pertenecientes al oxígeno molecular el estudiar los perfiles verticales de temperatura y presión; además las medidas del continuo desde tierra en ciertas regiones del espectro nos permiten conocer el contenido integrado de vapor de agua. El perfil vertical de éste gas puede ser estudiado mediante medidas de las fuertes resonancias rotacionales que presenta en la atmósfera. La mayor parte de los estudios realizados hasta hoy se han llevado a

cabo con instrumentos situados en la superficie terrestre. Parte de los trabajos que se presentan en mi tesis son de éste tipo y han sido realizados con los radiotelescopios IRAM-30m situado en Sierra Nevada (Granada) y POM-2 enclavado en Plateau de Bure (Alpes Franceses). Las transiciones medidas pertenecen a H_2O , con el fin de estudiar la razón de mezcla de dicha molécula en la estratosfera y mesosfera; O_3 , para estudiar su distribución vertical sobre regiones de latitud intermedia; $^{18}\text{O}^{16}\text{O}$, para verificar un modelo del efecto Zeeman que presentan las líneas rotacionales del oxígeno molecular en la atmósfera terrestre; y CO para mostrar su importancia en la mesosfera. Todos estos trabajos se han podido realizar gracias a la aplicación de un algoritmo de inversión de las observaciones espectroscópicas desarrollado a partir del modelo de transferencia radiativa directa en la atmósfera terrestre al que aludí con anterioridad. En éste contexto, y en el marco de la colaboración entre el Departamento de Radioastronomía Milimétrica del Observatorio de París (DEMIRM) y el Observatorio Astronómico Nacional (OAN), se presenta en esta tesis una contribución a la preparación de la parte científica del proyecto europeo EMCOR (radiómetro para medir la emisión milimétrica del ClO atmosférico, gas muy importante en los procesos de destrucción del ozono en la estratosfera) así como la observación eventual de otros componentes atmosféricos minoritarios.

Las observaciones desde la superficie terrestre tienen dos limitaciones principales. Una es el carácter local de los datos que se obtienen, la otra es la pobre resolución espacial (vertical) asociada. El uso de datos de diferentes experimentos para la realización de estudios globales es prácticamente imposible debido a las diferencias técnicas, sobre todo de calibración, entre los diferentes instrumentos. Todos estos problemas se eliminan al realizar el mismo tipo de estudios con un único instrumento embarcado en un satélite. Esto permite realizar medidas sobre amplias zonas del globo terrestre que son calibradas y analizadas de la misma forma y pueden por tanto usarse para llevar a cabo estudios globales. Además, la observación desde satélite permite recibir directamente la emisión procedente de capas altas de la atmósfera sin pasar sistemáticamente por las capas bajas que son mucho más densas y absorben en general una gran parte de la información. La resolución vertical puede ser también considerablemente mejorada. El desarrollo de algoritmos de inversión para tratar los datos que van a suministrar estos satélites ha sido otro punto importante de mi trabajo. En éste contexto general presento aquí el estado actual de los trabajos que he realizado orientados al tratamiento de los datos espectroscópicos de dos

instrumentos: PRONAOS¹ (telescopio submilimétrico sobre globo estratosférico) del Centro de Estudios Espaciales de Francia (CNES), y ODIN (satélite submilimétrico dedicado a astrofísica y aeronomía), que es un consorcio de Suecia, Francia, Canadá y Finlandia.

Este es el hilo conductor de mi trabajo hasta la fecha. La idea general ha sido el combinar el estudio de datos disponibles en el dominio de frecuencias en que me he centrado con el desarrollo teórico de ciertos aspectos. He seguido un camino hacia la participación en la fase de previa de nuevos proyectos lo que me ha posibilitado el colaborar ya con diversos institutos que cito al final de éste trabajo. Gracias al apoyo del Ministerio de Educación y Ciencia Español y del CNRS francés, la continuación de la actividad investigadora expuesta aquí está asegurada hasta finales de 1998.

Pasadena, 16 de Octubre de 1996

Juan Ramón Pardo Carrión

1. Dos meses antes del final de mi tesis se dió a conocer que el experimento de espectroscopía submilimétrica de éste instrumento fué puesto en cuestión. He preferido dejar en el manuscrito de mi tesis las partes del capítulo 5 y del anexo C en las que se describen las nuevas rutinas del programa de reducción de observaciones espectroscopicas CLASS (IRAM-Grenoble) orientadas a corregir las observaciones astrofísicas del efecto de la absorción atmosférica, ya que se pueden usar igualmente para otros proyectos como PIROG, que es un telescopio submilimétrico sobre globo estratosférico en el Francia también participa.

TABLA DE ACRONIMOS

(Los nombres aparecen en la lengua original)

AMSU	Advanced Microwave Sounding Unit, NOAA (USA).
ATM	Atmospheric Transmission at Millimetric and submillimetric wavelengths.
CALTECH	California Institute of Technology.
CAY	Centro Astronómico de Yebes, España.
CEPT	Conférence Européenne des Postes et Télécommunications.
CHALMERS	
CMS	Centre de Météorologie Spatiale (Lannion, France).
CNES	Centre National d'Etudes Spatiales, France.
CSO	CALTECH Submillimetric Observatory.
DEMIRM	DEpartement du Milieu interstellaire en Infra-Rouge et en Millimétrie, France.
DMSP	Defense Meteorological Satellite Program , U.S. Army.
ESA	European Space Agency.
FASCOD	Fast Atmospheric Signature CODE.
IRAM	Institute de Radioastronomie Millimétrique.
JPL	Jet Propulsion Laboratory, USA.
MAS	Millimetric Atmospheric Sounder.
MASTER	Millimeter-wave Acquisitions for Stratosphere/Troposphere. Exchanges Research, ESA.
MISU	
MTZA	Microwave Temperature Sounding of the Atmosphere, Russia.
MLS	Microwave Limb Sounder.
MPM	Microwave Propagation Model.
MSU	Microwave Sounding Unit.
NOAA	National Oceanic and Atmospheric Administration, USA.
NWP	Numerical Weather Prediction.
OAN	Observatorio Astronómico Nacional, España.
POM-2	Petite Operation Millimétrique 2.
SOPRANO	Submillimetric Observation of Processes in the Atmosphere Noteworthy for Ozone.
SSM/I	Special Sensor Microwave/Imager.
SSM/T1	Special Sensor Microwave/Temperature sounder.
SSM/T2	Special Sensor Microwave/humidity sounder.
TIROS	Television and Infra-Red Observation Satellite.
TOVS	TIROS Operational Vertical Sounder.
WRC	World Radiocommunication Conference.

Contenidos

1	Introducción a la estructura físico-química de la atmósfera	1
1.1	Descripción de la estructura física de la atmósfera	4
1.2	Perfil verticales de los gases atmosféricos	10
1.3	Introducción a la química atmosférica	12
2	Transporte de radiación en la atmósfera terrestre en el milimétrico y submilimétrico	23
2.1	Introducción	23
2.2	Parámetros moleculares. Coef. de absorción	28
2.2.1	Cálculo de las frecuencias de transición	29
2.2.2	Cálculo de la función de partición	32
2.2.3	Cálculo de las fuerzas de línea	33
2.2.4	Perfil de las líneas atmosféricas en el rango 1-1000 GHz	34
2.2.5	Algunos casos particulares	37
2.3	Algoritmo de transferencia radiativa directa (1-1000 GHz): ATM	41
2.3.1	Ejemplos de cálculos con ATM	48
2.4	Algoritmo de inversión de espectros	48
2.4.1	Elección de capas. Funciones de sondeo	51
2.4.2	Trabajar con el programa de inversión	54
3	Sondeos milimétricos desde tierra	55
3.1	Modelización del efecto Zeeman sobre las líneas de O ₂	55

3.1.1	Justificación del uso de una línea de $^{18}\text{O}^{16}\text{O}$ para las medidas desde Tierra	65
3.1.2	Instrumentación y observaciones	68
3.1.3	Predicciones y resultados	69
3.1.4	Posible utilización de otras líneas para la validación	76
3.1.5	Aplicaciones	76
3.2	Primera detección desde la superficie terrestre de la emisión a 183 GHz de H_2O en la estratosfera y mesosfera	78
3.2.1	Carácter innovador de estas observaciones	78
3.2.2	Instrumentación y condiciones de observación	79
3.2.3	Análisis de los datos	81
3.2.4	Comparación con otras medidas. Conclusiones	87
3.3	Sondeo del perfil de los gases atmosféricos minoritarios	88
3.3.1	Introducción a las observaciones de líneas de ozono y objetivos	89
3.3.2	Descripción de las observaciones	90
3.3.3	Análisis de las observaciones	93
3.3.4	Discusión. Algunos resultados particulares.	96
3.3.5	Ozono en la baja estratosfera sobre Pico Veleta	102
3.4	El proyecto EMCOR	103
3.4.1	Objetivos	103
3.4.2	Características	107
4	Sondeos milimétricos desde satélite hacia la superficie terrestre	109
4.1	Estudios de la temperatura en torno a 60 y 119 GHz	110
4.1.1	Introducción	110
4.1.2	Discusión sobre la aplicación de ésta técnica al estudio del perfil de temperatura	111
4.1.3	Funciones de peso	115
4.1.4	Competencia con los servicios activos para el reparto de frecuencias cercanas a resonancias del oxígeno	117

4.1.5	Sistemas de sondeo actuales a 60 GHz. Trabajos de validación	118
4.1.6	Sistemas futuros a 60 GHz: AMSU-A, SSMIS, MTZA,...	124
4.1.7	Exploration de la température au-delà de ~50 km.	129
4.1.8	Estudio y selección de frecuencias para un proyecto “Push-Broom” a 57 GHz del CNES	131
4.2	Sondeo del vapor de agua troposférico desde satélite	142
5	Técnicas de observación para evitar la absorción troposférica. Sondeo al limbo	147
5.1	Introducción	147
5.1.1	Adaptación del algoritmo de inversión al análisis de observaciones astrofísicas.	149
5.2	Sondeos al limbo atmosférico	151
5.2.1	Consideraciones técnicas	154
5.2.2	La observación de los componentes atmosféricos minoritarios mediante sondeo al limbo	155
5.2.3	L'étude du profil de température au moyen de cette technique. Le projet ODIN	156
5.2.4	Sistemas de sondeo actuales y futuros	164
6	Conclusiones y perspectivas	171
A	Descripción de los comandos de ATM	175
B	Utilización del programa de inversión	189
C	Rutinas atmosféricas para CLASS	193

Capítulo 1

Introducción a la estructura físico-química de la atmósfera

La envoltura gaseosa que rodea a la Tierra, la atmósfera, tiene una composición química y una estructura física que depende de una gran variedad de parámetros, unos de origen natural, como por ejemplo la cantidad de radiación recibida del Sol, y otros de carácter artificial y local, como puede ser la acción de los vertidos industriales a la atmósfera. Algunos de los parámetros que describen su estructura y composición tienen fluctuaciones o variaciones lentas, lo que permite definir unas atmósferas estándar en términos de dichos parámetros (presión, temperatura, composición en O_2 , N_2 , Ar, etc...), mientras que otros tienen fluctuaciones rápidas tanto espacial como temporalmente (vapor de agua, compuestos sulfurados, ozono, etc...) por lo que su estudio debe efectuarse sobre una base estadística. La propagación de ondas milimétricas y submilimétricas en el seno de la atmósfera terrestre está directamente relacionada con los factores citados anteriormente: por un lado la composición química, pues el tipo de moléculas existente en la atmósfera determina una serie de frecuencias en las que los mecanismos de absorción y emisión son importantes, y, por otro, las condiciones físicas ya que la distribución de esas moléculas (densidad) influirá en el perfil de las líneas, así como lo harán los perfiles de presión y temperatura ya que los coeficientes de absorción de las diversas moléculas dependen de estas variables físicas. Vamos a describir, por tanto, la estructura físico-química de la atmósfera de nuestro planeta de manera rápida antes de continuar adelante en éste trabajo.

La atmósfera es, básicamente, una mezcla de gases cuyas proporciones relati-

vas varían localmente. Sus principales constituyentes presentan en promedio las siguientes razones de mezcla en volumen¹ a nivel del mar referidos a aire seco: Nitrógeno 78.083, Oxígeno 20.947, Argón 0.934 y Dióxido de Carbono 0.033. El vapor de agua es otro componente importante pero su concentración varía enormemente en el tiempo y el espacio, especialmente en las capas próximas a la superficie. Existen, además, una gran cantidad de componentes minoritarios, la mayoría de los cuales no tienen interés a la hora de estudiar la transmisión atmosférica de ondas electromagnéticas por tratarse de gases nobles atmosféricos Neón, Helio, Kriptón y Xenón (química y espectroscópicamente inertes) o moléculas sin momento dipolar eléctrico (H_2 y CH_4). La mayoría de las líneas atmosféricas (1-1000 GHz) se deben a transiciones dipolares eléctricas. Una excepción es el O_2 que presenta transiciones dipolares magnéticas intrínsecamente mucho más débiles que las dipolares eléctricas, pero que, por la gran abundancia de éste gas, juegan un papel igualmente importante en la región de frecuencias que nosotros vamos a estudiar. Una parte muy importante de los gases atmosféricos que poseen transiciones rotacionales se verán con más detalle desde un punto de vista espectroscópico en el capítulo 2.

La abundancia relativa de algunos componentes minoritarios dentro de la mezcla total cambia aunque se mantiene dentro de los mismos órdenes de magnitud para alturas inferiores a 80 km. A partir de los 80 kilómetros la atmósfera está muy enra-

1. Queremos recordar aquí las diferentes formas de expresar las concentraciones de gases:

- Razón de mezcla en masa (r_{mi}) es el cociente de la masa correspondiente a la especie i (M_i) sobre el total M_a de aire en un volumen fijo.
- Razón de mezcla en volumen (r_{vi}) es el mismo concepto pero aplicado a los volúmenes. Existe la relación:

$$r_{mi} = \frac{\mu_i}{\mu_a} r_{vi}$$

donde μ_i es la masa molar de la especie i y $\mu_a = 28.9645$ g/mol es el valor considerado como masa molar media del aire.

- Presión parcial (P_{mi}) es obtenida a partir de la razón de mezcla en volumen y la presión total P :

$$P_{mi} = P \cdot r_{vi}$$

- Densidad parcial se obtiene a partir de la razón de mezcla en masa y de la densidad del aire ρ :

$$\rho_{mi} = \rho \cdot r_{mi}$$

- Concentración molar: $M_i \mu_a / M_a \mu_i$.
- Densidad numérica de la especie i [cm^{-3}]: $n_i = \frac{\rho_i \cdot N_A}{\mu_i}$, donde N_A es el número de Avogadro.

recida debido a procesos de disociación e ionización de forma que sus efectos sobre la transmisión de ondas electromagnéticas con frecuencias superiores a 1 GHz son pequeños. La distribución en altura del vapor de agua es algo extraordinariamente variable de forma temporal y local. En el caso de no existencia de nubes, un perfil vertical estándar puede ser el tomar hasta unos 15 km una distribución que sigue un decrecimiento exponencial de la abundancia, con una escala de alturas H_0 :

$$\rho_{H_2O} = (\rho_{0,H_2O} \cdot e^{-H/H_0}) \quad (1.1)$$

donde H_0 suele tomar un valor en torno a 2 km. La atmósfera es muy seca a partir de 15 km. Las razones de mezcla de dicho gas son inferiores a 10 partes por millón en volumen (ppmv) a partir de dicha altura.

Hasta aquí a grandes rasgos una idea del perfil químico de la atmósfera. Vamos a hablar a continuación de su perfil físico, es decir, densidad, presión y temperatura. En realidad sólo dos de estas variables son independientes al verificarse con aproximación la ecuación de los gases perfectos. La distribución de la temperatura con la altura tiene un especial interés, ya que su comportamiento se toma como base para dividir la baja atmósfera (hasta 80-90 Km) en tres partes:

1) La **troposfera** en la que la temperatura disminuye con la altura a razón de unos 6 K/km típicamente y que tiene una extensión variable dependiendo de la latitud. La altura a la que la temperatura para de decrecer **tropopausa** es mayor en las zonas ecuatoriales que en las regiones polares.

2) La **estratosfera** en la que la temperatura aumenta con la altura a razón de unos 2 K/km aproximadamente debido a procesos de absorción de la radiación ultravioleta solar en las bandas moleculares del O_2 y, principalmente, del O_3 . La zona en la que de nuevo éste comportamiento respecto a la temperatura se invierte se denomina **estratopausa** y se localiza entre unos 47 y 55 kilómetros.

3) La **mesosfera**, a partir de unos 55 km se caracteriza de nuevo por una disminución de la temperatura con la altura hasta llegar a unos 80-90 km en la que la temperatura se estabiliza (**mesopausa**). Más allá está la **termosfera** donde la temperatura llega hasta ~ 2000 K hacia los 500 km a causa de una importante absorción del ultravioleta solar, principalmente por el oxígeno molecular y atómico..

La presión atmosférica decrece con la altura de una forma aproximadamente exponencial por lo que su perfil se suele describir de forma simple usando sólo dos parámetros: una escala de alturas y la presión a un nivel de referencia.

Todos los datos que hemos aportado hasta ahora dan idea de un término medio en la composición y estructura de la atmósfera. Los fenómenos climatológicos locales así como los agentes contaminantes introducidos y la química a que dan lugar, junto a los fenómenos de transporte, hacen que en un momento dado y en un lugar concreto el usar abundancias y perfiles promedio esté bien alejado de la realidad.

1.1 Descripción de la estructura física de la atmósfera

En nuestro planeta sólo un 1% de la masa atmosférica se encuentra por encima de los 30 km de altura, y sólo 0.001% a partir de 90 Km. Un modelo simple de atmósfera planetaria puede hacerse suponiendo que esta es totalmente transparente a la radiación, que no contiene partículas líquidas y que la temperatura de la frontera inferior de dicha atmósfera es la de la superficie del planeta, cuyo valor puede ser determinado de forma simple, usando la ley de Stefan-Boltzmann, como sigue:

$$4\pi a^2 \sigma T_e^4 = \pi a^2 (1 - A) F / R^2 \quad (1.2)$$

donde σ es la constante de Stefan-Boltzmann, a es el radio del planeta, R su distancia al Sol, en el caso de la Tierra $1.5 \cdot 10^{11}$ m, F es el flujo solar en la posición del planeta, en el caso de la Tierra 1370 Wm^{-2} , y T_e la temperatura efectiva de la superficie. Considerando el movimiento vertical de un elemento de volumen específico $V (=1/\rho)$, sometido a una presión P y a una temperatura T , y asumiendo la existencia de equilibrio hidrostático, llegamos a la siguiente ecuación de movimiento vertical:

$$dp = -g\rho dz \quad (1.3)$$

La aplicación de la ecuación de estado de los gases perfectos $\rho = P_m \cdot p / RT$ permite escribir esa ecuación de movimiento como sigue:

$$dp/p = -dz/H \quad (1.4)$$

cuya solución es:

$$p = p_0 \exp\left(-\int_0^z dz/H\right) \quad (1.5)$$

donde $H=RT/P_m g$ es la llamada escala de alturas y P_m es el “peso molecular medio” del gas atmosférico. La aproximación en que p disminuye exactamente de forma exponencial con la altura sólo sería válida si H fuese realmente una constante, lo cual no es cierto en la atmósfera terrestre ya que H depende de T y g , que tienen una cierta variación con la altura. Volviendo al estudio del movimiento vertical del elemento de volumen antes citado, la aplicación sobre él de la primera ley de la termodinámica nos lleva a:

$$dq = c_v dT + pdV \quad (1.6)$$

En el caso de movimiento adiabático ($dq = 0$), y usando la forma diferencial de la ecuación de estado, llegamos a:

$$pdV + Vdp = RdT/P_m \quad (1.7)$$

pero en un gas perfecto $c_p - c_v = R/P_m$ de forma que obtenemos finalmente: $c_p dT - Vdp = 0$ lo que sustituido en la ecuación de movimiento 1.3 nos da:

$$\frac{dT}{dz} = -\frac{g}{c_p} = -\Gamma \quad (1.8)$$

donde Γ representa el gradiente de descenso de la temperatura con la altura que cabe esperar en el caso ideal de que la atmósfera sólo sea calentada por contacto con la superficie de la Tierra. Este es el comportamiento de la atmósfera terrestre en la troposfera (disminución prácticamente lineal con la altura). La causa del cambio radical de comportamiento en la estratosfera se debe a la absorción de radiación solar, principalmente por el ozono. En la Troposfera el coeficiente Γ de descenso de la temperatura con la altura tiene un valor aproximado de 6.5 K/km, aunque su valor es bastante variable y, de hecho, algunas veces se observan en la troposfera capas cercanas a la superficie en las que la temperatura aumenta con la altura. Cuando tiene lugar ese cambio se dice que existe una inversión de temperatura. El final de la Troposfera (Tropopausa) no está situado a la misma altura en todas las zonas de la Tierra. Así, por ejemplo, en latitudes tropicales la tropopausa está a unos 16 Km mientras que en los polos sólo está a 9 km aproximadamente. Las razones físicas del gran espesor de la troposfera en el ecuador son las altas temperaturas superficiales y la gran eficacia de los mecanismos de mezcla térmica. Como consecuencia, la zona de descenso de temperaturas se extiende hasta alturas mayores. Más sorprendente es el hecho de que la temperatura de la tropopausa sea mayor en los polos que en las zonas

ecuatoriales incluso en el invierno local cuando no hay radiación solar directa sobre el polo. Evidentemente, éste hecho no es explicable mediante consideraciones radiativas y su existencia demuestra que los movimientos atmosféricos a gran escala actúan como portadores de calor. El estudio de la troposfera es el objetivo fundamental de la meteorología. Es en esta capa donde tienen lugar todos los fenómenos físicos que determinan las condiciones a las que se encuentra sometida la vida en nuestro planeta.

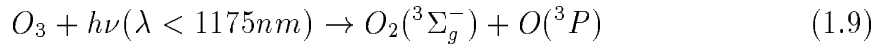
Hasta principios de éste siglo, cuando sólo se disponía de medidas realizadas hasta 10 km de altura, se pensaba que la temperatura seguía bajando con la altura hasta el cero absoluto, siguiendo el modelo simple de calentamiento atmosférico directo por la superficie de la Tierra esbozado anteriormente. En 1902 L.P. Teisserenc de Bort, tras estudiar los resultados de más de 200 lanzamientos de globos-sonda, vió que el descenso de temperatura se detenía y se producía un nuevo aumento a partir de una altura de entre 8 y 12 kilómetros. Al principio se dudó del descubrimiento, pero nuevos datos acabaron por confirmarlo.

Toda la atmósfera de la Tierra no está, por supuesto, en equilibrio termodinámico, sin embargo, en sus capas bajas las condiciones conocidas como **equilibrio termodinámico local** (ETL) constituyen una buena aproximación. Este principio se basa en el hecho de que las magnitudes termodinámicas varían de forma suficientemente lenta como para que podamos dividir la atmósfera en capas homogéneas en las que se verifican las ecuaciones básicas del equilibrio termodinámico: ecuación de Boltzmann para describir la población de los niveles de energía de las diferentes moléculas de acuerdo a la temperatura en capa, ley de Maxwell para la distribución estadística de las velocidades, y ley de Saha para la razón de abundancias de los diferentes estados de ionización d'un élément (ésta última no es necesaria para las temperaturas que reinan desde la superficie terrestre hasta la posición de la mesopausa).

Por encima de la troposfera está la estratosfera en la que las propiedades no están determinadas, como en la troposfera, por mezclas y turbulencias a gran escala. En ella la temperatura permanece aproximadamente constante durante los $\sim 5 - 10$ primeros kilómetros para después producirse un aumento que continúa hasta la estratopausa, a una altura de unos 50 kilómetros sobre la superficie de la Tierra. La causa de éste subida de temperatura se encuentra en la absorción de radiación ultravioleta solar por parte del ozono, y en menor medida por el O_2 , lo que, consecuentemente, constituye un aporte de calor a esta zona de la atmósfera.

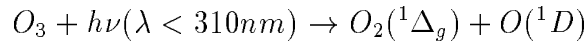
Espectros de absorción UV de O₃ y O₂

El ozono tiene una energía de disociación relativamente pequeña (24.3 ± 0.1 kcal, o bien 8510 ± 30 cm^{-1}) de forma que toda la radiación a partir de aproximadamente $1\mu m$ puede conducir, en principio, a la fotodisociación. El ozono presenta en el visible una banda de absorción (banda de Chapuis) entre 410 y 750 nm, que presenta una sección eficaz máxima de absorción del orden de $5 \cdot 10^{-21} cm^2$ hacia los 600 nm. El proceso responsable de la aparición de esa banda es el siguiente:



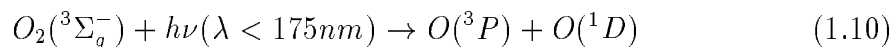
Esta banda es responsable de la fotodisociación del O₃ por radiación visible sobre todo hacia el rojo-naranja.

Otro proceso de fotodisociación, permitido por las reglas de selección conduce a estados excitados del O y O₂:



que corresponde a una absorción llamada **banda de Hartley** con un máximo en 250 nm. El hecho de que éste proceso dé lugar a moléculas de O₂ en el estado excitado $^1\Delta_g$ tiene gran repercusión en el espectro del cielo pues la desexcitación del O₂ en ese estado da lugar a una emisión a $1.27\mu m$. Igualmente, el O(1D) que se obtiene como resultado es muy reactivo en la atmósfera, en particular con el H₂O, CH₄, H₂ y N₂O. La banda de Hartley es responsable de la eficaz absorción de la radiación UV solar por parte del ozono. Este es el motivo por el que éste gas, que es un componente marginal de la atmósfera, adquiere un alto interés para la vida en la Tierra.

Junto al ozono, el oxígeno molecular también ejerce una acción de limitación al paso de la radiación ultravioleta solar hasta la superficie de la Tierra. Un mecanismo bastante importante es el que da lugar al llamado **continuo de Schumann-Runge** que produce extinción de la radiación ultravioleta solar a longitudes de onda por debajo de los 175 nm. El mecanismo es el siguiente:



que adquiere su mayor importancia en capas altas de la atmósfera (termosfera) donde es fuente de oxígeno atómico en el estado excitado O(1D). Otro proceso de

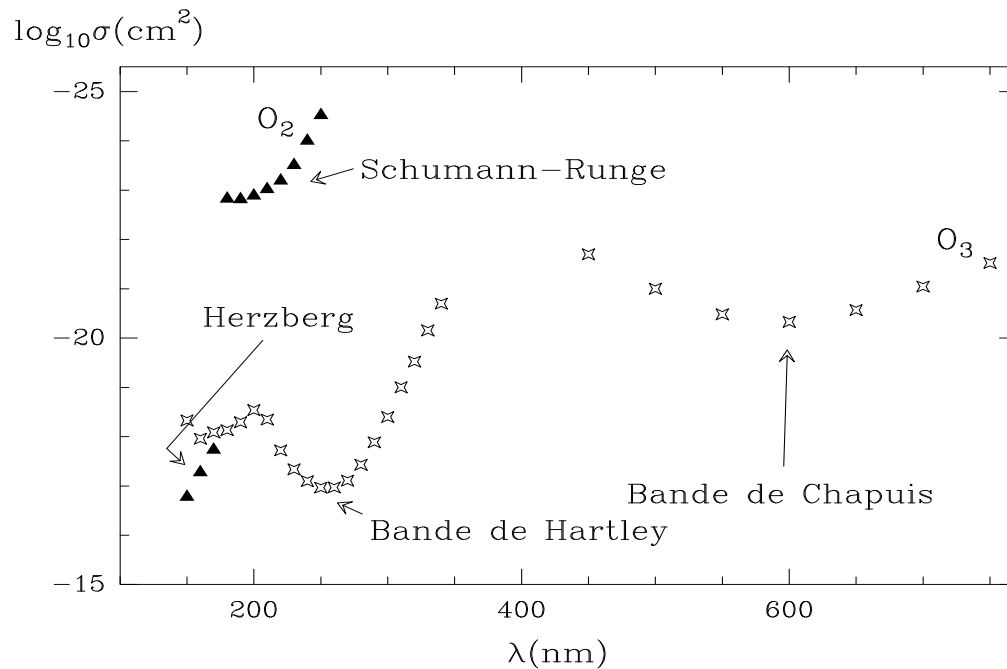


FIG. 1.1 - Secciones eficaces de absorción por molécula (expresadas en cm^2) de O_3 (estrellas) y O_2 (triángulos) en los dominios visible y ultravioleta, según *Houghton et al.*, (1986) [41].

fotodisociación da lugar a dos átomos de oxígeno no excitados $\text{O}(^3P)$, denominado **continuo de Herzberg**, que comienza hacia los 242 nm. La sección eficaz asociada a éste proceso es mucho menor que la correspondiente al caso anterior por lo que para manifestarse requiere una mayor cantidad de oxígeno, de forma que aparece en capas mucho más bajas. La absorción en la banda de Hartley del ozono tiene una parte común con el continuo de Herzberg del O_2 lo que influye en el valor del coeficiente de absorción del oxígeno molecular en la estratosfera. El coeficiente de fotodisociación j_∞ a unos 242 nm correspondiente al continuo de Herzberg del O_2 es de unos 10^{-11} s^{-1} , mientras que en el dominio de Hartley del O_3 a esa longitud de onda tenemos $2.3 \cdot 10^{-4} \text{ s}^{-1}$ lo que explica que, a pesar de su mucha menor abundancia, el ozono es más importante que el O_2 en la absorción de la radiación solar UV en la estratosfera. La figura 1.1 muestra la sección eficaz de fotodisociación del oxígeno molecular y del ozono en el visible y en el ultravioleta próximo.

Flujo de radiación solar sobre la atmósfera

Los procesos de fotodisociación juegan un papel muy importante en los procesos químicos de la atmósfera así como en su perfil físico. El flujo de energía total que llega a las partes altas de la atmósfera está determinado, obviamente, por la emisión solar y por la distancia Sol-Tierra. Su distribución espectral depende de la temperatura superficial del Sol. El valor total de éste flujo energético por unidad de tiempo se conoce como constante solar, aunque no es realmente una constante pues sufre variaciones debido, sobre todo, a los cambios en la distancia Sol-Tierra a lo largo del año y a un ciclo de ligera variabilidad solar de unos 11 años de duración. El valor promedio es:

$$S = 1.96 \pm 0.02 \text{ cal} \cdot \text{cm}^{-2} \cdot \text{min}^{-1} = 137 \pm 1 \text{ mW} \cdot \text{cm}^{-2} \quad (1.11)$$

que corresponde a un valor de $(T_{eff})_{\odot} = 5785 \pm 15K$ (la temperatura efectiva se define como aquella correspondiente al cuerpo negro cuya emisión integrada a todas las frecuencias daría el valor de la energía total emitida). La densidad de energía $\rho_s(\nu)$ se reduce desde su emisión por el Sol hasta su llegada a la atmósfera terrestre según el llamado factor de dilución:

$$\beta_s = \frac{R^2}{4 \cdot r^2} \quad (1.12)$$

donde R es el radio del Sol y r la distancia Sol-Tierra. Este factor oscila a lo largo del año entre $5.23 - 5.59 \cdot 10^{-6}$ lo que hace que la constante solar pase de 1.88 a 2.01 $\text{cal} \cdot \text{min}^{-1} \cdot \text{cm}^{-2}$. En los cálculos asociados a la reacciones de fotodisociación en la atmósfera terrestre se utilizan secciones eficaces de absorción, por eso es conveniente expresar la constante solar en $N_{\text{tot}} \cdot \text{cm}^{-2} \cdot \text{sec}^{-1}$. Dicho número se obtiene fácilmente de acuerdo a la siguiente expresión:

$$q(\nu) = \frac{c\beta_s\rho_s(\nu)}{h\nu} = \frac{8\pi\beta_s\nu^2}{c^2}(e^{h\nu/KT_s} - 1)^{-1} \quad (1.13)$$

que integrada entre dos frecuencias nos dará el número de fotones que llegan por segundo y cm^2 a lo alto de la atmósfera en esa banda.

1.2 Perfil verticales de los gases atmosféricos

Nos centraremos en esta sección en aquellos gases que poseen emisión en la región milimétrica y submilimétrica del espectro electromagnético ya que ellos sólo son van a poder ser estudiados mediante las técnicas que se describen en éste trabajo.

- O_2 : Su concentración disminuye con la altura conservando una razón de mezcla prácticamente constante (relación de abundancias $\sim 79/20$ con el N_2) hasta unos 80 km donde los procesos de disociación de esta molécula comienzan a adquirir cierta importancia.

- H_2O (gas) se encuentra muy concentrada en los primeros kilómetros de la atmósfera donde puede presentar perfiles muy variables debido a la coexistencia de tres estados de agregación en las condiciones físicas reinantes en la baja atmósfera. A partir de 15-20 km el vapor de agua pasa a ser un gas extremadamente raro con razones de mezcla que no superan las 10 partes por millón.

- O_3 muestra un perfil en términos de razón de mezcla con un máximo hacia la baja estratosfera variando la altura a la que éste se presenta con la latitud. Para zonas de latitud intermedia se observan valores superiores de unos 7 ppmv a 35-40 km, para bajar a 1ppmv o menos a 60 km y más arriba.

- CO : En las capas bajas hasta unos 5 km su concentración incrementa ligeramente con la altura debido a procesos fotoquímicos y, sobre todo, a fuentes biológicas, con unas razones de mezcla entre 0.125 y 0.140 ppmv. Después, la concentración decrece bastante hasta unas 0.020 ppm a los 25 km. A partir de ahí parece que la concentración se mantiene constante. Un incremento importante se debe producir, no obstante, en la mesosfera a juzgar por el perfil gaussiano y estrecho mostrado por sus líneas milimétricas medidas desde Tierra (ver figura 1.2).

- N_2O : Parece claro que la concentración es independiente de la altura hasta un nivel que va desde 14 km en los polos a unos 17 km en los trópicos, con un valor, en promedio, de 0.292 ppmv. Por encima de esta altura hay un descenso de la concentración puesto que N_2O es la principal fuente de NO formado en la reacción:



que se va haciendo importante por el aumento de la presencia del átomo excitado de oxígeno que se forma a partir de la fotodisociación del ozono. La concentración se reduce aproximadamente a la centésima parte a los 50 km.

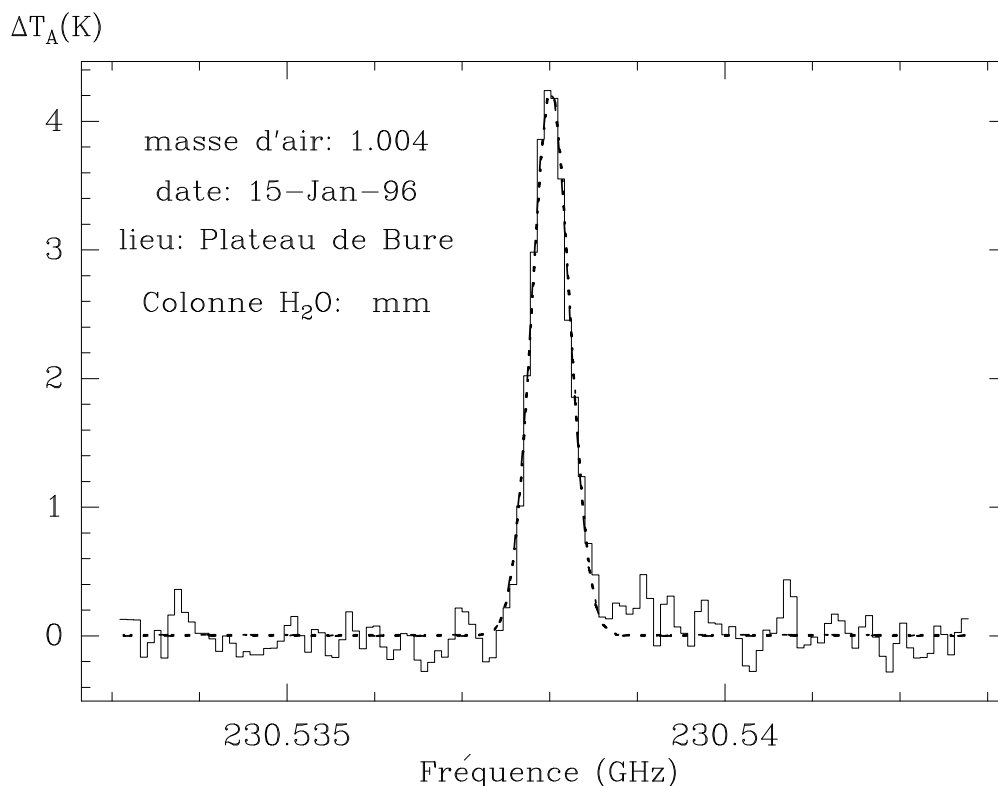


FIG. 1.2 - Observación de la línea atmosférica de CO a 230.5 GHz realizada con el radiotelescopio POM-2. Los datos se han ajustado con una gaussiana de la que se deriva que la anchura térmica de la línea es de 0.5 MHz lo que indica que la razón de mezcla de CO es bastante importante (2 ppmv o más) por encima de ~ 65 km.

- NO_2 y NO : son dos gases muy importantes por su participación en ciertos ciclos catalíticos (destrucción) del O_3 . Lo más interesante es la existencia de un considerable aumento de las concentraciones de ambos gases con la altura tras pasar un mínimo a unos 2 km para el NO y a unos 9 km para el NO_2 . Hacia los 50 km las concentraciones se hacen 3 órdenes de magnitud superiores a los valores del mínimo. La razón de esto es la oxidación del N_2O descrita antes y la facilidad de interconversión de NO_2 y NO . Las actividades humanas hacen que crezca el nivel del perfil "natural" de estos compuestos cerca del suelo y es además la causa de una gran variabilidad.

- SO_2 y SH_2 son moléculas cuyas abundancias naturales se ven muy afectadas por las actividades humanas, de ahí que sea difícil hablar de rasgos generales. Si bien su medida a nivel del suelo se realiza corrientemente, existen muy pocos datos sobre su distribución en altura.

Sólo algunos apuntes sobre otras moléculas no implicadas directamente en los

fenómenos de absorción y emisión de radiación en la banda de frecuencias que nos ocupa. Su importancia estriba en que también juegan un papel importante en los procesos químicos asociados al resto de moléculas.

- CO_2 : Su concentración es bastante alta en las capas bajas, típicamente 325 a 330 ppmv. Parece que a 25-30 km existe un máximo poco pronunciado con 340-350 ppmv en un modelo estándar promedio. Este máximo puede deberse a una intensa generación de éste gas por el proceso:



lo que puede estar confirmado indirectamente por el mínimo en la concentración de CO existente aproximadamente a esa altura.

- CH_4 : La principal característica de su distribución promedio es que es independiente de la altura hasta unos 12 km aproximadamente en latitudes medias con una concentración entre 1.50 y 1.55 ppm. Por encima la concentración baja, obteniéndose unas 0.30 ppmv a 50 km. Este descenso puede achacarse al incremento de la concentración del radical OH, del Cl y del átomo $\text{O}(^1\text{D})$ que destruyen las moléculas de metano mediante reacciones fotoquímicas.

1.3 Introducción a la química atmosférica

La química en la atmósfera es algo compleja. En ella intervienen gran cantidad de moléculas. Las actividades humanas han introducido nuevos compuestos químicos y, por ello, alterado en cierta medida el sistema en su conjunto. Podemos distinguir dos grandes bloques de reacciones: las que se llevan a cabo entre las diferentes especies que existen en la atmósfera y los procesos de fotodisociación inducidos por la luz solar que llega hasta ella. Este segundo bloque implica la existencia de sustanciales diferencias en la química de ciertas capas entre el día y la noche, lo cual tiene un claro reflejo en los perfiles de abundancia de algunas especies moleculares. Por citar algunos ejemplos, tenemos el modelo MOGUNTIA (*Crutzen et Zimmermann*, 1991 [23]) y también REPROBUS (*Lefèvre*, 1995 [47]). En el marco de éste trabajo adquiere una importancia especial el estudio de la química asociada a las tres especies oxigenadas O , O_2 y O_3 . El efecto que sobre las abundancias relativas de estas tres especies tiene la introducción de otros gases es un tema actual de investigación. La importancia del ozono en la determinación de la estructura física de la estratosfera

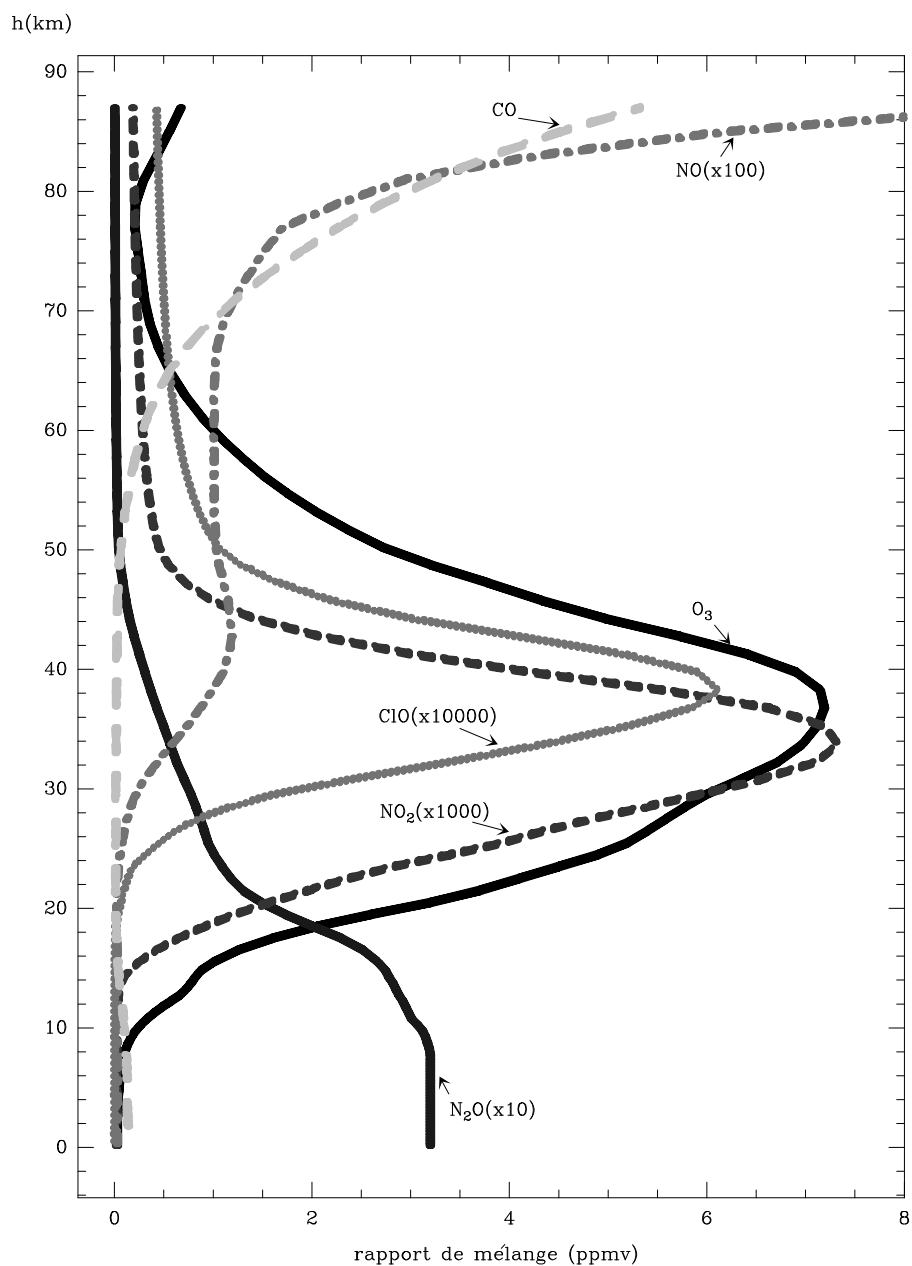


FIG. 1.3 - Perfiles estándar de abundancia de diferentes gases atmosféricos minoritarios dados por la atmósfera *U.S. Std. 1976* de latitudes intermedias en invierno.

y la mesosfera, así como su papel en la protección de la superficie terrestre contra la radiación ultravioleta ya fue puesto de relieve anteriormente.

La primera teoría sencilla sobre la química de las especies oxigenadas en la atmósfera terrestre se debe a Chapman (1930) [62]. Este introdujo cinco reacciones, entre ellas dos de fotodisociación de las especies O_2 y O_3 . Dichas reacciones son:



donde M denota un tercer cuerpo que interviene como catalizador. Las dos primeras reacciones están gobernadas por constantes de fotodisociación J_1 y J_2 , mientras que las otras tres poseen constantes de reacción que escribiremos como: k_1 , k_2 y k_3 . La primera reacción de fotodisociación (1.16) tiene lugar a $\lambda < 246$ nm, y la segunda (1.17) a $\lambda < 1140$ nm, aunque más fuertemente por debajo de 310 nm. En su trabajo original, Chapman introdujo una sexta reacción de dos moléculas de ozono:



que correspondería a la disociación térmica del O_3 y que fue posteriormente despreciada ya que no es importante en las condiciones atmosféricas. La reacción de absorción de radiación UV por O_3 (1.17) está seguida, generalmente, por una recombinación según (1.16), de forma que la energía de la radiación solar es convertida en calor que es el que gobierna el perfil de temperatura en la estratosfera. Las constantes de fotodisociación y de reacción señaladas en las reacciones están expresadas de forma que el número de moléculas formadas o destruidas por segundo vendrá dado por: $J_2 n_{O_2}$, $J_3 n_{O_3}$, $k_1 n_O^2 n_M$, $k_2 n_O n_{O_2} n_M$, $k_3 n_O n_{O_3}$. Dos de estas reacciones son

colisiones de tres cuerpos y, por tanto, el tercero (M) debe hacer satisfacer simultáneamente las conservaciones de energía y momento. En la estratosfera, la reacción gobernada por k_1 es muy lenta y puede despreciarse. Las reacciones descritas por k_2 y J_2 conducen a la formación de ozono, mientras que las correspondientes a J_3 y k_3 llevan a su destrucción. La ecuación del equilibrio fotoquímico de la concentración de ozono (en una atmósfera de O, O₂ y O₃) es:

$$n_3 = n_2 \left(\frac{J_2 k_2 n_M}{J_3 k_3} \right)^{1/2} \quad (1.22)$$

Los coeficientes de reacción J_2 y J_3 dependen de las condiciones físicas del medio, y, por tanto, varían con la altitud, lo que no es el caso de k_1 , k_2 y k_3 . A partir del comportamiento de los coeficientes de fotodisociación del oxígeno y el ozono con la altura se puede predecir un perfil para el O₃. La concordancia de los perfiles observados con los calculados mediante esta teoría simple no es muy buena ya que no se tienen en cuenta otras reacciones que involucran a otros componentes atmosféricos minoritarios (NO, NO₂, ClO, radicales como H, OH, HO₂, etc...). También influye la larga vida media de las moléculas de ozono en niveles por debajo de 30 km, que hace que el O₃ pueda ser redistribuido por movimientos atmosféricos. Las ecuaciones para expresar las variaciones de O, O₃ y O₂ en función de las densidades y las constantes de las reacciones de esta teoría simplificada son:

$$\frac{dn(O)}{dt} + n(O)[2k_1 n(M)n(O) + k_2 n(M)n(O_2) + k_3 n(O_3)] = 2n(O_2)J_2 + n(O_3)J_3 \quad (1.23)$$

$$\frac{dn(O_3)}{dt} + n(O_3)[J_3 + k_3 n(O)] = k_2 n(M)n(O_2)n(O) \quad (1.24)$$

$$\frac{dn(O_2)}{dt} + n(O_2)[J_2 + k_2 n(M)n(O)] = n(O_3)J_3 + k_1 n(M)n^2(O) + 2k_3 n(O)n(O_3) \quad (1.25)$$

donde $n(x)$ es la densidad numérica de x . De las dos primeras podemos escribir la siguiente ecuación para la evolución de O₃ y O:

$$\frac{dn(O_3)}{dt} + \frac{dn(O)}{dt} + 2k_1 n(M)n^2(O) + 2K_3 n(O_3)n(O) = 2n(O_2)J_2 \quad (1.26)$$

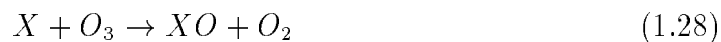
En esta expresión puede ser despreciado el término controlado por k_1 pues, como ya se comentó, la reacción asociada a él es muy lenta en las condiciones atmosféricas y por ello el término es muy poco importante. Esta ecuación servirá de base ya que se refiere a la evolución de las especies ozono y oxígeno atómico en una atmósfera puramente de oxigenada, a la que después se añadirá la acción de otros agentes minoritarios y contaminantes así como los fenómenos de transporte. La ecuación general que expresa las variaciones locales de las concentraciones de O y O_3 se debe modificar para dar:

$$\frac{\partial n(O_3)}{\partial t} + \frac{\partial n(O)}{\partial t} + \text{div}[n(O_3)w(O_3)] + \text{div}[n(O)w(O)] + 2k_1 n(M)n^2(O) + 2k_3 n(O)n(O_3) = 2n(O_2)J_2 \quad (1.27)$$

donde $w(O_3)$ y $w(O)$ son campos de velocidad para dar cuenta del transporte.

Gases minoritarios y contaminantes. Su acción sobre el Ozono

Hoy en día se sabe que ciertos gases atmosféricos, algunos de los cuales tienen un origen completamente artificial, pueden jugar un papel muy importante en la química de las especies oxigenadas. Se conoce la existencia de mecanismos de destrucción muy eficaces de las especies O y O_3 conocidos como "ciclos catalíticos" en los que la conversión de una especie química X a XO y viceversa, provoca dicha destrucción según el siguiente esquema:



en las que se recupera siempre la especie inicial X, que vuelve a desencadenar el ciclo. La consecuencia neta de cada ciclo es la desaparición de un átmo de oxígeno y una molécula de ozono. El fin se produce cuando los radicales que se han mencionado reaccionan con otras especies diferentes de O y O_3 . Queda fuera de los objetivos de éste trabajo el dar una visión completa y en detalle de esta química. Nos limitaremos a señalar que los principales pares de agentes catalíticos son los siguientes: (OH,HO₂), (NO,NO₂), (Cl, ClO), (Br, BrO). De entre estos, son los pares halogenados los que representan el gran peligro de alteración importante de los perfiles de

ozono, pues su presencia en la atmósfera es fuertemente no natural y ligada a las actividades humanas. El ciclo catalítico en el caso del cloro y el ozono es:

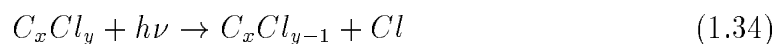
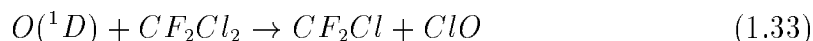


Hasta principios de los años 70 no se conocían fuentes importantes de cloro por lo que se consideraba que el ciclo (1.30, 1.31) no jugaba un papel importante en la estratosfera. Pero la introducción cada vez más importante de los clorofluorometanos de origen industrial y clorofluorocarbonos en general (CFCs) ha traído como consecuencia el aumentado significativo de la presencia en la estratosfera de los radicales Cl y ClO. Por ejemplo, está comprobado que productos como el triclorofluorometano (CFCl₃) y el diclorofluorometano (CF₂Cl₂) persisten bastante tiempo en la troposfera y de ahí pasan a la estratosfera donde pueden ser fotodisociados. También son de gran importancia el tetracloruro de carbono (CCl₄) y el cloruro de metilo (CH₃Cl) y una larga lista de CFCs de menor importancia. Existen reacciones muy importantes que ralentizan la destrucción del ozono, por ejemplo:



Existen otros procesos que desvían el Cl y ClO del ciclo de destrucción del ozono en los que participan compuestos como el radical HO₂ (sobre el ClO), CH₄, H₂CO, H₂O₂, HO₂ y H₂ (sobre el Cl para convertirlo en ClH). Por otro lado el radical OH reacciona con ClH devolviendo de nuevo parte de HCl a Cl.

Los diversos compuestos CFCs participan en varias reacciones que llevan a la liberación de las especies Cl, ClO. Las más importantes son la fotodisociación, que da lugar a la liberación de Cl, la reacción con el átomo de oxígeno excitado en su estado O(¹D), que libera ClO, y, por último, la reacción con OH, que da lugar a radicales que luego se disocian en Cl o ClO. Veamos algún ejemplo:



A principio de los años 80 se empezó a apuntar la posibilidad de una reducción en la cantidad de ozono de atmósfera debida al par (Cl,ClO). Parece claro que el gran impacto humano sobre la capa de ozono se debe a los compuestos químicos antes

citados, llamados genéricamente clorofluorocarbonos (CFCs), que son usados principalmente como propulsores en los aerosoles, en la producción de ciertos plásticos y productos de limpieza, y en sistemas de aire acondicionado y refrigeración. Los CFCs en la baja atmósfera (por debajo de 20 km) apenas son fotodisociados por la radiación UV solar, precisamente debido al apantallamiento que lleva a cabo el ozono sobre esta radiación. Por ello, una porción de ellos va llegando gradualmente a la capa de ozono donde la luz solar fotodisocia estas moléculas de forma que al final son liberados átomos de cloro que desencadenan los ciclos catalíticos. Se ha comprobado que éste problema es muy importante en las regiones polares (especialmente en la Antártida) al comienzo de la primavera local. Esto es debido a una activación especial del cloro.

El cloro en la atmósfera se puede encontrar en dos categorías de especies: las especies activas en la destrucción del ozono (Cl, ClO) y las especies inertes o “de reserva” (HCl, ClONO₂, HOCl, etc...). La solubilidad en el agua de estas últimas es diferente. En la baja estratosfera el cloro se encuentra esencialmente bajo las formas inertes. En las zonas polares, las nubes con partículas de hielo pueden formarse a esas alturas cuando la temperatura baja a menos de 195 K. Una química heterogénea tiene lugar en la superficie de las partículas que forman esas nubes (aerosoles) que modifican el balance de cloro. En el momento que la radiación solar alcanza esas regiones al principio de la primavera local, las especies activas del cloro son mayoritarias en ese vórtice polar. Éste tipo de nubes se conoce bajo el nombre de “Nubes Polares Estratosféricas”. El mecanismo funciona de tal forma que a veces la cantidad integrada de ozono se puede reducir a la mitad sobre un cierto lugar de observación (*Solomon et al.*, 1986 [83] y *Connor et al.*, 1987 [22])

Influencia de la dinámica atmosférica

Los movimientos atmosféricos a gran escala tienen cierta importancia en la redistribución de especies químicas en la atmósfera.

Cuando el vórtice polar se debilita hacia el final de la primavera, el aire pobre en ozono está menos confinado y puede mezclarse libremente con el aire de otras latitudes donde la concentración es mayor. La rotación terrestre y los movimientos de aire estratosférico favorecen ésta mezcla, que puede producir disminuciones débiles de las concentraciones locales de ozono. En el estudio de la formación y de la evolución del vórtice polar rico en Cl y ClO a una altura de ~ 20 km, las observaciones

espectroscópicas de líneas de ClO en el dominio de longitudes de onda milimétricas et submilimétricas pueden suponer una gran ayuda. Algunas medidas realizadas por instrumentos situados sobre el *Plateau de Bure* (Alpes Franceses), muestran que el vórtice debilitado podría alcanzar latitudes tan bajas como 45° (*Ricaud et al.*, 1996 [73]). Éste hecho justifica el proyecto europeo EMCOR para la construcción de un radiómetro dedicado a la observación del ClO y otras especies presentes en la estratosfera.

Peligros de la alteración del perfil de ozono

Las secciones eficaces de absorción de la radiación ultravioleta por el ozono presentadas en la figura 1.1 son suficientemente importantes como para asegurar que la absorción atmosférica puede ser eficaz en la banda 220-290 nm, lo que se conoce como UV-C, el ultravioleta solar más duro, aunque se produzca hasta un 50% de reducción del ozono estratosférico. Lo que sucede es que un descenso en las concentraciones de la alta estratosfera hace que el perfil de temperatura se altere produciéndose un descenso de la temperatura en la zona entre unos 40 y 50 km (estratopausa). Esta alteración provoca una redistribución del ozono en la baja estratosfera hacia altitudes más bajas. Esta redistribución del ozono afecta a la cantidad de éste gas a nivel de la superficie terrestre. Esto es otro problema ya que una alta concentración de ozono en el aire que se respira es asimismo nociva para la salud.

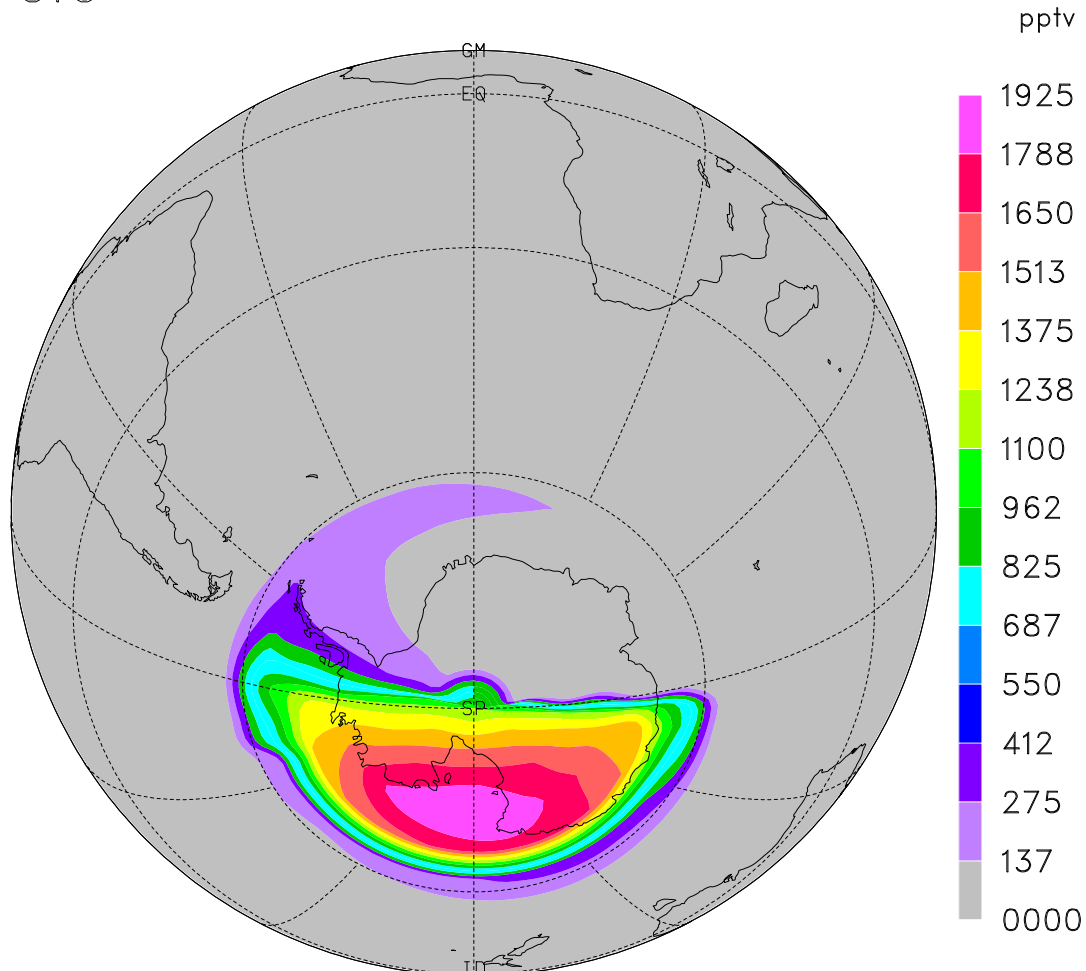
En el rango 290-320 nm, conocido como UV-B, la sección eficaz de absorción es más pequeña que la correspondiente al UV-C de forma que en esta región la cantidad normal de ozono sólo causa una absorción parcial, penetrando el resto hasta la superficie. Esto se debe a que las bandas de Chappuis y Hartley son más débiles en esa zona. Una disminución en la cantidad de ozono provocaría un aumento de la transmisión en esa banda.

Por último, en la banda UV-A (320-400 nm) donde la transmisión atmosférica ya es importante. Esta característica de la banda UV-A se ha aprovechado para el diseño del instrumento estándar Dobson para la medida de la cantidad total de ozono integrada en columna. La medida se basa en la comparación del flujo recibido a 311.45 nm (en la región UV-B) frente al de 332.4 nm.

Queda claro, pues, que el principal peligro hoy en día de la disminución de la cantidad de ozono se centra en el aumento del flujo que llega a la superficie en la banda UV-B sobre todo en las zonas polares al principio de la primavera local. La

figura 1.4 muestra una simulación de un vórtice polar en el que hay aire rico en ClO entre 20 et 22 km. La situación que se deriva en términos de ozono a ese mismo nivel se muestra en la figura 1.5.

ClO



Level 42.4 hPa

September 22, 0 U.T.

ARPEGE + REPROBUS (T-21)

FIG. 1.4 - Vórtice polar de aire rico en ClO en la baja estratosfera (nivel 42.4 mb) al comienzo de la primavera en el hemisferio Sur, según el modelo 4-D de química estratosférica REPROBUS (F. Lefèvre, Météo-France Toulouse [47]). Este fenómeno parece asociado a los procesos químicos que tienen lugar en las Nubes Estratosféricas Polares, donde ciertas moléculas que contienen el radical ClO son destruidas lo que tiene por consecuencia una liberación importante de dicho radical en la zona geográfica del vórtice.

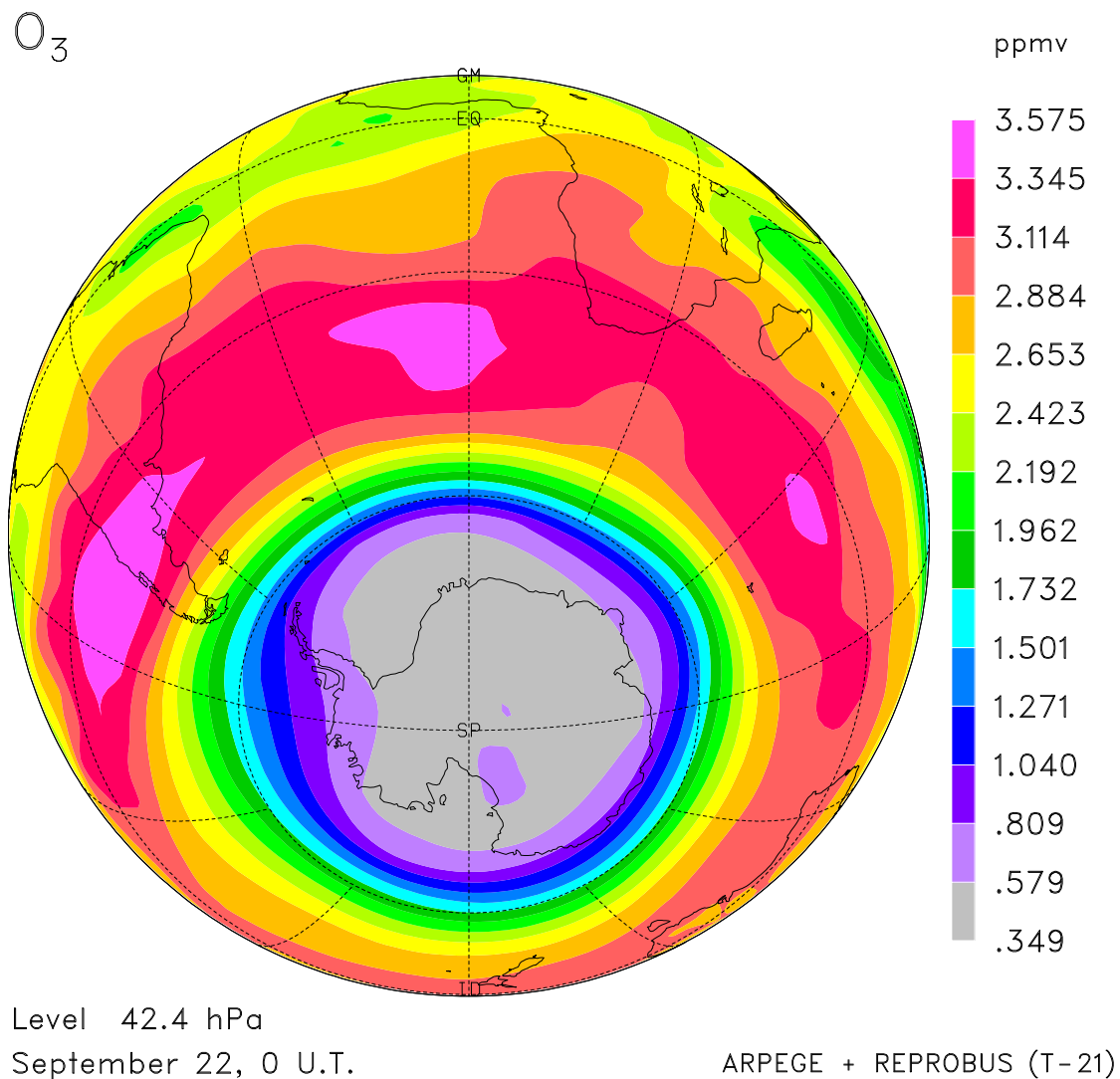


FIG. 1.5 - Cantidad de O_3 en el nivel 42.4 mb según el modelo REPROBUS en el mismo caso de la figura anterior. La fuerte disminución de O_3 a 20-22 km de altura en la región del vórtice polar, donde están confinadas las Nubes Estratosféricas Polares, se conoce bajo el popular nombre de "agujero de ozono".

Capítulo 2

Transporte de radiación en la atmósfera terrestre en el milimétrico y submilimétrico

2.1 Introducción

El objetivo del modelo que se presenta en éste capítulo es el de reproducir la emisión atmosférica en el intervalo 1 – 1000 GHz y ha sido desarrollada como herramienta para el trabajo experimental que expondré en los capítulos siguientes. La teoría de transferencia radiativa ha sido utilizada con las simplificaciones permitidas cuando se aplica a la atmósfera terrestre y al rango de longitudes de onda que nos ocupa. Dichas simplificaciones son, básicamente, la posibilidad de usar la hipótesis de equilibrio termodinámico local (ETL), que funciona bien en la atmósfera terrestre para una adecuada estratificación de ésta, y la aplicación de la aproximación de Rayleigh-Jeans a la ley de Planck para las temperaturas atmosféricas típicas (con ligeras correcciones a partir de ~ 250 GHz). La validez del equilibrio termodinámico local permite usar la ley de Boltzmann para el cálculo de poblaciones de los estados de energía moleculares y la ley de Maxwell para su distribución de velocidades. Los principales agentes de absorción y emisión de la atmósfera en esta región del espectro electromagnético se encuentran en la tabla 2.1 Se trata en la mayoría de los casos de transiciones rotacionales dentro del estado fundamental electrónico y vibracional.

Con el objetivo de comprender mejor la física de las fenómenos que se estudiarán en éste trabajo vamos a hacer un rápido repaso a la espectroscopía rotacional de las

principales moléculas atmosféricas.

Para comprender bien las bases físicas de la transferencia de radiación, esta debe ser abordada desde un enfoque microscópico. Esto es el objeto de cursos de física teórica por lo que no lo voy a repetir aquí. Me limitaré a plantear la ecuación básica de transferencia radiativa en ausencia de procesos de difusión, ya que estos carecen de importancia en el dominio de frecuencias en el que se centra este trabajo en el caso de no tratar ni las nubes ni los hidrometeoros (lluvia, nieve, etc...). Consideramos un cilindro de corte transversal $d\sigma$ y longitud ds en la atmósfera, y tratamos de ver la diferencia entre la cantidad de energía que entra por $d\sigma$ y sale, tras recorrer ds en un tiempo dt , por un ángulo sólido dw en el intervalo de frecuencias $[\nu, \nu + d\nu]$. Supondremos que la radiación entra con una intensidad específica $I(\vec{r}, \vec{n}, \nu)$ y sale con $I(\vec{r} + \vec{n}ds, \vec{n}, \nu)$. Se definen entonces unos coeficientes macroscópicos ϵ_ν y κ_ν que dan cuenta de las absorciones y emisiones que se han producido de forma que toda la energía emitida dentro del cilindro diferencial antes citado será:

$$\epsilon_\nu dwd\nu ds d\sigma \quad (2.1)$$

y la absorbida:

$$\kappa_\nu I(\vec{r}, \vec{n}, \nu) dwd\nu ds d\sigma \quad (2.2)$$

Las unidades de los coeficientes κ_ν y ϵ_ν son cm^{-1} , lo que significa que tienen en cuenta la densidad de partículas absorbentes o emisoras. Si hacemos la diferencia entre emisión y absorción, esta debe verificar:

$$I(\vec{r} + \vec{n}ds, \vec{n}, \nu) - I(\vec{r}, \vec{n}, \nu) = \epsilon_\nu dwd\nu ds d\sigma - \kappa_\nu I(\vec{r}, \vec{n}, \nu) dwd\nu ds d\sigma \quad (2.3)$$

$$I(\vec{r} + \vec{n}ds, \vec{n}, \nu) - I(\vec{r}, \vec{n}, \nu) = d\sigma dwd\nu ds \frac{dI(\vec{r}, \vec{n}, \nu)}{ds} \quad (2.4)$$

por tanto:

$$\frac{dI(\vec{r}, \vec{n}, \nu)}{ds} = \epsilon_\nu - \kappa_\nu I(\vec{r}, \vec{n}, \nu) \quad (2.5)$$

o bien:

$$\frac{dI(\vec{r}, \vec{n}, \nu)}{ds} = -\kappa_\nu \left[I(\vec{r}, \vec{n}, \nu) + \frac{\epsilon_\nu}{\kappa_\nu} \right] \quad (2.6)$$

Molécule	μ (Debyes)	Rapport de mélange max. dans la stratosphère	\log_{10} $r_{Max}\mu^2/Q_{rot}$
O ₂	0.0186	$\sim 2.1 \cdot 10^{-1}$	~ -6.4
H ₂ O	1.855	$\sim 5.0 \cdot 10^{-6}$	~ -6.8
¹⁸ OO	0.0186	$\sim 8.6 \cdot 10^{-4}$	~ -9.1
O ₃	0.5337	$\sim 7.0 \cdot 10^{-6}$	~ -9.1
H ₂ ¹⁸ O	1.85	$\sim 1.0 \cdot 10^{-8}$	~ -9.5
HF	1.826	$\sim 4.0 \cdot 10^{-10}$	~ -9.9
¹⁷ OO	0.0186	$\sim 1.5 \cdot 10^{-4}$	~ -10.1
H ₂ ¹⁷ O	1.85	$\sim 1.9 \cdot 10^{-9}$	~ -10.2
HDO	1.732	$\sim 1.5 \cdot 10^{-9}$	~ -10.3
OH	1.667	$\sim 1.0 \cdot 10^{-9}$	~ -10.3
H ³⁵ Cl	1.109	$\sim 1.5 \cdot 10^{-9}$	~ -10.5
O ₂ ($\nu = 1$)	0.0186	$\sim 1.0 \cdot 10^{-5}$	~ -10.7
CO	0.1098	$\sim 1.0 \cdot 10^{-7}$	~ -10.8
N ₂ O	0.1608	$\sim 2.0 \cdot 10^{-7}$	~ -10.9
O ₃ ($\nu_2 = 1$)	0.5261	$\sim 7.9 \cdot 10^{-8}$	~ -11.0
H ³⁷ Cl	1.109	$\sim 0.5 \cdot 10^{-9}$	~ -11.0
O ₂ (¹ Δ)	0.0186	$\sim 3.0 \cdot 10^{-6}$	~ -11.0
HCN	2.984	$\sim 1.0 \cdot 10^{-10}$	~ -11.1
¹⁶ O	0.0186	$\sim 1.0 \cdot 10^{-7}$	~ -11.3
H ₂ O ($\nu_2 = 1$)	1.855	$\sim 1.9 \cdot 10^{-10}$	~ -11.3
³⁵ ClO	1.298	$\sim 3.0 \cdot 10^{-10}$	~ -11.7
¹⁸ OOO	0.532	$\sim 2.9 \cdot 10^{-8}$	~ -11.8
O ¹⁸ OO	0.532	$\sim 1.4 \cdot 10^{-8}$	~ -11.8
O ₃ ($\nu_3 = 1$)	0.532	$\sim 9.0 \cdot 10^{-9}$	~ -12.0
HNO ₃	1.99	$\sim 5.0 \cdot 10^{-9}$	~ -12.0
³⁷ ClO	1.239	$\sim 1.0 \cdot 10^{-10}$	~ -12.1
O ₃ ($\nu_1 = 1$)	0.532	$\sim 9.0 \cdot 10^{-9}$	~ -12.2
NO	0.1587	$\sim 1.0 \cdot 10^{-8}$	~ -12.5

TAB. 2.1 - Principales moléculas en el espectro milimétrico y submilimétrico de la atmósfera terrestre (si no se indica el número isotópico se considera que se trata la especie principal). Las estimaciones de la tercera y cuarta columnas provienen de *Waters*, (1993) [95].

El cociente entre los coeficientes de absorción y emisión (ϵ_ν/κ_ν) se conoce como **función fuente (S)** y, como puede demostrarse fácilmente, en la hipótesis de ETL, es igual a la función de Planck correspondiente a la temperatura física local.

Integración de la ecuación de transporte

El modelo pretende simular la transferencia de radiación en la atmósfera terrestre para predecir tanto medidas en Tierra como desde satélite. Se trata, pues, de considerar una geometría esférica general en la que se pueden introducir incluso correcciones que tengan en cuenta el aplastamiento polar del globo terrestre. Dividimos entonces la atmósfera en capas en las que consideramos constantes las magnitudes físicas T y P, así como las abundancias moleculares. Para una de estas capas de espesor ds se define la profundidad óptica diferencial (magnitud adimensional) como sigue:

$$d\tau_\nu = \kappa_\nu ds \quad (2.7)$$

(el coeficiente de absorción tal como ha sido definido tiene dimensiones [L^{-1}]) con lo que la ecuación queda así:

$$\frac{dI_\nu(s)}{d\tau_\nu} = -I_\nu(s) + S_\nu(s) \quad (2.8)$$

donde s es la posición en el camino de propagación. En la hipótesis de ETL (número de procesos fotocollisionales mucho mayor que número de procesos difusivos), podemos sustituir la función fuente S por la función de Planck $B_\nu(T)$ a la temperatura física de la capa:

$$\frac{dI_\nu(s')}{d\tau_\nu} = -I_\nu(s') + B_\nu(T) \quad (2.9)$$

cuya solución se obtiene fácilmente multiplicando por $e^{-\tau_\nu}$ ambos miembros de la ecuación:

$$\frac{d}{d\tau_\nu}(I_\nu e^{-\tau_\nu}) = B_\nu e^{-\tau_\nu} \quad (2.10)$$

e integrando. La solución a la salida de la capa (s_1) se puede expresar como sigue en función de la intensidad entrante [$I_\nu(0)$]:

$$I_\nu(s) = I_\nu(0)e^{-\tau_\nu(0,s)} + \int_0^s B_\nu(T)e^{-\tau_\nu(s',s)}\kappa_\nu(s')ds' \quad (2.11)$$

donde $\kappa_\nu(s')$ es el coeficiente de absorción macroscópico a frecuencia ν en la posición s' y $\tau_\nu(s', s_1)$ es la opacidad acumulada entre los puntos s' y s_1 . A baja frecuencia, en el límite $\frac{h\nu}{KT} \ll 1$, se puede utilizar la aproximación de Rayleigh-Jeans y escribir la función de Planck como sigue:

$$B_\nu(T) = \frac{2kT\nu^2}{c^2} \quad (2.12)$$

(k es la constante de Boltzmann y c la velocidad de la luz). Queremos hacer notar que $\frac{h\nu}{k} = 4.8$ K a 100 GHz, mucho menor que las temperaturas atmosféricas típicas. Es corriente entonces sustituir la intensidad $I_\nu(s)$ por una temperatura equivalente de brillo T_B ya que para un cuerpo negro en el límite R-J el brillo es proporcional a la temperatura. Esa T_B es entonces tal que: $T_B(s) = (c^2/2K\nu^2)I_\nu(s)$. Entonces podremos expresar la solución (2.11) como sigue:

$$T_B(s) = T_B(0)e^{-\tau_\nu(0,s)} + \int_0^s T(s')e^{-\tau_\nu(s',s)}\kappa_\nu(s')ds' \quad (2.13)$$

La anterior aproximación requiere correcciones a partir de ~ 250 GHz. Por ejemplo, para una temperatura de 250 K y una frecuencia de 300 GHz, $\frac{h\nu}{KT} = 0.06$. Pero siempre se pueden expresar los resultados en términos de una temperatura de brillo equivalente calculada a partir de las verdaderas intensidades:

$$\frac{2kT_B(s)\nu^2}{c^2} = I_\nu(0)e^{-\tau_\nu(0,s)} + \int_0^s B_\nu(T)e^{-\tau_\nu(s',s)}\kappa_\nu(s')ds' \quad (2.14)$$

o bien:

$$kT_B(s) = \frac{h\nu}{e^{h\nu/KT_0} - 1}e^{-\tau_\nu(0,s)} + \int_0^s \frac{h\nu}{e^{h\nu/KT} - 1}e^{-\tau_\nu(s',s)}\kappa_\nu(s')ds' \quad (2.15)$$

Desde un punto de vista práctico la cantidad total de energía detectada se suele dar en forma de temperatura de antena. En éste observable interviene la distribución espacial de temperatura de brillo convolucionada con el diagrama de radiación de la antena, que expresa la sensibilidad de ésta en función de la dirección. Intervienen asimismo otras características técnicas como son el número de bandas del receptor, sus anchuras en frecuencia y contribuciones relativas a la señal medida, etc...

Para el cálculo de τ_ν en un cierto camino de propagación debemos calcular κ_ν capa a capa, para lo cual hemos de tener en cuenta todas las especies moleculares

que absorben, su distribución de abundancia a lo largo del camino, así como la de presión y temperatura. τ_ν viene por tanto dado por:

$$\tau_\nu = \sum_{\text{capas}} \left(\sum_{\text{molec.}} \kappa_{\nu j} \right)_i \cdot s_i \quad (2.16)$$

donde s_i es el camino recorrido en la capa i , mientras el subíndice j se refiere a cada especie molecular. Se supone en la última expresión la no existencia de solapamiento así como la ausencia de procesos de difusión de la radiación. A partir de la opacidad total a lo largo de un determinado camino (τ_ν), se define la **transmisión** a través de éste como: $e^{-\tau_\nu}$.

La solución a la ecuación de transferencia de radiación expresada en la forma (2.13) es para un camino directo, es decir, en el que la radiación ha seguido una propagación libre sin reflexión en superficie alguna que sea en parte absorbente. Si el sistema colector no apunta a ninguna fuente exterior que tenga una emisión importante a la frecuencia de trabajo, la señal de fondo [$T_B(0)$] corresponderá al fondo cósmico de radiación que es esencialmente un cuerpo negro a 2.73 K. Su contribución no debe calcularse directamente mediante la aproximación de Rayleigh-Jeans, ya que si bien dicha aproximación se puede justificar en nuestra región de frecuencias para las temperaturas reinantes en la atmósfera (ligeros problemas conforme nos acercamos a 1000 GHz), esta pierde su validez para objetos a bajas temperaturas. Así, para $\nu=100$ GHz y $T=2.7$ K, obtenemos $\frac{h\nu}{kT}=1.8$.

Si el telescopio está embarcado en un satélite y apunta hacia el nódido, $T_B(0)$ será mucho más compleja (ecuación 4.1).

2.2 Parámetros moleculares. Coef. de absorción

En esta sección vamos a pasar a ver con cierto detalle los cálculos que debemos efectuar para conocer el coeficiente de absorción a la frecuencia ν asociado a una altura z en la atmósfera [$\kappa_\nu(z)$].

Existe, en primer lugar, una "contribución resonante" debida a las líneas rotacionales de los diferentes componentes atmosféricos. La expresión general del coeficiente de absorción para una transición entre dos niveles que llamaremos 0 (inferior) y 1 (superior) es la siguiente:

$$(\kappa_\nu)_{01} = \frac{8\pi^3 N\nu}{3hcQ} [e^{-E_l/KT} - e^{-E_u/KT}] g_l \langle \mu_{01}^{\vec{}} \rangle^2 f(\nu, \nu_{01}) \quad (2.17)$$

donde: N es el número de moléculas absorbentes por unidad de volumen, g_0 es el peso estadístico del nivel inferior, $\langle \mu_{01}^{\vec{}} \rangle$ es el elemento de matriz del momento dipolar de la transición, que se define así a partir de las funciones de onda de los estados inicial y final de la transición: $\langle 0 | \vec{\mu} | 1 \rangle = \int \psi_0^* \vec{\mu} \psi_1$, $f(\nu, \nu_{01})$ es una función que describe la forma de la línea, ν_{01} es la frecuencia de resonancia de esta, dada por la relación: $\nu_{01} = (E_1 - E_0)/h$, y Q es la función de partición.

Desde un punto de vista espectroscópico, en la atmósfera sólo existen dos tipos de moléculas con espectro rotacional: diatómicas sin centro de simetría (salvo $^{16}\text{O}_2$ que sí lo tiene), y rotores asimétricos. Vamos a repasar rápidamente como se calculan los parámetros que intervienen en la ecuación 2.17, para cada uno de estos tipos morfológicos de moléculas.

2.2.1 Cálculo de las frecuencias de transición

Se trata, básicamente, de encontrar los niveles de energía rotacionales y las reglas de selección que operan. Las moléculas atmosféricas interesantes en el dominio de las microondas son mayoritariamente diatómicas o triatómicas (lineales o no), según se comprueba en la tabla 2.1. El grupo que engloba las moléculas diatómicas y lineales es bastante sencillo de tratar, mientras que el caso de los trompos asimétricos tiene cierta complejidad.

Los niveles de energía se calculan a partir de los autovalores del hamiltoniano de rotación. Así, para las moléculas diatómicas o lineales se tiene que el momento de inercia respecto al eje de la molécula es nulo (I_z) mientras que los otros momentos principales de inercia son iguales ($I_x=I_y=I$). De esta forma, en el caso de que la rotación fuese rígida se tendría el siguiente hamiltoniano (J_x y J_y son los momentos angulares en torno a los ejes x e y):

$$H_r = \frac{1}{2I}(J_x^2 + J_y^2) = \frac{J^2}{2I} \quad (2.18)$$

de forma que los niveles de energía son:

$$E_J = hBJ(J+1)$$

donde \mathbf{B} ($= \frac{h}{8\pi^2 I}$) es la llamada **constante rotacional** y tiene unidades de frecuencia. Esto, junto a las reglas de selección de las transiciones dipolares eléctricas ($\Delta J = \pm 1$; con $J = 0, 1, 2, \dots$), nos hace ver que el espectro rotacional está formado por una serie de líneas a frecuencias $\nu = 2B, 4B, 6B, \dots$

Sin embargo, debido a la existencia de la vibración de los núcleos, estas moléculas no se pueden tratar exactamente con la aproximación sencilla del rotor rígido si se quiere obtener cierto nivel de exactitud en la predicción de las frecuencias. Además, la propia rotación da lugar a una distorsión centrífuga. A la hora de estudiar la emisión rotacional de la molécula debe tenerse en cuenta la posible aportación de momento angular por el estado en que se encuentra la nube electrónica de esta. Así, las moléculas en estado $^1\Sigma$ (sin momento angular electrónico) se estudian introduciendo un potencial de interacción. Se plantea entonces una ecuación para calcular las energías vibracionales y rotacionales cuya solución dará cuenta de los efectos de la distorsión centrífuga e interacción vibración-rotación (ver [34]). Tras el correspondiente cálculo perturbativo, las frecuencias de las transiciones rotacionales se pueden expresar así:

$$\nu = 2B_v(J+1) - 4D_v(J+1)^3 + H_v(J+1)^3[(J+2)^2 - J^2] + \dots \quad (2.19)$$

donde B_v es la nueva constante rotacional que incluye correcciones por interacción rotación-vibración. Por su parte D_v y H_v , representan los efectos de primer y segundo orden de la distorsión centrífuga, corregidos ya de la interacción rotación-vibración. La corrección H_v es muy pequeña y suele ser despreciada en muchas ocasiones. Al igual que B , todas las constantes tienen unidades de frecuencia. Los subíndices v denotan diferentes estados vibracionales. En el caso de moléculas donde la nube electrónica posee un espín resultante habrá un nuevo acoplamiento a añadir al ya existente entre vibración y rotación. Tenemos entonces tres momentos angulares: el orbital de la nube electrónica (\vec{L}), el rotacional puro (\vec{O}) y el de espín (\vec{S}). La suma de tres momentos angulares conduce a un nuevo hamiltoniano y, por tanto, a un esquema diferente de niveles de energía. La importancia de la contribución de cada momento angular a la energía total es diferente para cada molécula. En general el acoplo de momentos angulares se trata de una forma perturbativa, lo que se conoce bajo el nombre de acoplamiento de Hund. O_2 , por ejemplo responde a un caso (b) de Hund, mientras que ClO es casi un caso (a).

En el caso de moléculas de tipo rotor asimétrico (los tres momentos principales

de inercia son diferentes) el hamiltoniano de rotación correspondiente al caso rígido es, sencillamente:

$$H_r = AJ_a^2 + BJ_b^2 + CJ_c^2 \quad (2.20)$$

donde $A = h^2/(8\pi^2 I_a)$, $B = h^2/(8\pi^2 I_b)$, $C = h^2/(8\pi^2 I_c)$ son las **constantes rotacionales** y los subíndices a , b y c denotan los ejes principales de inercia. Abordar el rotor distorsionado y la interacción vibración-rotación es aquí bastante más difícil que en el caso de molécula lineal. Existen en la literatura un gran número de hamiltonianos propuestos para dar cuenta de estos efectos. Nosotros vamos a usar aquí el Hamiltoniano de Watson [97]:

$$\begin{aligned} H_{vv} = & E_v + [A^v - \frac{1}{2}(B^v + C^v)]J_z^2 + \frac{1}{2}(B^v + C^v)J^2 + \frac{1}{2}(B^v - C^v)J_{xy}^2 \\ & - \Delta_K^v J_z^4 - \Delta_{JK}^v J_z J^2 - \Delta_J^v (J^2)^2 - \delta_K^v (J_z^2 J_{xy}^2 + J_{xy}^2 J_z^2) \\ & - 2\delta_J^v J_{xy}^2 J^2 + H_K^v J_z^6 + H_{KJ}^v J_z^4 J^2 + H_{JK}^v J_z^2 (J^2)^2 + H_J^v (J^2)^3 \\ & + h_k^v (J_z^4 J_{xy}^2 + J_{xy}^2 J_z^2) + h_{JK}^v (J_z^2 J_{xy}^2 + J_{xy}^2 J_z^2) J^2 + 2h_J^v J_{xy}^2 (J^2)^2 \\ & L_K^v J_z^8 + L_{KKJ}^v J_z^6 J^2 + L_{JK}^v J_z^4 (J^2)^2 + L_{JJK}^v J_z^2 (J^2)^3 \\ & l_K^v (J_z^6 J_{xy}^2 + J_{xy}^2 J_z^6) + l_{JK}^v (J_z^2 J_{xy}^2 + J_{xy}^2 J_z^2) (J^2)^2 + P_K^v J_z^{10} + P_{KKJ}^v J_z^8 J^2 \\ & + p_K^v (J_z^8 J_{xy}^2 + J_{xy}^2 J_z^8) + Q_K^v J_z^{12} + R_K^v J_z^{14} \end{aligned} \quad (2.21)$$

donde el superíndice v da constancia de que las constantes del hamiltoniano son distintas dependiendo del estado vibracional. Como antes, estas constantes vienen dadas en unidades de frecuencia. Las tablas 2.5, 2.12 y 2.14 dan los valores de esas constantes para todas las moléculas de tipo rotor asimétrico incluidas en el modelo.

2.2.2 Cálculo de la función de partición

La función de partición rotacional es la suma sobre los niveles rotacionales del producto de las degeneraciones de cada estado por el factor de Boltzmann asociado ($e^{-E_i/KT}$). En las moléculas lineales o diatómicas, por ejemplo, los niveles de energía rotacional son $\sim hBJ(J+1)$ con términos perturbativos descritos por $-hBJ[(J+1)]^2$ y otros de menor importancia (ver ecuación 2.19). El peor caso entre las moléculas presentes en nuestro modelo es CO, donde D es ya cinco órdenes de magnitud menor que B (en todos los demás casos la relación es aún más favorable a B). Se puede entonces hacer la aproximación siguiente, en el caso que no haya espín nuclear, ni espín de la nube electrónica y que se considere una molécula heteronuclear (la degeneración de los niveles de energía es entonces $2J+1$):

$$Q_r \cong \sum_J (2J+1) \exp\left[-\frac{hBJ(J+1)}{KT}\right] \quad (2.22)$$

Para temperaturas muy bajas (medio interestelar) sólo unos pocos términos juegan. Para el dominio de temperaturas en la atmósfera (hasta ~ 120 km) es más fácil utilizar el desarrollo asintótico siguiente [*Herzberg* [39] (1950)]:

$$Q_r = \frac{kT}{hB} + \frac{1}{3} + \frac{1}{15} \frac{hB}{kT} + \frac{4}{315} (hB/KT)^2 + \dots \quad (2.23)$$

El número de términos a considerar en ésta ecuación depende de la razón kT/hB . Por ejemplo, para CO y una temperatura de 250 K: $\frac{kT}{hB} = 90.42$. Éste cociente todavía es más grande en el caso de N_2O . El primer término de ésta serie corresponde por otro lado al resultado “clásico” de la función de partición cuando en la ecuación 2.22 se sustituye la suma por una integral.

La aproximación que acabamos de describir se puede aplicar a la función de partición rotacional de cada nivel vibracional. La expresión supone, como habíamos señalado, que la molécula no tiene centro de simetría. Éste no es el caso de la molécula $^{16}O_2$ para la que la mitad de los niveles de energía desaparecen respecto al caso heteronuclear (a causa de la simetría de la función de onda en coordenadas nucleares). Además, la nube electrónica $^3\Sigma$ de ésta molécula introduce una degeneración suplementaria de $2S+1=3$ sobre los niveles de energía a causa de la existencia de un espín electrónico $S=1$. La función de partición para $^{16}O_2$ es, por tanto, $Q_r \simeq 3kT/2hB$; para $^{16}O^{18}O$, que es una molécula heteronuclear, tenemos $Q_r \simeq 3kT/hB$. La tabla 2.2 nos da las funciones rotacionales de partición para ciertas moléculas diatómicas

Molécula	vibr.	Q_{rot}	Molécula	vibr.	Q_{rot}
N ₂ O	v=0	1.65873971T	¹⁶ O ₂	v=0	0.72516037T
¹⁷ O ¹⁶ O	v=0	0.99623158T	¹⁸ O ¹⁶ O	v=0	1.02371944T
¹⁶ O ₂	v=1	0.73322460T	CO	v=0	0.3615187262T

TAB. 2.2 - Función de partición para moléculas diatómicas y lineales consideradas en el modelo de transferencia radiativa.

o lineales importantes en la atmósfera.

Para el rotor rotor asimétrico puede obtenerse otra expresión aproximada en la que entran en juego las tres constantes rotacionales A, B y C, asociadas a los tres momentos principales de inercia. También interviene el número de simetría asociado al grupo puntual al que pertenece la molécula (σ):

$$Q_r = \left(\frac{5.34 \cdot 10^{-6}}{\sigma} \right) \left(\frac{T^3}{ABC} \right)^{1/2} \quad (2.24)$$

donde A, B, C van expresadas en MHz y T en Kelvin. La tabla 2.3 muestra los cálculos sobre la función de partición rotacional de diferentes moléculas de éste tipo importantes en la atmósfera.

2.2.3 Cálculo de las fuerzas de línea

En espectroscopía molecular se suele usar la fuerza de línea (λ_g) para expresar la intensidad intrínseca de la transición. Dicha magnitud se relaciona con el elemento de matriz del momento dipolar de la transición de la siguiente forma:

$$|\langle J, \tau | \mu | J', \tau' \rangle|^2 = \frac{\mu_g^2 \lambda_g(J, \tau, J', \tau')}{(2J+1)} \quad (2.25)$$

donde g representa la dirección espacial del momento dipolar y τ son otros números cuánticos (asociados o no a la rotación) aparte de J. De forma general deberíamos sustituir el factor 2J+1 por el peso estadístico del nivel, que puede ser descrito por varios números cuánticos de rotación. Esto permite sustituir $g_l \cdot |\langle J, \tau | \mu | J', \tau' \rangle|^2$ por $\mu_g^2 \lambda_g(J, \tau, J', \tau')$ en la ecuación 2.17 (λ_g no tiene dimensiones).

Molécula	estado vibr.	$(ABC)^{1/2}$ (ctes. en MHz.)	σ	Q_{rot}
$^{16}O_3$	(0,0,0)	4102510.115	2	$0.649728455T^{3/2}$
$^{16}O^{16}O^{17}O$	(0,0,0)	3965200.559	1	$1.344455353T^{3/2}$
$^{16}O^{17}O^{16}O$	(0,0,0)	4012440.914	2	$0.664313224T^{3/2}$
$^{16}O^{16}O^{18}O$	(0,0,0)	3842383.972	1	$1.387429043T^{3/2}$
$^{16}O^{18}O^{16}O$	(0,0,0)	3931045.320	2	$0.678068387T^{3/2}$
$^{16}O_3$	(0,1,0)	4115266.165	2	$0.6477144985T^{3/2}$
$^{16}O_3$	(1,0,0)	4081168.336	2	$0.6531261T^{3/2}$
$^{16}O_3$	(0,0,1)	4034147.908	1	$1.321477358T^{3/2}$
$^{32}S^{16}O_2$	(0,0,0)	2349137.558	2	$1.134679215T^{3/2}$
$H_2^{16}O$	(0,0,0)	318134909.6	2	$8.37857613 \cdot 10^{-3}T^{3/2}$
$H_2^{17}O$	(0,0,0)	316714374.3	2	$8.41615593 \cdot 10^{-3}T^{3/2}$
$H_2^{18}O$	(0,0,0)	315452842.3	2	$8.4498131 \cdot 10^{-3}T^{3/2}$
HDO	(0,0,0)	191810441.7	1	$2.779324771 \cdot 10^{-2}T^{3/2}$
NO_2	(0,0,0)	6195385.4184	2	$0.430965924 T^{3/2}$
SH_2	(0,0,0)	109117079.2437	2	$0.2446913003T^{3/2}$

TAB. 2.3 - Función de partición para los rotores asimétricos incluidos en ATM.

2.2.4 Perfil de las líneas atmosféricas en el rango 1-1000 GHz

Una característica muy importante de las líneas de emisión rotacional de las moléculas es que presentan en la troposfera y estratosfera un perfil dominado por el efecto de las colisiones entre moléculas. Para estudiar éste tipo de ensanchamiento de las líneas espectrales se utiliza a veces la llamada **aproximación de impacto** según la cual la duración de la colisión es despreciable frente al periodo asociado a la radiación emitida de forma que en el estudio se ignora la evolución temporal de las partículas emisoras. La duración de las colisiones se puede estimar dividiendo la raíz cuadrada de la sección eficaz asociada al ensanchamiento por presión entre la velocidad molecular media. Para casi todas las moléculas a temperaturas atmosféricas éste tiempo es del orden de 10^{-12} s, de forma que la aproximación de impacto ve restringida su validez como mucho a unos cientos de GHz. Así Rosenkranz [76] señala la necesidad de abordar el estudio del ensanchamiento por presión en líneas rotacionales combinando la aproximación de impacto con su opuesta que es la aproximación cuasiestática. Esto parece fundamental a la hora de comprender la emisión en

la parte lejana de las alas de líneas del vapor de agua según varios trabajos teóricos (ver un compendio de ellos en *Gamache et al.*, 1994 [31], y consultar igualmente la referencia del mismo autor en 1985 [30]), y los resultados experimentales (Bauer et al., 1987, 1989 et 1993 [6] [7] [8], Godon et al., 1990 [33]). El perfil más usado para describir el ensanchamiento por presión es el de Van Vleck-Weisskopf con las modificaciones propuestas por Rosenkranz. La forma general, para líneas aisladas es:

$$f(\nu, \nu_{lu}) = \frac{\nu \Delta\nu}{\pi \nu_{lu}} \left[\frac{1}{(\Delta\nu)^2 + (\nu - \nu_{lu})^2} + \frac{1}{(\Delta\nu)^2 + (\nu + \nu_{lu})^2} \right] \quad (2.26)$$

expresado en unidades de frecuencia⁻¹ para ser compatible con la ecuación 2.17. Rosenkranz [76] con sus hipótesis más rigurosas deduce una forma corregida de dicho perfil en la que incluye efectos de acoplo entre líneas próximas. Esto se aplica al conjunto de líneas del oxígeno alrededor de 60 GHz (ver cuadro 2.9). De forma simple podemos decir que el ensanchamiento colisional es similar al que se produce en la frecuencia de un oscilador armónico por colisiones sobre éste. En principio, dichas colisiones pueden afectar a su amplitud, fase y orientación. En el caso de suponer que todos los cambios de fase son igualmente probables y que no hay colisiones que aporten momento, se obtiene justamente el perfil de Van Vleck-Weisskopf. Este perfil ajusta aceptablemente las observaciones de bastantes líneas atmosféricas (véase por ejemplo *Ulaby, Moore and Fung*, 1986 [90] o *Waters*, 1970 [94]) originadas en regiones donde la presión es suficientemente alta pero plantea ciertos problemas cuando se aplica a las alas de líneas muy fuertes. Las anchuras colisionales verifican una ley de aditividad respecto a las distintas partículas perturbadoras (véase Connor *et al.*, 1986 [21], *Gamache et al.*, 1985 [31], *Bouazza et al.*, 1993 [14]). Por ello podemos escribir el ensanchamiento colisional de una resonancia frecuencia $\nu \rightarrow l$ de la especie molecular X como sigue:

$$\Delta\nu_{lu}(X - airsec, T, P) = 0.79\Delta\nu_{lu}(X - N_2, T, P) + 0.21\Delta\nu_{lu}(X - O_2, T, P) \quad (2.27)$$

Dichos coeficientes son función de T y P ya que esas dos variables determinan una cierta probabilidad estadística de encuentro entre moléculas en un sistema, lo que sirve para establecer una distribución estadística de las perturbaciones sobre los niveles de energía de una especie. La dependencia en la presión es lineal ya que la probabilidad de colisión es directamente proporcional a ésta variable termodinámica. Pero por otro lado la duración de la colisión depende la velocidad y por tanto de

la temperatura. La dependencia de la sección eficaz de colisión en la temperatura queda caracterizada por el tipo de fuerza involucrada. así si es de la forma r^{-n} puede verse que:

$$\Delta\nu \propto T^{-\frac{n+1}{2(n-1)}} \quad (2.28)$$

Las fuerzas intermoleculares tienen n típicamente entre 3 y 6. El ensanchamiento en función de T y P se expresa corrientemente como sigue:

$$\Delta\nu = \Delta\nu_0 \frac{P}{P_0} \left(\frac{T_0}{T}\right)^x \quad (2.29)$$

Como sabemos, la presión atmosférica disminuye de forma aproximadamente exponencial por eso una línea de un gas atmosférico aporta informaciones de la abundancia del gas a diferentes alturas. No obstante, a la hora de deconvolucionar una línea para obtener un perfil de abundancia del gas hay que tener en cuenta también el efecto del perfil de temperatura. Diferentes trabajos sobre la determinación de los coeficientes de ensanchamiento colisional de los diferentes gases atmosféricos (colisiones con N_2 et O_2 , aunque para H_2O , las colisiones H_2O-H_2O se toman también en cuenta) han sido consultados (ver cuadro 2.6) con el objetivo de crear la base de datos utilizada en ATM. Por ejemplo, para el ozono se usan coeficientes obtenidos de las referencias: Bouazza *et al.*, (1993) [14], Rosenkranz (1993) [77]) y HITRAN *data base* (1992) [40].

A presiones suficientemente bajas el ensanchamiento Doppler se hace competitivo con el colisional. Si calculamos la distribución de frecuencias a que da lugar una muestra de partículas que originalmente radían todas a la misma frecuencia, pero que están sujetas a una distribución maxwelliana de velocidades, obtendremos el perfil Doppler de una la línea:

$$f(\nu, \nu_{lu}) = \frac{1}{\Delta\nu_D} \left(\frac{\ln 2}{\pi}\right)^{1/2} \exp\left[-\ln 2 \left(\frac{\nu - \nu_{lu}}{\Delta\nu_D}\right)^2\right] \quad (2.30)$$

con

$$\Delta\nu_D = \frac{\nu_{lu}}{c} \left(\frac{2KT}{m} \ln 2\right)^{1/2} = 3.58 \cdot 10^{-7} \nu_{lu} \left(\frac{T}{M}\right)^{1/2} \quad (2.31)$$

donde M es el peso molecular en g/mol de masa. Como ejemplo diremos que a $T=273$ K la anchura Doppler de la línea de 22 GHz del vapor de agua es de 0.03 MHz, 0.06 MHz para las de la banda a 60 GHz de O_2 y 0.09 MHz para una línea de ozono

ESPECIE	EST. VIBR.	ABUNDANCIA RELATIVA
$H_2^{16}O$	(0,0,0)	1
$H_2^{17}O$	(0,0,0)	$3.749 \cdot 10^{-4}$
$H_2^{18}O$	(0,0,0)	$2.044 \cdot 10^{-3}$
HDO	(0,0,0)	$1.492 \cdot 10^{-4}$
$H_2^{16}O$	(0,1,0) deg=1	$4.9 \cdot 10^{-5}$ (a 300 K)

TAB. 2.4 - Abundancias relativas de las distintas especies del vapor de agua en la atmósfera terrestre.

a 100 GHz aproximadamente. Dichas anchuras dominan a las del ensanchamiento colisional en alturas por encima de 70-80 Km. En la zona de transición ($\sim 50-70$ km) el perfil será una convolución de los tipos citados.

La presentación general del modelo de transferencia radiativa en la atmósfera terrestre para frecuencias entre 1-1000 GHz se termina aquí. Volveremos a lo largo de éste trabajo sobre algunos desarrollos teóricos específicos a ciertas situaciones experimentales en los capítulos 3, 4 y 5. Las tablas 2.2, 2.3, 2.5, 2.6, 2.8, 2.9, 2.11, 2.12, 2.13 y 2.14 muestran gran parte de los parámetros espectroscópicos de los diferentes gases atmosféricos. Un tratamiento más en profundidad de la espectroscopía de ciertas moléculas especialmente importantes se realiza en los apartados siguientes.

2.2.5 Algunos casos particulares

El oxígeno molecular

El espectro rotacional de la molécula de oxígeno responde a un acoplamiento de momentos angulares según un caso (b) de Hund.

$$\vec{J} = \vec{N} + \vec{S} \quad (2.32)$$

donde \vec{S} es el operador de espín de la nube electrónica y \vec{N} es la suma de \vec{L} (operador proyección sobre el eje de la molécula del momento angular orbital de la nube electrónica \vec{L} y de \vec{O} (momento angular de rotación de la molécula). \vec{J} es, por tanto, el momento angular total. La molécula de $^{16}O_2$ no tiene momento dipolar eléctrico

Grupo puntual de simetría: C_{2v} ($\sigma=2$)					
Primeros modos normales de vibración: (1,0,0) a 3693.8 cm^{-1} , (0,1,0) a 1614.5 cm^{-1} , (0,0,1) a 3801.7 cm^{-1} , Isospín de los componentes atómicos: H $\rightarrow 1/2$, $^{16}\text{O} \rightarrow 0$, $^{18}\text{O} \rightarrow 0$, I=1 ($g=3$) es el orto- $^{16,18}\text{H}_2\text{O}$ y I=0 ($g=1$) es el $^{16,18}\text{H}_2\text{O}$ (no conectables) D $\rightarrow 0$, $^{17}\text{O} \rightarrow 1/2$, HDO y $^{17}\text{H}_2\text{O}$ tienen estructura hiperfina $\mu = 1.88 \cdot 10^{-18} \text{ esu} \cdot \text{cm}$					
Constantes Rotacionales en MHz (Ham. de Watson)					
Cte.	$H_2^{16}\text{O}$	$H_2^{17}\text{O}$	$H_2^{18}\text{O}$	$H_2^{16}\text{O}$ (0,1,0)	HDO
A	835839.876	830282.838	825366.08	933204.456	701931.502
B	435346.811	435341.662	435331	440322.2413	272912.599
C	278140.481	277510.396	276950.46	273684.4922	192055.245
Δ_J	37.58280	37.44401	37.2938	41.83214021	10.83749
Δ_{JK}	-173.361	-171.5584	-170.204	-228.001581	34.20729
Δ_K	974.2470	965.7665	959.6441	1725.497463	377.07828
δ_J	15.21950	15.22675	15.2431	17.32500615	3.647126
δ_K	39.6461	36.2566	31.463	112.9078355	63.08750
H_J	$1.6284 \cdot 10^{-2}$	$1.48878 \cdot 10^{-2}$	$1.412 \cdot 10^{-2}$	$1.8347298 \cdot 10^{-2}$	$1.1275 \cdot 10^{-3}$
H_{JK}	$-5.2534 \cdot 10^{-2}$	$-2.10405 \cdot 10^{-2}$		$8.6400186 \cdot 10^{-2}$	$7.3435 \cdot 10^{-2}$
H_{KJ}	-0.542802	-0.481054	-0.45260	-1.34768016	-0.2740667
H_K	3.84436	4.409069	5.08511	10.59700385	1.465159
h_J	$8.1611 \cdot 10^{-3}$	$7.844745 \cdot 10^{-3}$	$7.8937 \cdot 10^{-3}$	$8.729057 \cdot 10^{-3}$	$6.5461 \cdot 10^{-4}$
h_{JK}	$-2.5607 \cdot 10^{-2}$	$-2.11625 \cdot 10^{-2}$	$-1.716 \cdot 10^{-2}$		$3.0963 \cdot 10^{-2}$
h_K	0.94784	$5.4855 \cdot 10^{-1}$		2.526141189	0.554951
L_J	$-9.270 \cdot 10^{-6}$				$2.1939 \cdot 10^{-6}$
L_{KKJ}	$8.5898 \cdot 10^{-3}$	$5.1476 \cdot 10^{-3}$		$2.425021193 \cdot 10^{-3}$	$2.86575 \cdot 10^{-3}$
L_K	$-2.50931 \cdot 10^{-2}$	$-5.966754 \cdot 10^{-2}$	$-9.59337 \cdot 10^{-2}$	$-6.571150887 \cdot 10^{-2}$	$-7.557072 \cdot 10^{-3}$
L_{JK}	$-2.0367 \cdot 10^{-3}$	$1.53235 \cdot 10^{-3}$			$-7.45685 \cdot 10^{-3}$
L_{JJK}	$5.087 \cdot 10^{-5}$				
l_K	$-1.0791 \cdot 10^{-2}$	$4.982 \cdot 10^{-3}$	$2.351 \cdot 10^{-2}$	$-1.291206117 \cdot 10^{-2}$	$-5.69461 \cdot 10^{-3}$
P_K	$1.2065 \cdot 10^{-4}$	$7.50542 \cdot 10^{-4}$	$1.449 \cdot 10^{-3}$	$0.31760013 \cdot 10^{-3}$	$1.90459 \cdot 10^{-5}$
p_K	$5.5019 \cdot 10^{-5}$	$1.88015 \cdot 10^{-5}$		$2.67234997 \cdot 10^{-5}$	$1.4074 \cdot 10^{-5}$

TAB. 2.5 - Parámetros espectroscópicos de las distintas especies de la molécula de agua (las constantes rotacionales corresponden al hamiltoniano de Watson, ecuación 2.21).

por ser totalmente simétrica. Su estado fundamental $^3\Sigma_g^-$ posee dos electrones desapareados los cuales confieren a la molécula un momento magnético dipolar. De esta manera, las transiciones dipolares magnéticas (M1) están permitidas y dan lugar a líneas espectrales en el rango de las microondas. El espín electrónico es $s=1$, luego, atendiendo a la reglas cuánticas para sumar momentos angulares, el número cuántico J puede tomar los valores siguientes para un N dado:

$$J = N - 1, N, N + 1 \quad (2.33)$$

Las reglas de selección de las transiciones dipolares magnéticas (M1) son:

$$\Delta J = 0, \pm 1 \quad \Delta N = 0, \pm 2 \quad (2.34)$$

La molécula de oxígeno tiene un espín nuclear total $I=0$, lo que significa que la función de onda nuclear debe ser simétrica en coordenadas nucleares. La función de onda electrónica ${}^3\Sigma_g^-$ es antisimétrica en esas mismas coordenadas y por ello es necesario que la función de onda ligada a \vec{N} sea antisimétrica lo que impone al número cuántico N de ser impar:

$$N = 1, 3, 5, \dots \quad (2.35)$$

Estas exigencias no son necesarias para las especies isotópicas ${}^{17}\text{O}{}^{16}\text{O}$ y ${}^{18}\text{O}{}^{16}\text{O}$ al ser los núcleos distinguibles. Los cambios relativos en la orientación del espín electrónico respecto a la de la rotación molecular dan lugar a una banda de líneas espectrales espín-rotación a 60 GHz y una línea simple a unos 119 GHz ($\Delta J = \pm 1, \Delta N = 0$). Las transiciones con $\Delta N = 2$ producen líneas espectrales a frecuencias de 368 GHz y mayores. Además, el campo magnético terrestre rompe la degeneración de las líneas citadas dando lugar a una subestructura Zeeman debido a la interacción del momento magnético dipolar permanente de esta molécula con el campo magnético terrestre.

Monóxido de cloro

ClO es un radical que tiene un interés particular en la atmósfera debido a su papel en la destrucción del ozono estratosférico (ver capítulo 1). Esto justifica un estudio con más profundidad de su espectroscopía rotacional. Su estado fundamental electrónico (${}^2\Pi$) tiene un momento angular orbital (\vec{L}) y un espín electrónico total (\vec{S}) no nulos a los que hay que añadir el momento de rotación de la molécula (\vec{O}). Para ClO, los operadores cuánticos (\vec{L}), (\vec{O}) y (\vec{S}) se suman según un caso (a) de Hund para dar un momento angular total (\vec{J}). Las dos especies isotópicas ${}^{35}\text{ClO}$ y ${}^{37}\text{ClO}$ tienen un espín nuclear $3/2$ que es responsable de una estructura hiperfina que divide los niveles J en 4 sub-niveles descritos por un número cuántico F : $F=J-3/2$, $F=J-1/2$, $J+1/2$, $J+3/2$. Las reglas de selección dipolares eléctricas ($\Delta F=0, \pm 1$) explican la existencia de 9 transiciones entre dos niveles J vecinos. Sobre estas transiciones existe, además, un desdoblamiento Λ . El momento angular orbital electrónico

en el estado $^2\Pi$ interacciona asimismo con un campo magnético externo y produce un efecto Zeeman. Para ClO en el seno del campo magnético terrestre éste efecto es del orden de 1 MHz para las transiciones $J=5/2 \rightarrow 3/2$, y decrece con J .

El vapor de agua

El cálculo de la absorción producida por el vapor de agua en la región milimétrica y submilimétrica presenta ciertas particularidades que resumimos rápidamente aquí. Por ejemplo, varios investigadores encuentran que los valores experimentales se ajustan mejor a los calculados usando los perfiles de línea calculados en la aproximación cuasiestática (ver, por ejemplo, Bauer et al., 1993 [8]). Sin embargo, existe una discrepancia en las alas de las líneas en el sentido de que los valores calculados son menores que los observados y la dependencia con la temperatura no está bien explicada. Los diferentes modelos de que disponemos sobre los coeficientes de absorción del vapor de agua proponen diversas formulaciones para ajustar el continuo. Por ejemplo, Liebe *et al* [53] proponen una línea ficticia del vapor de agua a 1780 GHz y ajustan su anchura para corregir el continuo hasta 1000 GHz. La diferencia entre la absorción obtenida teóricamente mediante la suma de la absorción debida a líneas espectrales individuales, y los resultados experimentales, tiene las siguientes características:

- Decrece a medida que aumenta la temperatura.
- Es más fuerte en el caso de tener vapor de agua puro que en el de una mezcla como la existente en la atmósfera.
- La diferencia entre teoría y experimentación es más fuerte en las regiones espectrales menos absorbentes.

Alguna de las mecanismos propuestas para su explicación son:

- Contribución de alas de líneas muy fuertes de H_2O cuya frecuencia de resonancia está por encima de 1 THz.
- Existencia de dímeros (asociación de dos moléculas de H_2O mediante enlaces débiles de hidrógeno) y polímeros en un estado estable y que emiten en el continuo. Esto explicaría el comportamiento de éste continuo frente a la temperatura pues, en efecto, la formación de agregados aumenta con la concentración y disminuye con la temperatura. Sin embargo, la ley de variación de la absorción con la temperatura es incompatible cuantitativamente con la ley de formación de dímeros a partir de la

$J_{K_+} K_-$	$J_{K_+} K_-$	ν (GHz)	g_l	ϕ_{ul}^2	E (cm ⁻¹)	$\Delta\nu_{ul}^0$ (GHz)	$\Delta\nu_{ul}$ (H ₂ O)	x
6 ₁ 6	5 ₂ 3	22.2351	3	0.057	446.56	2.85	13.68	0.626
3 ₁ 3	2 ₂ 0	183.3101	1	0.102	136.16	2.68	14.49	0.649
10 ₂ 9	9 ₃ 6	321.2256	3	0.089	1283.02	2.30	12.04	0.420
5 ₁ 5	4 ₂ 2	325.1529	1	0.091	315.78	3.03	15.21	0.619
4 ₁ 4	3 ₂ 1	380.1974	3	0.123	212.16	3.19	15.84	0.360
10 ₃ 7	11 ₂ 10	390.1400	1	0.068	1525.31	2.11	11.42	0.330
7 ₅ 3	6 ₆ 0	437.3467	1	0.088	1045.03	1.50	7.94	0.290
6 ₄ 3	5 ₅ 0	439.1508	3	0.010	742.11	1.94	10.44	0.360
7 ₅ 2	6 ₆ 1	443.0183	3	0.088	1045.11	1.51	8.13	0.332
4 ₂ 3	3 ₃ 0	448.0011	3	0.132	285.42	2.47	14.24	0.510
6 ₄ 2	5 ₅ 1	470.8889	1	0.102	742.07	1.89	10.56	0.380
5 ₃ 3	4 ₄ 0	474.6891	1	0.118	488.14	2.07	11.95	0.380
6 ₂ 4	7 ₁ 7	488.4911	1	0.036	586.48	2.58	14.77	0.570
1 ₁ 0	1 ₀ 1	556.9360	3	1.500	23.79	3.33	14.66	0.645
5 ₃ 2	4 ₄ 1	620.7008	3	0.122	488.11	2.28	12.78	0.600
2 ₁ 1	2 ₀ 2	752.0332	1	2.073	70.09	3.13	13.93	0.690
4 ₂ 2	3 ₃ 1	916.6200	1	0.161	285.22	2.59	14.06	0.676
5 ₂ 4	4 ₃ 1	970.3100	1	0.262	383.84	2.48	14.16	0.560
2 ₀ 2	1 ₁ 1	987.9400	1	0.756	37.14	3.09	15.20	0.660

TAB. 2.6 - Parámetros espectroscópicos complementarios de líneas de la especie isotópica principal del vapor de agua (H₂¹⁶O) entre 1 y 1000 GHz. La dependencia de la anchura de ésta línea colisional con la temperatura (exponente x) se refiere a la colisiones de las moléculas de vapor de agua con O₂ y N₂. La dependencia en temperatura del ensanchamiento colisional a causa de choques H₂O-H₂O es lineal.

energía de ligadura del puente de hidrógeno.

◦

2.3 Algoritmo de transferencia radiativa directa (1-1000 GHz): ATM

ATM es el nombre del programa en lenguaje FORTRAN que hemos desarrollado para realizar la simulación del efecto de la atmósfera sobre la transmisión de ondas electromagnéticas hasta 1000 GHz de frecuencia para servir de ayuda a los trabajos abordados en ésta tesis y previstos para el futuro. El programa nació en 1985 [17]

ESPECIE	EST. VIBR.	ABUNDANCIA RELATIVA
$^{16}O_2$	$V = 0$	1
$^{16}O^{17}O$	$V = 0$	$7.498 \cdot 10^{-4}$
$^{16}O^{18}O$	$V = 0$	$4.088 \cdot 10^{-3}$
$^{16}O_2$	$V = 1$	$5.124 \cdot 10^{-4}$ (a 300 K)

TAB. 2.7 - Abundancia relativa de las distintas especies de oxígeno molecular presentes en la atmósfera

Hamiltoniano: $H = B \cdot N^2 + \gamma N \cdot S + \frac{2}{3}\lambda(3S_z^2 - S^2)$				
S: operador espín				
N: momento angular (orbital + rotación)				
Dist. centrífuga: $B = B_v + D_v N^2$, $\gamma = \gamma_v + \gamma_{D_v} N^2$, $\lambda = \lambda_v + \lambda_{D_v} N^2$				
Reglas de selección (M1): $\Delta N = 0$, $\Delta J = \pm 1$; et $\Delta N = \pm 2$, $\Delta J = 0, \pm 1$.				
subestructura Zeeman; $I(^{16}O^{17}O) = 1/2 \implies$ estructura hiperfina				
$\mu_B = 2\mu_{B\ddot{h}r} = 1.854 \cdot 10^{-2}$ Debyes				
Constantes Rotationnelles (MHz)				
constante	$^{16}O_2$ v=0	$^{16}O^{17}O$ v=0	$^{16}O^{18}O$ v=0	$^{16}O_2$ v=1
B_v	43100.430	41830.6	40707.403(20)	42626.398
D_v	0.1436	0.137	-0.13036(147)	0.1489
λ_v	59501.3489	59500.09	59499.076(41)	59646.079
λ_{D_v}	0.058305	0.0575	0.05334(82)	0.063257
γ_v	-252.5875	-245.114	-238.491(8)	-253.193
γ_{D_v}	$-2.4522 \cdot 10^{-4}$	$-2.4 \cdot 10^{-4}$	$-5.52(142) \cdot 10^{-4}$	$-2.5241 \cdot 10^{-4}$

TAB. 2.8 - Constantes rotacionales de las especies isotópicas del oxígeno molecular en el estado electrónico $^3\Sigma$. Véanse los parámetros individuales de cada línea en el cuadro 2.9.

ante la necesidad de estimar los efectos atmosféricos en las observaciones astrofísicas a longitudes de onda milimétricas en diferentes telescopios europeos.

La base del programa es la de calcular la opacidad a cada frecuencia para las diferentes capas a partir de los valores de la temperatura, presión y abundancias de las moléculas. El programa puede utilizar diferentes catálogos de atmósferas estándar (ver cuadro 2.15). También es posible introducir otros perfiles atmosféricos bajo un

N_J	N'_J	$\nu_c(\text{GHz})$	F_{osc}	$E_{inf}(K)$	N_J	N'_J	$\nu_c(\text{GHz})$	F_{osc}	$E_{inf}(K)$
1 ₁	1 ₂	56.26477	0.245E+01	4.0	1 ₁	1 ₀	118.75033	0.200E+01	1.0
3 ₃	3 ₄	58.44658	0.671E+01	24.6	3 ₃	3 ₂	62.48626	0.654E+01	24.4
5 ₅	5 ₆	59.59098	0.108E+02	61.8	5 ₅	5 ₄	60.30606	0.107E+02	61.8
7 ₇	7 ₈	60.43478	0.149E+02	115.6	7 ₇	7 ₆	59.16421	0.148E+02	115.7
9 ₉	9 ₁₀	61.15056	0.189E+02	185.9	9 ₉	9 ₈	58.32388	0.189E+02	186.0
11 ₁₁	11 ₁₂	61.80016	0.229E+02	272.7	11 ₁₁	11 ₁₀	57.61249	0.229E+02	272.9
13 ₁₃	13 ₁₄	62.41123	0.269E+02	376.1	13 ₁₃	13 ₁₂	56.96822	0.269E+02	376.4
15 ₁₅	15 ₁₆	62.99799	0.309E+02	496.0	15 ₁₅	15 ₁₄	56.36340	0.309E+02	496.3
17 ₁₇	17 ₁₈	63.56854	0.349E+02	632.3	17 ₁₇	17 ₁₆	55.78381	0.349E+02	632.7
19 ₁₉	19 ₂₀	64.12778	0.389E+02	785.2	19 ₁₉	19 ₁₈	55.22137	0.389E+02	785.6
21 ₂₁	21 ₂₂	64.67892	0.429E+02	954.4	21 ₂₁	21 ₂₀	54.67115	0.429E+02	954.9
23 ₂₃	23 ₂₄	65.22407	0.469E+02	1140.1	23 ₂₃	23 ₂₂	54.12997	0.469E+02	1140.6
25 ₂₅	25 ₂₆	65.76476	0.510E+02	1342.1	25 ₂₅	25 ₂₄	53.59569	0.510E+02	1342.7
27 ₂₇	27 ₂₈	66.30205	0.550E+02	1560.5	27 ₂₇	27 ₂₆	53.06681	0.550E+02	1561.2
29 ₂₉	29 ₃₀	66.83675	0.590E+02	1795.2	29 ₂₉	29 ₂₈	52.54225	0.590E+02	1795.9
31 ₃₁	31 ₃₂	67.36947	0.630E+02	2046.2	31 ₃₁	31 ₃₀	52.02120	0.630E+02	2046.9
33 ₃₃	33 ₃₄	67.90068	0.670E+02	2313.3	33 ₃₃	33 ₃₂	51.50306	0.670E+02	2314.1
3 ₂	1 ₂	424.76321	0.392E+00	4.0	3 ₃	1 ₂	487.24947	0.128E+00	4.0
3 ₂	1 ₁	368.49844	0.480E-01	6.7	5 ₄	3 ₄	773.83990	0.213E+00	24.7
5 ₅	3 ₄	834.14596	0.630E-01	24.7	5 ₄	3 ₃	715.39332	0.400E-01	27.5

TAB. 2.9 - Raies rotationelles de la molécule $^{16}\text{O}_2$. Les raies $\Delta N=0$ se placent autour de 60 GHz (à l'exception de la transition "fondamentale" à 118.75 GHz que nous appelons ainsi car le niveau d'énergie d'arrivée est le plus bas possible, car pour des raisons de symétrie le niveau $N_J=0_1$ n'existe pas).

ESPECIE	EST. VIBR.	ABUNDANCIA RELATIVA
$^{16}\text{O}_3$	(0,0,0)	1
$^{16}\text{O}^{16}\text{O}^{17}\text{O}$	(0,0,0)	$7.498 \cdot 10^{-4}$
$^{16}\text{O}^{16}\text{O}^{18}\text{O}$	(0,0,0)	$4.088 \cdot 10^{-3}$
$^{16}\text{O}^{17}\text{O}^{16}\text{O}$	(0,0,0)	$3.749 \cdot 10^{-4}$
$^{16}\text{O}^{18}\text{O}^{16}\text{O}$	(0,0,0)	$2.044 \cdot 10^{-3}$
$^{16}\text{O}_3$	(0,1,0) deg=1	$1.8 \cdot 10^{-2}$ (a 250 K)
$^{16}\text{O}_3$	(1,0,0) deg=1	$1.74 \cdot 10^{-3}$ (a 250 K)
$^{16}\text{O}_3$	(0,0,1) deg=1	$2.48 \cdot 10^{-3}$ (a 250 K)

TAB. 2.10 - Abundancia relativa de las diferentes especies de O_3 en la atmósfera terrestre.

Grupo puntual de simetría: C_{2v} ($\sigma=2$)				
Primer modo normal de vibración: (0,1,0) a 701 cm^{-1} , (0,0,1) a 1042 cm^{-1}				
Isospín de los componentes atómicos: $^{16,18}\text{O} \rightarrow 0 \Rightarrow$ ausencia de estados orto y para $^{17}\text{O} \rightarrow 1/2 \Rightarrow$ estructura hiperfina difícilmente resoluble $\mu=0.53\text{Debyes}$				
Constantes Rotacionales en MHz (Ham. de Watson)				
CNSTE.	$^{16}\text{O}_3$	$^{16}\text{O}^{18}\text{O}^{16}\text{O}$	$^{16}\text{O}^{17}\text{O}^{16}\text{O}$	$^{16}\text{O}_3(0,1,0)$
A	106536.236	98646.687	102351.3064	108137.9111
B	13349.2548	13352.7323	13351.0788	13311.43708
C	11834.3613	11731.7677	11781.6889	11765.02730
Δ_J	1.3618E-02	1.3424E-02	1.3090E-02	1.3701E-02
Δ_{JK}	-5.534E-02	-3.955E-02	-5.7453E-02	-5.3676E-02
Δ_K	6.3454	5.4242	5.8726	6.9769
δ_J	2.0924E-03	2.1856E-03	1.99395E-03	2.07638E-03
δ_K	9.692E-02	9.337E-02	11.2146E-02	11.65777E-02
H_J	1.1E-08	0.98E-08		0.880E-08
H_{JK}	-0.18E-06	-0.09E-06		7.3123E-08
H_{KJ}	-55.1E-06	-47.5E-06	-76.862E-06	-63.013E-06
H_K	1.178E-03	0.939E-03	1.1675E-03	1.4463E-03
h_J	5.3E-09	5.6E-09		5.579E-09
h_K	67E-06	65E-06	95.691E-06	95.382E-06
h_{JK}	-0.18E-06	-0.29E-06		-0.344E-06

TAB. 2.11 - Constantes rotacionales de las especies simétricas de ozono consideradas en éste trabajo, obtenidas de las siguientes referencias: *Depannemaecker et al.* (1977) [24], *Rinsland et al.* (1991) [74] et *Monnanteuil et al.* (1978) [60].

Especies asimétricas: ($\sigma=2$)				
Primeros modos asimétricos de vibración: (1,0,0) a 1103 cm^{-1} , (0,0,1) a 1042 cm^{-1}				
Constantes Rotacionales en MHz (Ham. de Watson)				
CNSTE	$^{16}\text{O}^{16}\text{O}^{17}\text{O}$	$^{16}\text{O}^{16}\text{O}^{18}\text{O}$	$^{16}\text{O}_3$ (1,0,0)	$^{16}\text{O}_3$ (0,0,1)
A	105491.0155	104573.161	106626.9961	104943.939
B	12951.33587	12591.5331	13272.9054	13229.72232
C	11508.01126	11212.5057	11768.89921	11721.83339
Δ_J	1.2888E-02	1.2198E-02	1.3835E-02	1.3691E-02
Δ_{JK}	-5.7082E-02	-5.702E-02	-6.4663E-02	-5.0896E-02
Δ_K	6.2176	6.1129	6.5203	6.2379
δ_J	1.8894E-03	1.8175E-03	1.97496E-03	2.27696E-03
δ_K	11.6952E-02	8.752E-02	10.6636E-02	8.8766E-02
H_K		0.71E-08	1.27E-08	0.5109E-08
H_{JK}		-0.09E-06	-0.936E-06	4.7787E-08
H_{KJ}	-46.571E-06	-51.3E-06	-61.186E-06	-54.032E-06
H_K	1.0468E-03	1.103E-03	1.2560E-03	1.1703E-06
h_J		4.8E-09		7.060E-09
h_K	138.47E-06	69E-06		74.420E-06
h_{JK}		-0.34E-06		-0.342E-06

TAB. 2.12 - Constantes rotacionales de las especies asimétricas de ozono más importantes en la atmósfera terrestre, obtenidas a partir de las mismas referencias que el cuadro precedente. Los estados $^{16}\text{O}_3$ (1,0,0) et (0,0,1) (vibracionalmente excitados) tienen una interacción de Coriolis que se debe tomar en cuenta al calcular las frecuencias de resonancia (Flaud et al., 1987 [27]).

Molécula	B (MHz)	D (MHz)	H (MHz)	μ (Debyes)
N_2O	12561.634821	5.280861E-03	0.000857E-06	0.161
CO	57635.970	0.18358		0.112

TAB. 2.13 - Constantes rotacionales de las moléculas atmosféricas lineales cuyo estado fundamental electrónico posee momento angular nulo (ver hamiltoniano en ecuación 2.19). Las constantes han sido obtenidas de *Andreev et al.* (1976) [2] para N_2O y de *Gordy y Cook* [34] para CO .

CONSTANTE	SO_2	SH_2	NO_2
A	60778.5522	310180.2460	239905.4163
B	10318.0722	270884.0551	13002.262123
C	8799.7023	141705.8851	12304.88866
Δ_J	$6.610013 \cdot 10^{-3}$	49.85131	$9.03390 \cdot 10^{-3}$
Δ_{JK}	$-116.9588 \cdot 10^{-3}$	-159.69567	-0.590390
Δ_K	2.5904328	111.85057	80.9439
δ_J	$1.701045 \cdot 10^{-3}$	-6.01909	$9.303288 \cdot 10^{-4}$
δ_K	$25.3531 \cdot 10^{-3}$	262.1654	0.125
H_J	$1.0645(63) \cdot 10^{-8}$	$2.81317 \cdot 10^{-2}$	$1.618 \cdot 10^{-8}$
H_{JK}	$2.522(260) \cdot 10^{-8}$	$-2.28282 \cdot 10^{-1}$	
H_{KJ}	$-19.3691 \cdot 10^{-6}$	$4.594148 \cdot 10^{-1}$	$-7.26165 \cdot 10^{-4}$
H_K	$3.71799 \cdot 10^{-4}$	$-2.76462 \cdot 10^{-1}$	0.0977138
h_J	$5.4326 \cdot 10^{-9}$	$-5.8411 \cdot 10^{-3}$	
h_{JK}	$-1.09 \cdot 10^{-8}$	$2.42811 \cdot 10^{-1}$	
h_K	$16.673 \cdot 10^{-6}$	2.870195	
L_{KKJ}	$4.1512 \cdot 10^{-9}$	$2.19929 \cdot 10^{-3}$	
L_K	$-8.1384 \cdot 10^{-8}$	$-2.34287 \cdot 10^{-3}$	$1.712 \cdot 10^{-4}$
l_{KJ}		$-5.32671 \cdot 10^{-3}$	
l_K		$-4.1164750 \cdot 10^{-2}$	
P_{KJ}		$-3.040037 \cdot 10^{-4}$	
P_{KKJ}		$8.034210 \cdot 10^{-4}$	
P_K	$1.704 \cdot 10^{-11}$	$-5.152582 \cdot 10^{-4}$	
p_{JK}		$-1.2260 \cdot 10^{-5}$	
p_{KKJ}		$1.29628 \cdot 10^{-4}$	
μ_b	1.634 Debyes	0.9745 Debyes	0.3161 Debyes

TAB. 2.14 - Constantes rotacionales en MHz de otras moléculas de tipo rotor asimétrico que también tienen interés atmosférico (*Helminger et al. (1985) [37]* para SO_2 , *Monnanteuil et al. (1989) [61]* para NO_2 y *Lane et al. (1985) [45]* para SH_2). La molécula de NO_2 presenta una estructura hiperfina. Las constantes están expresadas en MHz.

Atmósferas estandar en ATM			
Nombre	Características	Procedencia	Uso
U.S. Stnd. 62	* 45°N verano e invierno * sólo perfiles P y T * 0 a 90 km	Referencia Num. [91]	Transferencia radiativa en general
U.S. Stnd. 76	* 6 tipos: TROPICAL a SUBÁRTICA invierno * Perfiles P, T, H ₂ O y 27 gases menores. * 0 a 120 km	Referencia Num. [92]	Transferencia radiativa en general
REPROBUS	* parrilla 16(long.)x12(lat.)x x12 meses * T, P et 40 gases * 0 à ~65 km	Referencia Num. [47]	Cálculos liés au proyecto EMCOR
Campañas de observaciones que puede tratar ATM			
Nombre	Características	Procedencia	Uso
EVA	T para 40 niveles TOVS (zona europea)	CMS (Lannion)	Comparaciones con medidas MSU
ITRA	T-P medidos por globo-sonda	CMS (Lannion)	Comp. con medidas sobre tierra
RAOB	T para 40 niveles TOVS H ₂ O hasta 300 mb cobertura mundial	NOAA (USA)	Comparaciones con medidas SSM/T1 et SSM/T2

TAB. 2.15 - Catálogos atmosféricos y perfiles experimentales para los que ATM posee adaptaciones especiales. Cualquier otro perfil se puede introducir bajo un formato específico.

cierto formato. Además, podemos usar perfiles provenientes de diversas campañas de observaciones que se han sido tratadas en algunos trabajos que se presentan en ésta tesis (véase el capítulo 4 y el cuadro 2.15).

Otros parámetros, necesarios para efectuar la transferencia radiativa, se pueden introducir de forma interactiva.

2.3.1 Ejemplos de cálculos con ATM

Una vez desarrollado éste modelo, se han realizado una serie de trabajos sobre el estudio de la atmósfera en ondas milimétricas y submilimétricas para los cuales el programa es una herramienta fundamental. Los próximos capítulos estarán dedicado por completo a la descripción de estos trabajos, que van desde colaboraciones de tipo técnico para futuros proyectos de satélites dedicados al estudio pasivo de la atmósfera, hasta trabajos prácticos con datos disponibles de satélites actualmente en funcionamiento, u observaciones mediante radiotelescopios en Tierra de líneas rotacionales de diferentes moléculas. En ésta sección nos vamos a limitar a presentar algunos resultados muy generales de ATM.

Presentamos por ejemplo, unos cálculos sobre el espectro atmosférico global en la banda que cubre ATM. Esto nos da una idea de las capacidades del programa (ver la figura 2.1). Otros cálculos concernientes a bandas más específicas se muestran en las figuras 3.22, 3.23, 4.1, 5.3 et 5.4.

Otras posibilidades de ATM ligadas específicamente a los trabajos que se presentan en capítulos siguientes serán presentadas en su momento.

2.4 Algoritmo de inversión de espectros

A partir de un cierto perfil físico-químico de la atmósfera, un modelo de transferencia radiativa directa, como el algoritmo ATM presentado en el apartado anterior, nos dará los valores de la temperatura de brillo para cada frecuencia en la posición de la supuesta observación. Para poder comparar esto con una observación real necesitamos introducir en el análisis una serie de parámetros instrumentales.

Al usar antenas de gran tamaño para las observaciones, el lóbulo principal del diagrama de radiación es muy estrecho (del orden de algunos segundos de arco para λ entre 1 y 3 mm). En ese caso se considera la temperatura de brillo en el eje del lóbulo principal y un coeficiente de acoplo de la antena (η_f) con el cielo para calcular la contribución de la señal del cielo a la temperatura de antena medida. Otra fracción de la temperatura de brillo viene de la fracción de atmósfera alrededor de la antena (a temperatura T_{env}) [ésta contribución de “no acoplo al cielo” es $T_{env}(1-\eta_f)$]. Para antenas a bordo de satélites, cuyo tamaño es, por supuesto, mucho menor, el lóbulo principal del diagrama de radiación tiene un tamaño superior a 1 grado y los lóbulos secundarios también se deben tener en cuenta. Para simular las observaciones es

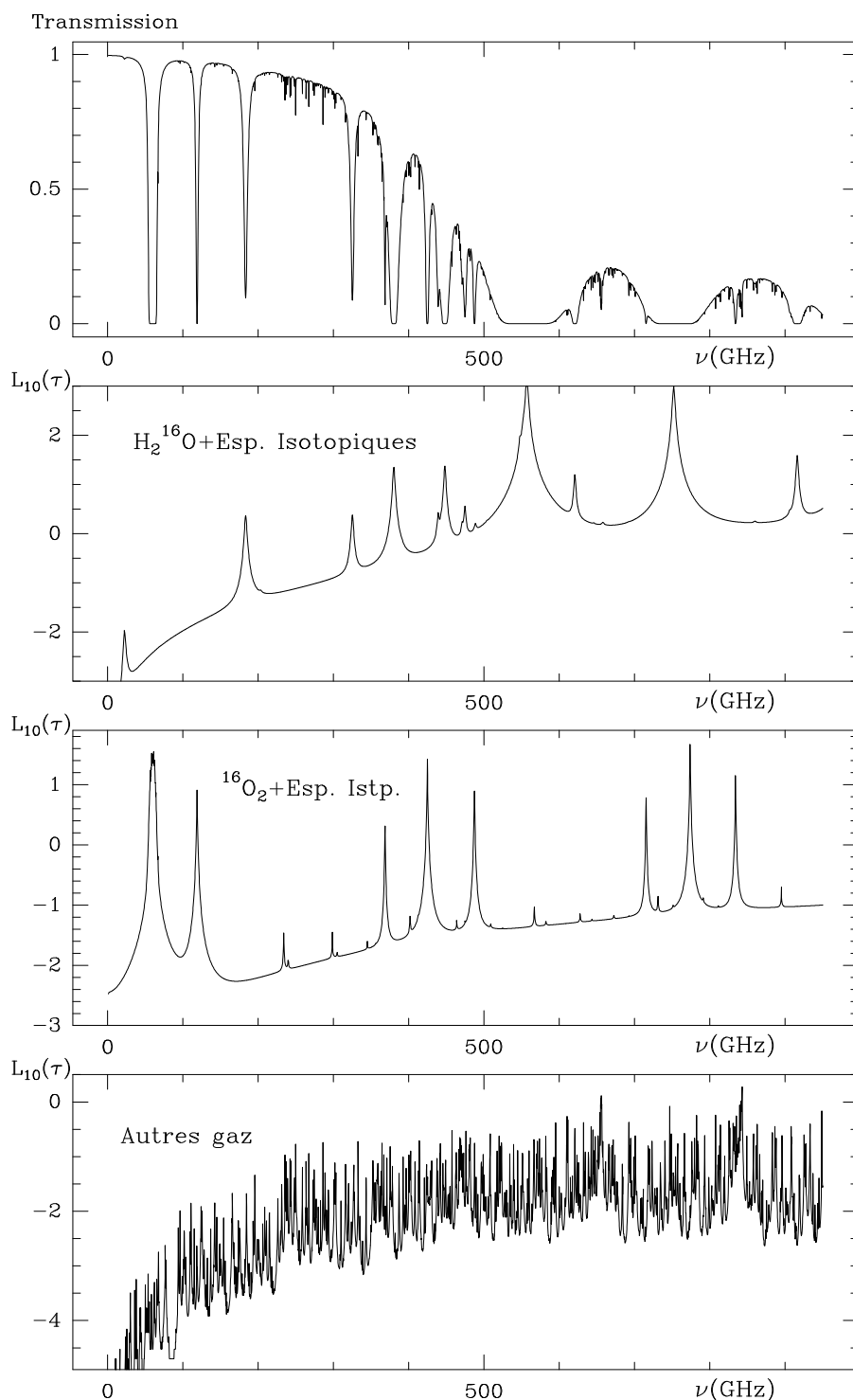


FIG. 2.1 - Cálculo de la transmisión atmosférica realizado por ATM para una atmósfera de tipo invernal (estándar) y un lugar de observación situado a una altura de 4 km (arriba). Se han separado las contribuciones a la opacidad total, para esa misma situación, debidas al vapor de agua, el oxígeno molecular, y los componentes atmosféricos minoritarios.

necesario realizar una convolución del diagrama de radiación con el resultado de la transferencia radiativa en las distintas direcciones. Otra característica de los receptores milimétricos y submilimétricos que debe ser tomada en cuenta es el hecho de que estos trabajan en doble banda y, a veces, la banda imagen no es completamente eliminada. Si llamamos T_{B1} y T_{B2} , respectivamente, a las temperaturas de brillo del cielo en la dirección de observación para dos frecuencias equivalentes en las bandas inferior y superior que llegan al mismo canal la temperatura de antena finalmente medida hacia el cielo en ese canal será (caso de lóbulo de antena muy estrecho):

$$T_{sky,meas} = T_{env} \cdot (1 - \eta_f) + \eta_f [G_S T_{B1} + G_I T_{B2}] \quad (2.36)$$

donde η_f es el coeficiente de acoplo de la antena con las fuentes externas (en relación con su diagrama de radiación), G_S y G_I son las ganancias relativas de las dos bandas ("S" por banda señal, aquella ajustada a la verdadera frecuencia de la línea a observar, e "I" por banda imagen). Estos parámetros cumplen: $\eta_f \leq 1$, $G_S + G_I = 1$.

Nuestro procedimiento de inversión de espectros es un ajuste no lineal generalizado por mínimos cuadrados. Partimos de un perfil estándar de temperatura, presión, y distribución vertical de los diferentes gases atmosféricos. Dicho perfil de partida se obtendrá de una base de datos (*U.S. Std. 62, U.S. Std. 76, REPROBUS,...*) en función de la posición geográfica y la época del año. En cuanto al vapor de agua, cuyo perfil troposférico, que es muy variable, interviene en el nivel de continuo de las observaciones desde Tierra, adoptaremos un modelo de decrecimiento exponencial (ver équations A.1 y A.2). La cantidad integrada de vapor de agua en la troposfera por encima del telescopio (en el caso de observaciones desde la superficie terrestre) es usada como parámetro libre para ajustar dicho nivel de continuo. A partir de aquí, el programa de transferencia radiativa directa calcula las temperaturas de brillo en las frecuencias de las dos bandas del receptor y compone un espectro usando la expresión 2.4. Tras haber analizado las funciones de sondeo (definidas en 2.4.1) del gas al que pertenece la línea que se quiere observar, el usuario puede definir las capas de la atmósfera para las que las abundancias de dicho gas van a ser usadas como parámetros libres por el algoritmo de ajuste de las observaciones. Éste método utiliza una cierta información *a priori* (al igual que otros algoritmos)

pero tiene la ventaja de no necesitar una relación lineal entre las razones de mezcla y las temperaturas de antena. Los parámetros libres se controlan mediante un sub-procedimiento que calcula las derivadas parciales de las temperaturas de antena calculadas respecto a cada uno de ellos y los hace variar en el sentido adecuado para aproximarse al espectro observado. Una vez que se alcanza el grado de convergencia deseado los cálculos se paran.

Si la elección de las capas donde las abundancias se deben ajustar no es buena, el algoritmo puede no converger o hacerlo hacia una solución absurda. Esto nos lleva a hablar del concepto de funciones de sondeo.

2.4.1 Elección de capas. Funciones de sondeo

La elección adecuada de la posición y extensión de las capas atmosféricas de las que vamos a poder obtener información a partir de una observación dada es de suma importancia a la hora de analizar ésta observación.

Partiendo de la solución de la ecuación de transferencia radiativa en el dominio milimétrico (ec. 2.13), podemos considerar que al aplicarla en las inmediaciones de la resonancia de un gas atmosférico minoritario (x) son validas las expresiones siguientes:

$$\tau_\nu = \tau_\nu(O_2) + \tau_\nu(H_2O) + \tau_\nu(x) \quad \kappa_\nu = \kappa_\nu(O_2) + \kappa_\nu(H_2O) + \kappa_\nu(x) \quad (2.37)$$

De esta forma, la ecuación 2.13 se puede escribir como la suma de tres integrales. Para la mayoría de gases atmosféricos no se espera que las variaciones relativas de abundancia respecto a un perfil estándar excedan un orden de magnitud. Esto permite hacer la aproximación de sustituir la distribución vertical del gas ($\rho_{gas}(z)$) por un perfil estándar para calcular τ en las exponenciales utilizando una información a priori de P , T y ρ_{H_2O} . Esta es una forma de linealizar la ecuación (2.13) respecto de $[\rho_{gas}(z)]$. Entonces podemos reescribir (2.13) así:

$$T_{B\nu}(s) = T_{B\nu}(\infty)e^{-\tau_\nu(\infty,s)\Gamma} + \int_\Gamma T(s')e^{-\tau_\nu(s',s)}\kappa_\nu(O_2, s')ds' + \int_\Gamma T(s')e^{-\tau_\nu(s',s)}\kappa_\nu(H_2O, s')ds' + \int_\Gamma T(s')e^{-\tau_\nu(s',s)}\kappa_\nu(x, s')ds' \quad (2.38)$$

que puede expresarse de la siguiente forma:

$$T_B(\nu) = T_{atm}(\nu) + \int_{\Gamma} W_{gas}(\nu, s) \rho_{gas}(s) ds \implies T_B^*(\nu) = \int_{\Gamma} W_{gas}(\nu, s) \rho_{gas}(s) ds \quad (2.39)$$

donde Γ es el camino recorrido por la radiación a través de la atmósfera hasta llegar al detector, $T_{atm}(\nu)$ incluye la contribución del fondo (para observaciones desde la superficie terrestre o desde satélite en sondeo al limbo éste será el fondo cósmico de radiación) y la emisión debida a O_2 y H_2O , que se puede evaluar sólo a partir de la adopción de la información *a priori* [$P(z)$, $T(z)$ y $\rho_{H_2O}(z)$]. $T_B^*(\nu)$ es igual a $[T_B(\nu)]$ pero restando todas esas contribuciones pre-evaluadas. Así, de forma análoga a como se definen las **funciones de peso en temperatura** en la sección 4.1.2 a la hora de sondear el perfil de temperatura atmosférica desde satélite, nosotros llamamos aquí a $W_x(\nu, s)$ **función peso monocromática para el sondeo del gas x**. Esta función puede, en principio, evaluarse a partir de un perfil estándar del gas x, ya que si comparamos las ecuaciones 2.39 y 2.13 para obtener la definición de $W_x(\nu, s)$, el perfil estándar del gas x interviene en: $e^{-[\tau_{\nu, O_2} + \tau_{\nu, H_2O} + \tau_{\nu, x}](s', s)}$. La aproximación, justificable al utilizar un perfil estándar razonable, permite escribir el problema de una forma lineal. A partir de un conjunto de observaciones a diferentes frecuencias (espectroscopía de una línea de emisión, por ejemplo), tendremos un cierto conjunto de funciones peso que nos muestran la región atmosférica a la que cada frecuencia es sensible (ver, por ejemplo, las figuras 3.14 y 3.17). Sin embargo, puede verse como las frecuencias próximas tienen zonas comunes a las que son sensibles. Esta correlación entre las informaciones obtenidas a las distintas frecuencias de una observación espectroscópica hace que el número efectivo de informaciones independientes sea mucho menor que el número de canales de observación. Por ejemplo, a partir de un espectro tomado desde Tierra, con ~ 500 MHz de anchura de banda y ~ 1 MHz de resolución espectral, sólo se pueden obtener las abundancias promediadas de la especie a la que pertenece la línea en dos o tres capas de entre 10 a 15 km de extensión vertical (ver sections 3.2 et 3.3).

Para definición matemática de las capas (lo más independientes posible) a la que una observación es sensible se emplea el concepto de **función de sondeo**. La idea es encontrar la abundancia del gas en una determinada capa centrada en z_j y con extensión Δz_j con arreglo a una expresión como la siguiente:

$$\langle \rho_x(z_j) \rangle = \int_{\Gamma} A(z, z_j) \rho_x(z) dz \quad (2.40)$$

donde $A(z, z_j)$ es lo que llamaremos función de sondeo para la capa centrada en z_j .

Dicha función se determina a partir de las funciones peso monocromáticas del espectro siguiendo el método de Backus-Gilbert (consulté las referencias *Bevilacqua et al.*, 1988 [10], *Brillet*, 1989 [15] et *Backus-Gilbert*, 1970 [4]).

Es deseable que las funciones de sondeo se fijen optimizando por un lado la resolución vertical, y minimizando por otro el error asociado.

El problema de inversión una vez linealizado consiste en encontrar unas funciones $R_i(z_j)$ tales que:

$$\rho_x(z_j) = \sum_i R_i(z_j)T(\nu_i) \quad (2.41)$$

(i =canales del espectro, $T(\nu_i)$: medidas, en general un observable equivalente a T_B^* de la ecuación 2.39). Para conocer la resolución vertical estimada, sustituimos 2.39 en la ecuación 2.41:

$$\rho_{gas}(z_j) = \sum_i R_i(z_j) \int_{-\infty}^0 W(\nu_i, z) \rho_{gas}(z) dz \quad (2.42)$$

lo que nos permite escribir:

$$\rho_{gas}(z_j) = \int_{-\infty}^0 A_j(z) \rho_{gas}(z) dz \quad (2.43)$$

donde $A_j(z) = \sum_i R_i(z_j)W(\nu_i, z)$. La **función de sondeo** $A_j(z)$ para la capa centrada en z_j está así asociada al conjunto de funciones peso monocromáticas $W(\nu_i, z)$.

A la hora de calcular $R_i(z_j)$, un multiplicador de Lagrange (γ) se utiliza para ponderar el error sobre $\rho_{gas}(z_j)$ asociado al ruido (r.m.s.) de los espectros [$(\partial\rho_{gas}(z_j) = \sum_i R_i(z_j)\partial T(\nu_i)$, siendo $\partial T(\nu_i)$ dicho ruido], y la anchura espacial de $A_j(z)$, que da la resolución vertical (detalles en *Bevilacqua et al.*, 1988 [10]).

En ATM hemos incorporado la posibilidad de calcular las funciones peso monocromáticas $W(\nu_i, z)$ y las funciones de sondeo $A_j(z)$ para una determinada observación espectroscópica de un gas minoritario. Se supone que el espectrómetro usado se centra sobre una resonancia de un determinado gas atmosférico (banda $\nu_c - \Delta\nu$ a $\nu_c + \Delta\nu$) y que éste tiene una resolución espectral $\delta\nu$. Los comandos para realizar éste cálculo se describen en el apéndice A.

2.4.2 Trabajar con el programa de inversión

El programa encargado de la inversión de observaciones espectroscópicas hasta una frecuencia 1000 GHz se ha derivado del programa de transferencia radiativa directa ATM teniendo en cuenta los diferentes modos de observación. Los parámetros espectroscópicos necesarios para la inversión son leídos de una base de datos interna, una vez conocido el rango de frecuencias del espectro a tratar. El programa reconoce automáticamente las líneas de gases atmosféricos existentes en la banda de frecuencias considerada. Gracias a esto, el número de comandos se ha reducido bastante en comparación con **ATM**. Para hacer un cálculo de inversión hay que introducir todos los parámetros que no se puedan deducir a partir simplemente del fichero de datos, que sólo contiene frecuencias y temperaturas de antena. Por ejemplo el valor de la masa de aire a partir de la elevación de la observación (debe ser introducida con **AIRM**), y la atmósfera estándar que debe elegirse a priori teniendo en cuenta la época y posición geográfica de la observación. Existe, pues, comandos comunes con ATM y otros específicos al programa de inversión. Todos ellos se presentan en el apéndice B.

EN el capítulo 3 se describen cierto número de aplicaciones del programa de inversión al análisis de observaciones de líneas de O_3 y H_2O llevadas a cabo con radiotelescopios situados en alta montaña. Algunos ejemplos de análisis preliminar para la elección de capas para la inversión se dan en los apartados 3.2 y 3.3. Además, en el capítulo 5 presentamos una serie de análisis de espectros sintéticos que simulan observaciones al limbo atmosférico.

Capítulo 3

Sondeos milimétricos desde tierra

En éste capítulo se describen una serie de estudios que forman la base experimental de éste trabajo. Esto ha sido posible gracias a una colaboración entre el Observatorio Astronómico Nacional (España) y el Departamento de Radioastronomía Milimétrica del Observatorio de París (Francia). Se presentan aquí observaciones desde la superficie terrestre de líneas de ozono y el vapor de agua, analizadas con objetivos científicos mediante el algoritmos de inversión presentado en el capítulo anterior; también de $^{16}\text{O}^{18}\text{O}$ para validar un modelo del efecto Zeeman en las líneas atmosféricas de oxígeno. Las observaciones de H_2O a 183 GHz, de $^{16}\text{O}^{18}\text{O}$ a 234 GHz y de O_3 por encima de 350 GHz son novedosas y han permitido la obtención de interesantes resultados sobre el vapor de agua y el campo magnético en la estratosfera y mesosfera así como la medida de razones de mezcla de ozono a diferentes alturas a partir de líneas nunca observadas anteriormente.

3.1 Modelización del efecto Zeeman sobre las líneas de O_2

A frecuencias próximas a una resonancia de O_2 , la propagación de una onda electromagnética depende tanto de su dirección como de su estado de polarización, debido a la interacción entre el momento magnético permanente de ésta molécula (resultante de dos espines desapareados) y el campo magnético terrestre. Así, la ecuación de transferencia radiativa en la atmósfera terrestre deja de ser un problema escalar para pasar a ser anisótropo y dependiente del estado de polarización.

Los trabajos teóricos en el tema que nos ocupa se han inspirado de los artículos de *Lenoir* (1967,1968) [48], [49] donde se define una matriz de coherencia para la temperatura de brillo y se plantea la ecuación de transferencia radiativa generalizada para calcularla. El trabajo de modelización que nosotros hemos realizado, el cual se ha incorporado a nuestro programa **ATM**, ha partido de un modelo preliminar proporcionado por H.J. Liebe (NTIA, Boulder, Colorado). Dicho modelo ([51], [53]) estudia la propagación de una onda electromagnética con un estado de polarización inicial dado a través de un cierto camino en la atmósfera terrestre para frecuencias próximas a resonancias $\Delta N=0$ de la molécula de O_2 . Se calcula la atenuación sufrida por la onda a lo largo del trayecto, así como el cambio en el estado de polarización. Nosotros necesitamos calcular las temperaturas de brillo asociadas a diferentes polarizaciones a causa de la emisión natural atmosférica. Para ello es necesario hacer un promedio temporal del vector de Poynting y tener en cuenta la emisión natural de las diferentes capas atmosféricas que, a frecuencias próximas a los centros de las líneas del O_2 , también está polarizada. Para los valores típicos de la intensidad del campo magnético terrestre (algunas decenas de μ T como máximo), se puede estimar que la opacidad calculada con los modelos que no tienen en cuenta el campo magnético es falsa solamente en un intervalo de frecuencias entre +5 y -5 MHz alrededor de la frecuencia de resonancia rotacional pura.

Vamos a resumir aquí la teoría utilizada para construir nuestro propio modelo (*Pardo et al.*, 1995 [64]). Para una onda electromagnética que se propaga según el eje z la evolución del campo eléctrico asociado se puede expresar así:

$$E(z, \nu) = \exp[ikz(I + N_z \cdot)]E(0, \nu) \quad (3.1)$$

donde N_z es un tensor 3x3 denominado **tensor de refractividad** en el plano de polarización (x,y). *Lenoir* ([48]) toma la solución de las ecuaciones de Maxwell expresada en función del campo magnético:

$$H(z, w) = \exp[-G(w)z]H(0, w) \quad (3.2)$$

donde $G(w)$ se conoce como **tensor de propagación** y está relacionado directamente con el tensor de refractividad (ecuación 3.20). Las propiedades electromagnéticas del medio se expresan mediante una permitividad eléctrica ϵ_0 (en el aire podemos tomar la del vacío) y un tensor de permeabilidad magnética ligeramente anisótropo:

$$\mu = \mu_0[I + \chi(w)] \quad (3.3)$$

con $\chi_{ij}(w) \rightarrow 0$, $w = 2\pi\nu$. $G(w)$ se expresa directamente a partir de estas propiedades físicas:

$$G(w) = ik_0[I + \frac{1}{2}\chi(w)] \quad (3.4)$$

$$k_0^2 = w^2\epsilon_0\mu_0 \quad (3.5)$$

Estamos interesados en la propagation, según el eje z de una onda plana definida por unos campos eléctrico et magnético bidimensionales $[E_x(z), E_y(z)]$ y $[H_x(z), H_y(z)]$. Por tanto, el tensor de propagation (así como el de refractividad), se restringe al plano de fase (x, y) . Para deducir una expresión general de la ecuación de transferencia radiativa, tendremos necesidad de definir un pseudo vector asociado al campo eléctrico: $E_p(z, w)$ ($E_{px} = -E_y$, $E_{py} = E_x$) que se relaciona fácilmente con el campo magnético:

$$E_p(z, w) = \frac{G(w)}{iw\epsilon_0} H(z, w) \quad (3.6)$$

A partir de las ecuaciones de Maxwell y de las definiciones anteriores, tenemos (en primer orden en χ):

$$\frac{\partial}{\partial z} E_p(z, w) = -iw\mu_0[I + \chi(w)] H(z, w) \quad (3.7)$$

$$\frac{\partial}{\partial z} H(z, w) = -iw\epsilon_0 E_p(z, w) \quad (3.8)$$

Si multiplicamos (3.7) por $H^{*T}(z, w)$ y añadimos el resultado a la conjugada transpuesta de la ecuación (3.8), que hemos multiplicado previamente por $E_p(z, w)$, llegamos a:

$$\frac{\partial}{\partial z} E_p H^{*T} = -iw\nu_0[I + \chi(w)] H H^{*T} + iw\epsilon_0 E_p E_p^{*T} \quad (3.9)$$

que, teniendo en cuenta la relación entre E_p y H (3.6), nos conducirá a:

$$\frac{\partial}{\partial z} E_p H^{*T} + G(w) E_p H^{*T} + E_p H^{*T} G^{*T}(w) = 0 \quad (3.10)$$

Finalmente, si tomamos el promedio temporal de esta última ecuación, llegamos a la ecuación diferencial siguiente:

$$\frac{\partial}{\partial z} S(z, w) + G(w)S(z, w) + S(z, w)G^{*T}(w) = 0 \quad (3.11)$$

donde $S_{ij}(w) = \langle E_{pi}(w)H_j^*(w) \rangle$.

La ecuación 3.11 puede descomponerse en dos, una para la parte hermítica y otra para la antihermítica de $S(z, w)$. La parte hermítica $P(w)$ es muy interesante ya que su traza es igual a la potencia media que se propaga según $+z$. Los elementos de la diagonal principal P_{xx} y P_{yy} son reales y no negativos. Representan el espectro de potencia para las polarizaciones lineales según x e y , si hemos elegido esta base para describir la polarización. Los elementos fuera de la diagonal son una medida del grado de coherencia entre estas polarizaciones. Se pueden describir los resultados asimismo para una base formada por las polarizaciones circulares a derecha e izquierda, o bien la que nosotros deseemos. sólo es necesario hacer el cambio de base apropiado. En la región de frecuencias en la que trabajamos, hay una relación lineal entre potencia o intensidad y temperatura de brillo como ya vimos al hablar de la aproximación de Rayleigh-Jeans. Del mismo modo, podemos definir una matriz de temperatura de brillo $T_B(w)$ a partir de la parte antihermítica de S :

$$dP_0(\theta, \phi) = \frac{kT_B(\theta, \phi)}{\lambda^2} d\Omega \quad (3.12)$$

la cual verificará:

$$\frac{\partial}{\partial z} T_B(z, w) + G(w)T_B + T_B G^{*T}(w) = 0 \quad (3.13)$$

La última ecuación indica como la temperatura de brillo evoluciona cuando la radiación atraviesa una capa homogénea en una cierta dirección. Sin embargo, dicha ecuación no tiene en cuenta la emisión que se puede producir en la capa. Para introducirla hay añadir al miembro de la derecha el término matricial de emisión. Una simplificación muy importante se produce cuando el medio está en equilibrio termodinámico ya que $\frac{\partial}{\partial z} T_B(z, w) = 0$ en una capa homogénea y entonces la emisión es $G(w)T_e + T_e G^{*T}(w)$ donde T_e es la matriz de temperatura de emisión de la capa. Para el caso de la atmósfera de la Tierra, esta matriz será diagonal con sus elementos no nulos iguales a la temperatura física de la capa $T(z)$. La ecuación general de transferencia radiativa, si llamamos T_e a la matriz $T(z) \cdot I$ (T : temperatura física de la capa, I : matriz identidad), será:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial z} T_B(z, w) + G(w)T_B + T_B G^{*T}(w) &= G(w)T_e + T_e G^{*T}(w) = \\ &= T \cdot [G(w) + G^{*T}(w)] \end{aligned} \quad (3.14)$$

y su solución para una capa entre z_i et z_f , sobre la que incide un campo de radiación descrito por una matriz de temperatura de brillo $T_B(z_i, w)$, es:

$$T_B(z_f, w) = e^{-G(w)\Delta z} T_B(z_i, w) e^{-G^{*T}(w)\Delta z} + T[I - e^{-2A(w)\Delta z}] \quad (3.15)$$

donde $A(w)=[G(w)+G^{*T}(w)]/2$ es la parte hermítica de $G(w)$ mientras que la parte antihermítica $B(w)=[G(w)-G^{*T}(w)]/2$. En el caso de que A y B conmuten, lo cual sólo es rigurosamente cierto para unas direcciones de propagación que forman un ángulo de 0° , 90° , 180° , o 270° con la dirección del campo magnético, la ecuación 3.15 puede escribirse así:

$$T_B(z_f, w) = e^{-A(w)\Delta z} T_B(z_i, w) e^{-A^{*T}(w)\Delta z} + T[I - e^{-2A(w)\Delta z}] \quad (3.16)$$

lo cual simplifica el cálculo de la matriz de temperatura de brillo. La parte antihermítica $B(w)$ produce fundamentalmente una rotación Faraday en la elipse de polarización. La influencia de $B(w)$ en los elementos diagonales de T_B para diferentes ángulos entre el campo magnético y la dirección de propagación, fue investigada por *Rosenkranz et Stealin* (1988) [79] para la línea de O₂ centrada a 60.43478 GHz ($N_J=7_7 \rightarrow 7_8$), encontrando diferencias despreciables si no se tiene en cuenta esa parte antihermítica $B(w)$.

La matriz de temperatura de brillo a la salida de la última capa se puede expresar de una manera que pone en evidencia la contribución de cada capa a la T_B final, a través de matrices de función peso (en temperatura) generalizadas $W(i, \nu)$:

$$T_B(w) = \sum_{i=1}^{ncapas} W(i, \nu) T(z_i + \frac{\Delta z_i}{2}) \quad (3.17)$$

$$W(i, \nu) = P_i(w) [I - e^{-2A(z_i + \frac{\Delta z_i}{2}, w)\Delta z}] P_i^{*T}(w) \quad (3.18)$$

con

$$P_i(w) = e^{-A(ncapas, w)} e^{-A(ncapas-1, w)} \cdot \dots \cdot e^{-A(i+1, w)} \quad (3.19)$$

Se puede tomar la matriz N_z para calcular las matrices T_B o función peso W ya que se puede demostrar fácilmente a partir de la relación entre H y E_p (3.6) y las ecuaciones (3.1) y (3.2) que:

$$\exp[-G(w)z] = C \cdot \exp[ikz(I + N_z \cdot 10^{-6})] \cdot C^T \quad (3.20)$$

donde C es la matriz siguiente:

$$\sigma_{\pm} = \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (3.21)$$

Para encontrar la solución hay que determinar finalmente la matriz T_B inicial. Hay que considerar dos casos: a) sondeo desde satélite con intersección del diagrama de antena con la superficie terrestre, y b) sondeo desde satélite al limbo atmosférico o sondeo desde el suelo hacia el espacio. En el premier caso, a causa de la gran opacidad atmosférica total a las frecuencias de las que nos estamos ocupando, no se ve la superficie (esto sólo puede no ser cierto para ciertas líneas muy débiles de $^{16}\text{O}_2$ o para líneas de las especies isotópicas, pero estas no se utilizan para éste tipo de sondeo)). Por tanto, no es necesario imponer una T_B inicial realista (no intervendrá en el resultado). Sin embargo en el caso b) la temperatura del fondo cósmico puede no ser despreciable. Como esta emisión no está polarizada en principio, la matriz inicial de temperatura de brillo será diagonal con sus dos elementos no nulos iguales a contribución del fondo cósmico de radiación (descrito por un cuerpo negro a 2.73 K). Hay que recordar que ésta contribución depende de la frecuencia ya que la aproximación de Rayleigh-Jeans no es correcta en el dominio milimétrico a causa de la baja temperatura de ese cuerpo negro (ver sección 2.1).

La parte esencial del problema que acabamos de describir es la determinación del tensor de propagación G o el de refractividad N (ecuaciones 3.17, 3.18 y 3.19). Para ello es necesario conocer tres cosas: a) la posición de las sub-líneas Zeeman, b) sus intensidades relativas y c) la polarización asociada. La espectroscopía Zeeman sobre las líneas de la banda de espín-rotación del oxígeno ha sido descrita por *Liebe et al.* (1993) [53] y *Lenoir* (1968) [49]. Las líneas de O_2 situadas en el dominio submilimétrico (transiciones entre niveles (N,J) con $\Delta J = \pm 1$ y $\Delta N = \pm 2$ en lugar de 0 como sucedía alrededor de 60 GHz) se han estudiado en éste trabajo. Hemos realizado los cálculos de las intensidades relativas de sus componentes Zeeman a partir de las expresiones generales dadas en los trabajos de *Tinkham and Strandberg* (1955) [86], [87]. Los niveles de energía (N,J) del O_2 pierden su degeneración al

existir un campo magnético externo, dando lugar a $2J+1$ subniveles de energía cuyo número cuántico magnético asociado es M . La posición de esos subniveles respecto al nivel de energía del estado degenerado (N_J , en ausencia de campo magnético), que va a permitir conocer las frecuencias centrales de las sublíneas Zeeman, se expresa así:

$$\Delta E = -1.0001\mu_0 MH \cdot \frac{J(J+1) + S(S+1) - N(N+1)}{J(J+1)} \quad (3.22)$$

donde $S=1$ para O₂ en su estado electrónico fundamental, μ_0 es el magnetón de Bóhr y H la intensidad del campo magnético externo.

Las reglas de selección para M son: $\Delta M=0, \pm 1$. Las transiciones con $\Delta M=0$ se denominan componentes π , y las $\Delta M=\pm 1$ se conocen como $\sigma\pm$. La emisión en esas transiciones está polarizada ya que el dipolo magnético adquiere una cierta orientación respecto al campo externo para cada estado magnético. Éste fenómeno físico se puede expresar matemáticamente en el tensor de refractividad del medio. En el caso de una propagación isótropa y no polarizada, el tensor de refractividad (3x3) será proporcional a la matriz identidad. Los elementos de la diagonal serán de la forma: $n+in'$. La parte real producirá un cambio en la velocidad de propagación (efecto de refracción) y será responsable de una cierta dispersión de fase o retardo temporal. Ésta parte está compuesta por un término independiente de la frecuencia y por una contribución cromática. Como éste efecto se puede despreciar para el estudio de los fenómenos físicos observables que nos interesan en ésta parte del trabajo, no tomaremos en consideración la parte real n (los retardos temporales son del orden de 4 ps/km a ciertas frecuencias en la banda de 60 GHz para condiciones estándar de temperatura y presión, *Liebe et al.*, 1993 [53]). Por otro lado, la parte imaginaria n' es responsable de una atenuación del flujo de energía en la dirección de propagación. Así el coeficiente de absorción macroscópico definido en la ecuación 2.2 será proporcional a n' para cada frecuencia. Éste formalismo permite calcular el tensor de refractividad N a frecuencias próximas de una resonancia de O₂. Por un lado tenemos una contribución isótropa debida al continuo y a las alas de otras líneas. Por otra parte, existe una contribución anisótropa que se puede expresar así:

$$S_{N_J-N'_J} \sum_M \zeta_M f(\nu, \nu_M) \sigma_M \quad (3.23)$$

donde S_{N_J} es la fuerza de oscilador de la línea $N_J \rightarrow N'_J$, ζ_M es la intensidad relativa de cada componente Zeeman (los valores se encuentran en la tabla 3.1), $f(\nu, \nu_M)$ es

la forma de línea adoptada (centrada en la frecuencia de la sublínea), y σ_M es una matriz unitaria de coherencia (*Born and Wolf*, 1964 [13]) que expresa la polarización de cada componente. Para expresar estas matrices tomamos un sistema de referencia donde el eje z es paralelo a la dirección del campo magnético. Las sublíneas Zeeman de tipo π (no existe cambio del número cuántico magnético M) están polarizadas linealmente en la dirección paralela al campo magnético mientras que las componentes $\sigma+$ y $\sigma-$ están polarizadas circularmente, a derechas o a izquierdas respectivamente, en el plano perpendicular al campo magnético. Entonces, podemos describir estos estados de polarización con ayuda de las siguientes matrices:

$$\pi \longrightarrow \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad \sigma_{\pm} \longrightarrow \begin{pmatrix} 1 & \pm(-i) & 0 \\ \pm i & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (3.24)$$

en la base formada por las polarizaciones lineales en las direcciones x, y, z (campo magnético externo en la dirección z).

Estamos interesados en la propagación de una onda plana en una región donde existe un campo magnético. El camino de propagación se divide en una serie de zonas en las que se asume un campo magnético constante que forma un ángulo θ con la dirección de propagación. El campo eléctrico bidimensional $\vec{E}(z)$ se ve afectado por la matriz de refractividad restringida al plano de fase (perpendicular a la dirección de propagación z). En éste se define la dirección de la polarización horizontal (\vec{H}) como la del vector $\vec{z} \times \vec{B}_{geo}$, y la vertical (\vec{V}) como la de $\vec{z} \times \vec{H}$. Utilizando la base $(\frac{\vec{H}}{|\vec{H}|}, \frac{\vec{V}}{|\vec{V}|})$ podemos escribir el tensor de refractividad a una frecuencia próxima a una resonancia rotacional de O_2 como sigue:

$$\begin{pmatrix} n^*(\nu) & 0 \\ 0 & n^*(\nu) \end{pmatrix} + S_{N_J - N'_{J'}} \sum_{\pi} \zeta_M f_M(\nu) \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & \text{sen}^2 \theta \end{pmatrix} + S_{N_J - N'_{J'}} \sum_{\sigma_+, \sigma_-} \zeta_M f_M(\nu) \begin{pmatrix} 1 & -i\delta_{\pm} \cos \theta \\ i\delta_{\pm} \cos \theta & \cos^2 \theta \end{pmatrix} \quad (3.25)$$

donde n^* representa la contribución isotrópica correspondiente al continuo y alas de otras líneas, $S_{N_J - N'_{J'}}$ es la fuerza de oscilador (rotacional), ζ_M son las intensidades relativas de las componentes Zeeman, $f(\nu, \nu_M)$ son los perfiles de línea individuales para cada componente. δ_{\pm} es igual a +1 para las líneas $\sigma+$ y -1 para las $\sigma-$. Las relaciones que permiten calcular las intensidades relativas y las frecuencias centrales de cada componente Zeeman se dan en el cuadro 3.1.

Vemos que la emisión asociada a las componentes π aparecerá linealmente polarizada en la dirección de \vec{V}' mientras que la emisión σ_{\pm} tendrá en general una

$\Delta N=0, \Delta J=+1$		
$\pi (M_i=M_s)$	$\frac{2M(N-1)}{N(N+1)}$	$\frac{3((N+1)^2-M^2)}{(N+1)(2N+1)(2N+3)}$
$\sigma+ (M_i=M_s+1)$	$\frac{2[M(N-1)-1]}{N(N+1)}$	$\frac{3(N-M)(N-M+1)}{4(N+1)(2N+1)(2N+3)}$
$\sigma- (M_i=M_s-1)$	$\frac{2[M(N-1)+1]}{N(N+1)}$	$\frac{3(N+M)(N+M+1)}{4(N+1)(2N+1)(2N+3)}$
$\Delta N=0, \Delta J=-1$		
$\pi (M_i=M_s)$	$\frac{2M(N+2)}{N(N+1)}$	$\frac{3(N^2-M^2)}{N(2N+1)(2N-1)}$
$\sigma+ (M_i=M_s+1)$	$\frac{2[M(N+2)+N+1]}{N(N+1)}$	$\frac{3(N-M)(N-M-1)}{4N(2N+1)(2N-1)}$
$\sigma- (M_i=M_s-1)$	$\frac{2[M(N+2)-N-1]}{N(N+1)}$	$\frac{3(N+M)(N+M-1)}{4N(2N+1)(2N-1)}$
$\Delta N=-2, \Delta J=-1$		
$\pi (M_i=M_s)$	$M \left[\frac{2-(N-2)(N-1)}{J(J+1)} \frac{2-N(N+1)}{J(J+1)} \right]$	$\frac{3(J^2-M^2)}{J(2J-1)(2J+1)}$
$\sigma+ (M_i=M_s+1)$	$1 + \frac{(M+1)[2-(N-2)(N-1)]}{J(J+1)} \frac{M[2-N(N+1)]}{J(J+1)}$	$\frac{3(J-M-1)(J-M)}{4J(2J-1)(2J+1)}$
$\sigma- (M_i=M_s-1)$	$-1 + \frac{(M-1)[2-(N-2)(N-1)]}{J(J+1)} \frac{M[2-N(N+1)]}{J(J+1)}$	$\frac{3(J+M-1)(J-M)}{4J(2J-1)(2J+1)}$
$\Delta N=-2, \Delta J=0$		
$\pi (M_i=M_s)$	$\frac{2M(2N+1)}{J(J+1)}$	$\frac{3M^2}{J(J+1)(2J+1)}$
$\sigma+ (M_i=M_s+1)$	$1 + \frac{2M(2N+1)+2-(N-2)(N-1)}{J(J+1)}$	$\frac{3[J(J+1)-M(M-1)]}{4J(J+1)(2J+1)}$
$\sigma- (M_i=M_s-1)$	$-1 + \frac{2M(2N+1)-2+(N-2)(N-1)}{J(J+1)}$	$\frac{3[J(J+1)-M(M+1)]}{4J(J+1)(2J+1)}$

TAB. 3.1 - Intensidades relativas y posición de las frecuencias centrales de las componentes Zeeman respecto a la frecuencia de resonancia rotacional no perturbada; para obtener el valor en MHz de esa diferencia hay que multiplicar los valores de la tercera columna por $0.014015H(\mu T)$. Las expresiones están dadas en función de los números cuánticos del nivel superior de la transición ($N, J, M=N_S, J_S, M_S$.)

polarización elíptica cuyo eje mayor estará orientado en la dirección de \vec{H}' . Al sumar las matrices de coherencia individuales de las componentes Zeeman (como en la ecuación 3.25) se asume una incoherencia mutua. Así, el resultado es hermítico y, además, $\text{Re}(A_{ij})$ vale 0 si $i \neq j$. Esto significa que la matriz T_B verificará también que $\text{Im}(T_{Bii})=0$ y $\text{Re}(T_{Bij})=0$ cuando $i \neq j$.

El programa **ATM** permite simular el efecto Zeeman par las líneas del oxígeno (véase la sección A). Para desarrollo de ésta parte del modelo ha sido necesario precisar una geometría introduciendo ciertos parámetros complementarios respecto a lo que se describió en el capítulo 2. Hay que tener en cuenta la latitud, la longitud y la altitud para obtener el vector de campo magnético a partir de un modelo.

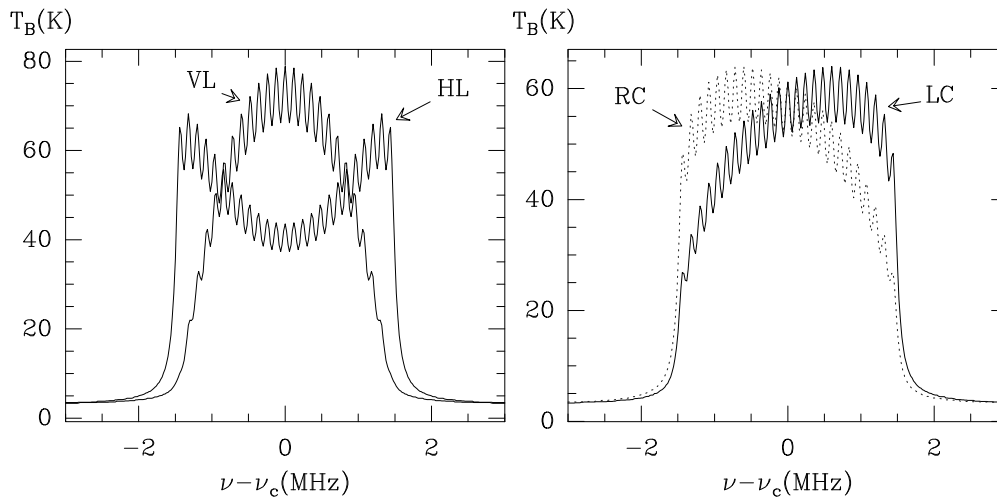


FIG. 3.1 - Ejemplo de la temperatura de brillo calculada en el caso de un sondeo al limbo con un punto de tangencia muy alto (97.5 km sobre el punto geográfico 64.9°N,75°E). La dirección de propagación est S-N sobre el meridiano 75°E. Los cálculos deben tener en cuenta la disminución de la razón de mezcla del oxígeno a causa de la disociación producida por el UV solar en posiciones por encima de los 80 km de altura.

También es necesario conocer la orientación de la dirección de propagación respecto al campo magnético.

La figura 3.1 muestra una simulación de temperatura de brillo para una de las líneas de la banda de spín-rotación del oxígeno molecular en torno a 60 GHz. Cuando se trabaja en una base de polarizaciones lineales (LV, LH) se obtiene un resultado simétrico para T_B , respecto a la resonancia. En el caso de la base de polarizaciones circulares (LC, RC), se pierde efectivamente esta simetría, pero los resultados son complementarios en el sentido que el elemento T_{B11} para la frecuencia $\nu - \nu_c = \Delta\nu$ es el mismo que el elemento T_{B22} para $\nu - \nu_c = -\Delta\nu$.

El interés de extender el modelo a las líneas $\Delta N=2$ del O_2 y a sus derivados isotópicos estriba en el hecho de que una serie de satélites, que estarán pronto operativos, así como telescopios transportadas por globos a grandes alturas (entre 35 y 40 km), van a ir equipados con receptores submilimétricos y podrán observar líneas de O_2 a frecuencias a partir de 368 GHz. La mayoría de estos sistemas estarán orientadas a fines puramente astrofísicos, pues han sido concebidos para llevar a cabo observaciones que se hacen imposibles desde tierra debido, precisamente, al espectro atmosférico. Podemos citar, por ejemplo, **PRONAOS** (CNES, Francia), **ODIN** (Suecia, Francia, Canadá) y **MLS** (NASA, USA).

El satélite ODIN tiene un plan compartido entre objetivos astrofísicos y atmosféricos. En lo que nosotros estamos tratando en esta sección, éste satélite es del máximo interés pues va a permitir el estudio de líneas del O₂ a 119 y a 487 GHz (la primera pertenece al grupo $\Delta N=0$ y la segunda al $\Delta N=2$), realizando sondeos al limbo. Dos espectrómetros autocorreladores estarán disponibles con 1.2 GHz de banda total y resoluciones espectrales entre 300 kHz y ~ 1.2 MHz. También habrá un acusto-óptico de 1 GHz de banda total. Con éste último se pueden mejorar las actuales medidas que mediante sondeo al limbo han intentado poner de manifiesto el efecto Zeeman sobre las líneas atmosféricas del O₂.

Hoy en día, *Hartmann et al.*, 1996 [36] han sido los únicos en intentar la medida del efecto Zeeman mediante sondeo al limbo. Dichas medidas se realizaron con un radiómetro conectado a un espectrómetro de 200 kHz de resolución, denominado MAS, que fue embarcado en una lanzadera espacial de la serie "Suttle" de la NASA en Marzo de 1992. La frecuencia central fue de 61.1506 GHz, correspondiente a la línea 9+ de la banda de spín-rotación del O₂. La figura 3.2 nos muestra una comparación entre un espectro obtenido y las simulaciones realizadas, asumiendo para el rayo observado la siguiente geometría: punto de tangencia a 90 km sobre las coordenadas geográficas 65°N y 88°O donde el campo magnético terrestre adquiere un valor, según el modelo [5], de 58.4 μ T. El receptor era sensible a la polarización lineal horizontal. Los cálculos teóricos tienen una resolución de 10 kHz. Los resultados de estas observaciones muestran un "ruido" compatible con el efecto Zeeman calculado, aunque la resolución espectral no permite resolver con claridad dicha subestructura.

Uno de los objetivos que nos hemos fijado ha sido el de verificar la validez del modelo que hemos desarrollado antes de aplicarlo de una forma general. Es evidente que durante la realización de ésta tesis no se ha podido contar con medidas desde satélite. Había que estudiar por tanto las posibilidades de realizar la validación mediante medidas desde la superficie terrestre.

3.1.1 Justificación del uso de una línea de ¹⁸O¹⁶O para las medidas desde Tierra

La gran abundancia del ¹⁶O₂ hace que sus líneas atmosféricas vistas desde la superficie terrestre aparezcan completamente saturadas, impidiendo de hecho las observaciones astrofísicas. Así, en la región central de la línea (decenas de MHz) las capas bajas absorben completamente cualquier radiación proveniente de la estratos-

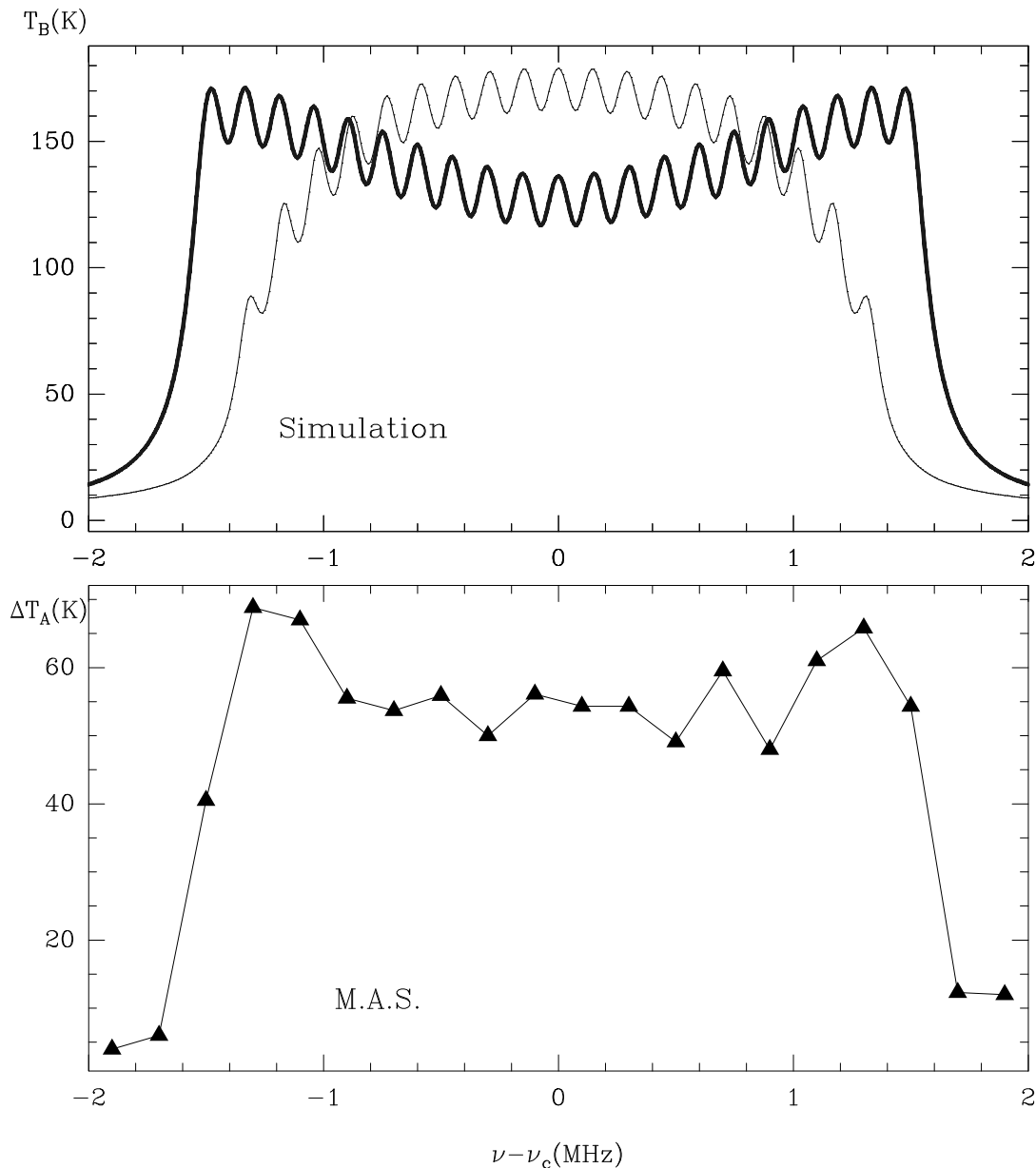


FIG. 3.2 - Comparación entre una observación llevada a cabo con el sistema MAS y las predicciones de T_B para polarización lineal horizontal (emisión más ancha) y vertical.

fera y mesosfera (figura 3.3). No obstante, se puede observar desde Tierra la especie isotópica rara $^{18}\text{O}^{16}\text{O}$, que posee una relación de abundancias de $4 \cdot 10^{-3}$ respecto a la especie principal (ver tabla 2.7). La opacidad de la línea es mucho menor y por ello es posible ver en la parte central la emisión proveniente de las capas altas en la que se refleja el efecto Zeeman. La figura 3.3 nos muestra los elementos diagonales de la matriz peso (definida en la ecuación 3.16) para observaciones de una resonancia de esa especie isotópica de oxígeno molecular desde la superficie terrestre. Se ha

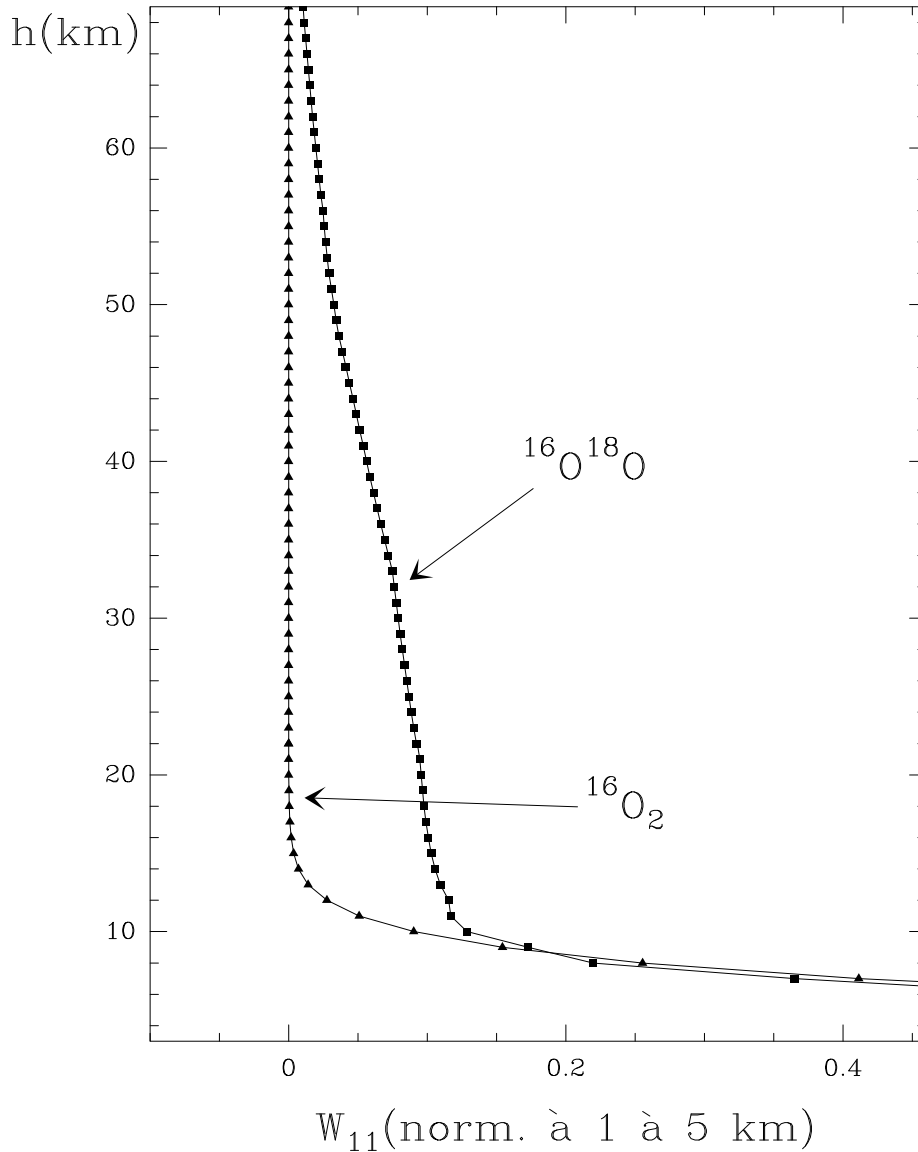


FIG. 3.3 - Elemento HL-HL de la matriz de funciones de peso en temperatura a frecuencias separadas 0.6 MHz del centro de las resonancias a 233.94671 GHz del $^{16}O^{18}O$ (cuadrados) y a 118.75033 GHz del $^{16}O_2$ (triángulos) para una observación desde Plateau de Bure en la dirección paralela al campo magnético local. Las curvas se han normalizado dividiendo los cálculos por el valor de W a 3 km en el caso de la línea de $^{16}O^{18}O$.

comparado con los mismos elementos para otra línea de la especie dominante $^{16}O_2$. La figura muestra claramente la imposibilidad de usar líneas de $^{16}O_2$ para nuestros objetivos. Por tanto, hemos tratado de observar el efecto Zeeman desde Tierra y de validar el modelo teórico que acabamos de exponer usando una línea, a una frecuencia accesible técnicamente, del $^{18}O^{16}O$. La transición elegida es la $2_1 \rightarrow 0_1$ cuya frecuencia de resonancia es 233.94611 GHz. Dicha línea está situada en torno a 1 mm de longitud de onda. Existen muchos telescopios milimétricos equipados con

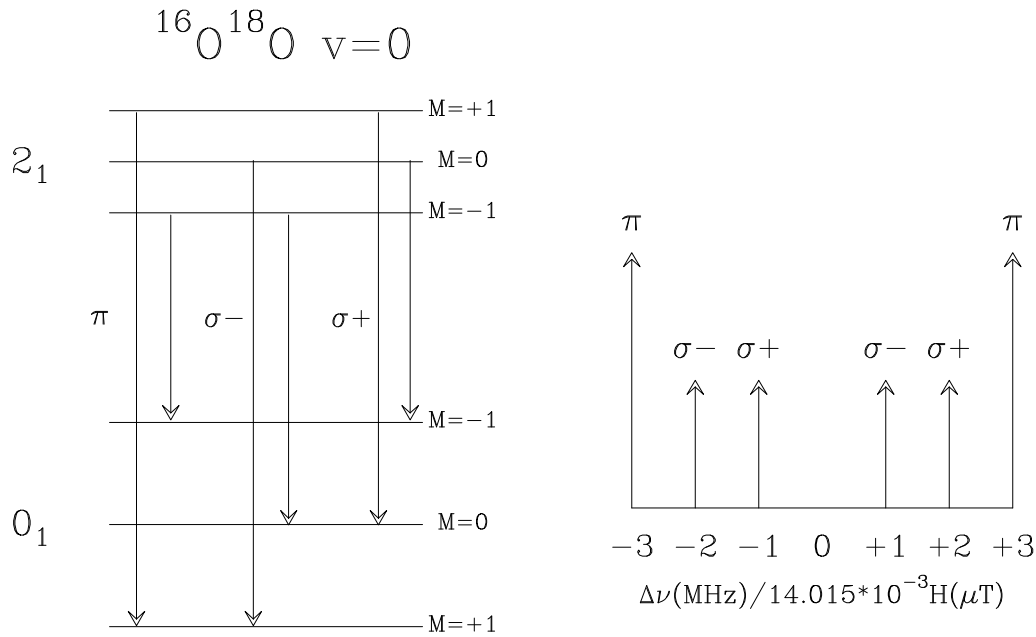


FIG. 3.4 - Esquema de las componentes Zeeman de la transición rotacional $2_1 \rightarrow 0_1$ de la molécula $^{16}\text{O}^{18}\text{O}$.

receptores que trabajan en ese rango por lo que ésta observación es técnicamente realizable.

Teniendo en cuenta las reglas de selección ($\Delta M = 0, \pm 1$, con $0 \rightarrow 0$ prohibida), se esperan seis componentes Zeeman (ver fig. 3.4). Las componentes con $\Delta M = \pm 1$ son las ya citadas $\sigma\pm$, y aquellas con $\Delta M = 0$ son las π . Como ya se apuntó, las componentes π aparecen por interacción del gas con radiación linealmente polarizada en la dirección del campo geomagnético, mientras que las $\sigma\pm$ son excitadas por un vector magnético asociado a la onda que está circularmente polarizado a derechas o izquierdas en el plano perpendicular al campo geomagnético. Por tanto, esperamos ver en nuestras observaciones que, dependiendo de la orientación de la polarización del receptor y de la dirección de observación, el perfil de la línea sea diferente.

3.1.2 Instrumentación y observaciones

Las observaciones se realizaron entre el 14 y el 19 de Enero de 1995 con el telescopio milimétrico POM-2 (*Castets et al.*, 1988 [16]), situado en Plateau de Bure (Alpes Franceses) a 2550 m de altura en la posición 44:38:02.00 N, 5:54:28.50 E. Este telescopio está equipado con un receptor SIS que da una temperatura de ruido en doble banda de 65 ± 10 K. Sin embargo, en el momento de las observaciones un problema puntual degradó dicha temperatura hasta 120 K. El coeficiente de acoplamiento al cielo (η_f , definido en la ecuación 2.4) vale 0.82. Dependiendo de las condiciones

meteorológicas durante las observaciones, la temperatura de ruido total de sistema osciló en el rango 600 to 800 K y la la transmisión del ci fue de entre 0.78 y 0.88 hacia zénit. Como se trata de un instrumento dedicado a observaciones astrofísicas, las observaciones son automáticamente corregidas como si las líneas observadas vienesen del exterior de la atmósfera. Por ello la corrección por la opacidad del cielo fue eliminada para recuperar la T_A correcta de la línea atmosférica observada a nivel de la superficie para la elevación correspondiente. El contenido integrado de vapor de agua precipitable hacia el zénit se estimó entre 1.3 y 2.8 mm durante el periodo de observaciones. Estas se realizaron en modo diferencial, substrayendo un espectro de referencia a la señal. Esto se hizo cambiando la frecuencia del receptor para desplazar el centro de la línea dentro o incluso fuera del rango del espectrómetro, el cual era un autocorrelador que fue usado en diferentes resoluciones: 39, 78 and 156 kHz con una banda total de 4.53, 9.06 y 36.25 MHz respectivamente. El nivel de ruido en los espectros obtenidos fue de entre unos 70 mK y 150 mK dependiendo de la resolución y tiempo de integración usados. Debido a que la anchura de la línea observada es mayor que los desplazamientos en frecuencia en el procedimiento de observación de conmutación en frecuencia, el nivel cero en el espectro no se puede dar con gran precisión ya que la influencia de las alas de línea en la toma de referencia no se conoce bien. Sin embargo, esto no es un problema crucial en nuestro proyecto ya que nosotros estamos interesados en verificar de forma general la concordancia entre el perfil de línea observado y simulado. La comparación cuantitativa de la intensidad total no es posible.

3.1.3 Predicciones y resultados

Las frecuencias centrales de cada componente Zeeman se obtienen a partir de las posiciones de los subniveles de energía según la ecuación 3.22. En el caso de la línea que nos ocupa, el factor:

$$[J(J+1) + S(S+1) - N(N+1)]/J(J+1)$$

es igual a -1 para el nivel superior (2_1), y 2 para el inferior (0_1). Esto significa que las frecuencias de las transiciones Zeeman vendrán dadas, en nuestro caso, por:

$$\Delta\nu(GHz) = 14.015 \cdot 10^{-6} H_{\mu T}(M_u + 2M_l) \quad (3.26)$$

El diagrama de niveles de energía y la identificación de las diferentes componentes

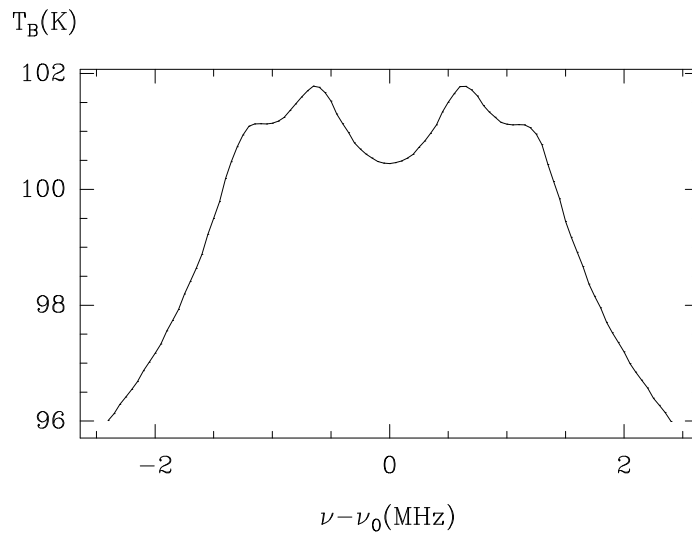


FIG. 3.5 - Simulación del perfil de la línea $2_1 \rightarrow 0_1$ del $^{16}\text{O}^{18}\text{O}$ para una dirección de observación prácticamente paralela al campo geomagnético sobre el Plateau de Bure. En éste caso solo se ven claramente dos componentes (σ) Zeeman. Las otras dos también están presentes pero menos evidentes.

Zeeman puede verse en la figura 3.4 Sabemos que el campo geomagnético tiene una intensidad, para alturas entre 0 y 100 km, que varía entre $22\text{-}65 \mu\text{T}$ según la latitud. Por tanto la ecuación 3.26 nos da que la subestructura Zeeman aparece en una región de algunos MHz alrededor de la frecuencia de la resonancia rotacional. Por esta razón debemos usar en estas observaciones unas resoluciones en frecuencia muy altas (de 40 a 20 kHz) para ver claramente la estructura que estamos buscando.

Al elegir una dirección de observación paralela al campo magnético, la matriz de refractividad en la base de polarizaciones lineales (\vec{H}, \vec{V}) se simplifica de forma que sólo las 4 transiciones $\sigma \pm$ van a aparecer (véase la ecuación 3.25). La figura 3.5 muestra las simulaciones para una dirección de observación prácticamente paralela al campo geomagnético sobre el Plateau de Bure. Hay dos picos interiores claramente visibles y dos estructuras planas exteriores que se asocian a otras dos componentes σ . Pese a que las fuerzas de oscilador son iguales para las cuatro componentes σ , las dos más externas aparecen a un nivel de emisión total más débil debido a la forma general de la línea para las capas más bajas. Hemos tomado dos espectros hacia esa dirección con diferentes anchuras de banda y resoluciones espectrales, que se muestran en la figura 3.6. La primera (banda más ancha) muestra la existencia de dos picos, lo cual ya evidencia la subestructura Zeeman. Sin embargo, no hay suficiente resolución espectral para ver la estructura plana asociada a las dos sublíneas σ más externas. El segundo espectro, con una resolución mucho mayor, muestra un acuerdo muy

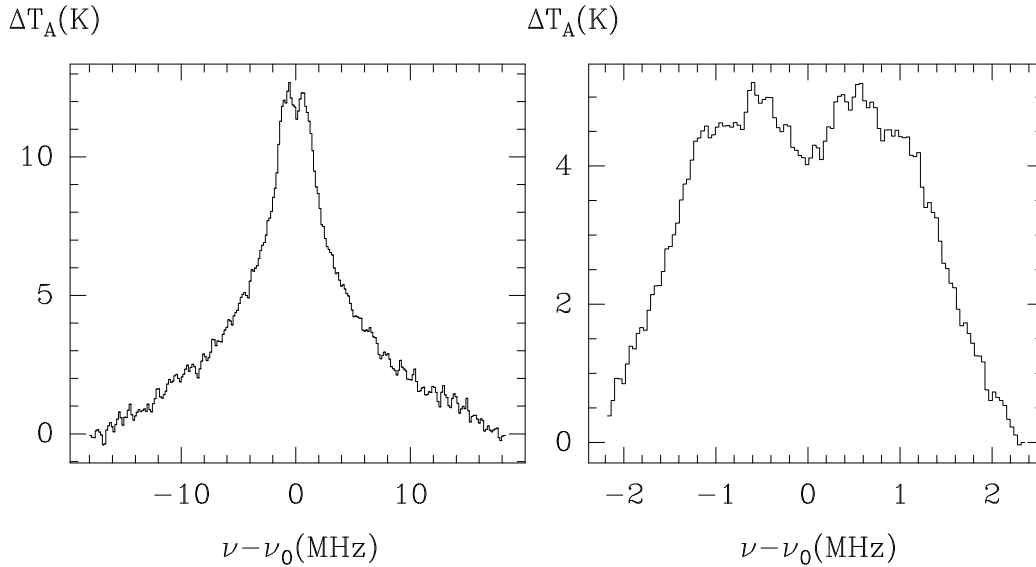


FIG. 3.6 - Dos observaciones realizadas con el radiotelescopio milimétrico POM-2 en la dirección $AZM=-2^\circ$ ($0=Sud$, $90=Est$) y $ELV=59^\circ$, utilizando diferentes anchuras de banda y resoluciones espectrales.

bueno con el perfil de línea simulado.

Para detectar las componentes π , apuntamos el telescopio en la dirección perpendicular al campo geomagnético ($AZM=178^\circ$, $ELV=27^\circ$). La ecuación 3.25 nos muestra que, en éste caso, las componentes π aparecen en la polarización vertical en el cielo. Sin embargo, la radiación alcanza el receptor de POM-2, el cual es sensible a una polarización paralela al suelo (horizontal), después de una reflexión sobre la parte cuasi-óptica del sistema que se desplaza rígidamente en elevación. Debido a esto, la polarización que el receptor ve en el cielo cambia desde HL cuando la elevación es 0° a VL para $ELV=90^\circ$. Es necesario, por tanto, aplicar una matriz de rotación de 27° a la matriz de refractividad para obtener el perfil de línea esperado para esta observación (también se llevó a cabo una rotación análoga de 59° para los cálculos presentados en la figura 3.5, sin embargo en éste caso el efecto es casi imperceptible ya que la matriz de refractividad en la base $[\vec{H}, \vec{V}]$ no cambia cuando sólo hay emisión σ).

Como 27° es una elevación muy baja, el receptor ve principalmente la polarización horizontal en el cielo de forma que las componentes π no aparecen con claridad. Se ven, sin embargo, unas ligeras distorsiones en las alas de la línea, que están asociadas precisamente a las componentes π . En esta dirección, las cuatro componentes σ

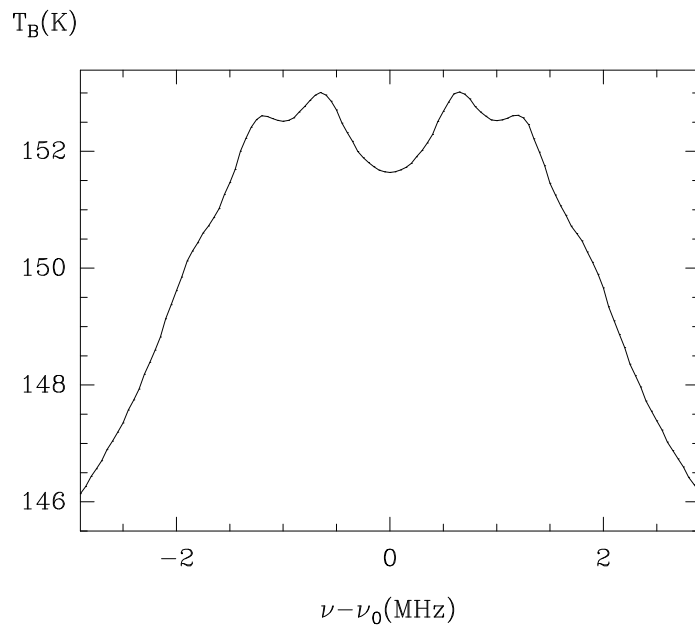


FIG. 3.7 - Simulación del perfil de la línea de la que nos ocupamos en ésta sección en el caso en de observación en dirección prácticamente perpendicular al campo geomagnético en la región de Plateau de Bure. Se pueden identificar con claridad las cuatro componentes σ . Una leve deformación en las alas de la línea se debe a las componentes π .

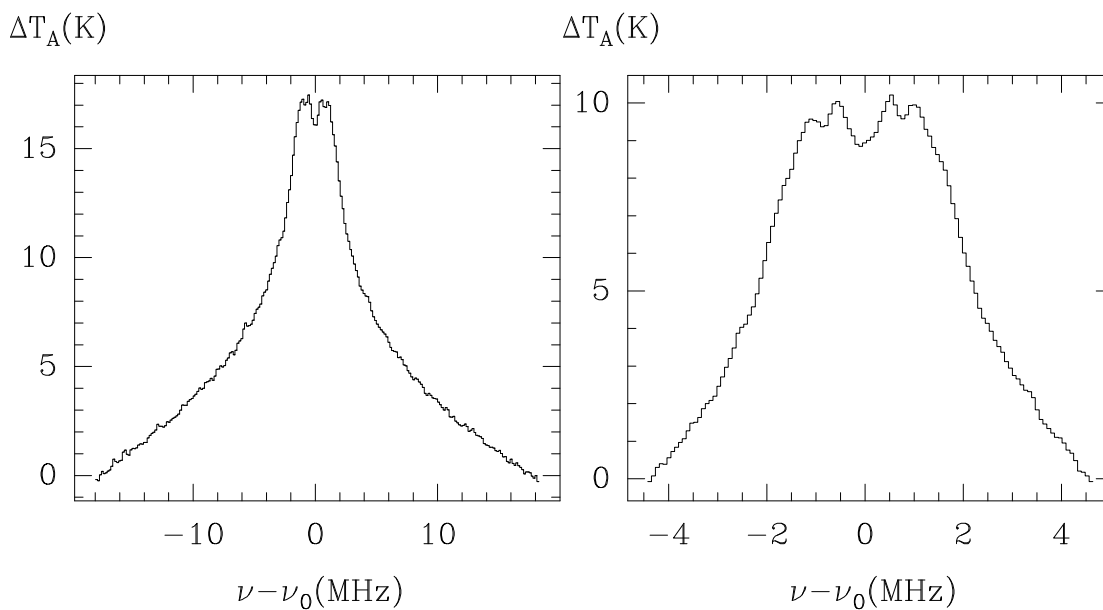


FIG. 3.8 - Las observaciones correspondientes al caso presentado en la figura precedente concuerdan muy bien con el modelo.

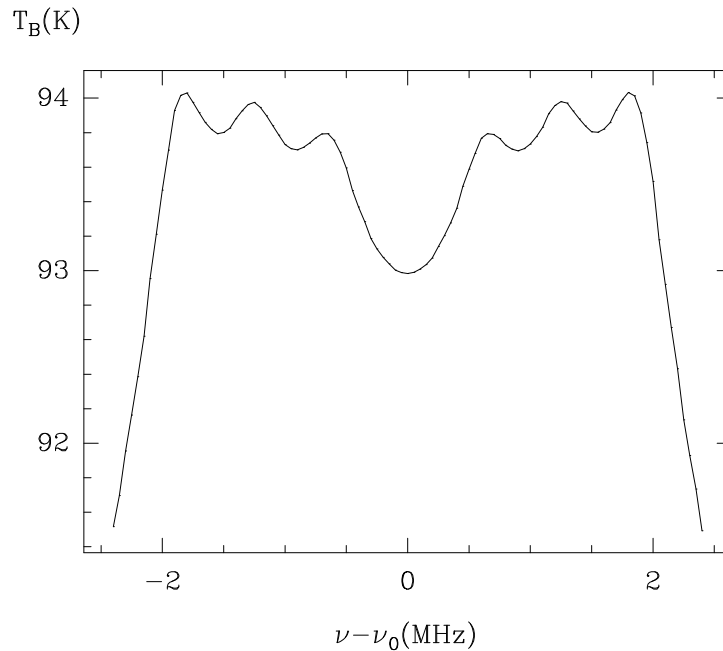


FIG. 3.9 - Si tenemos en cuenta la polarización proyectada en el cielo a la que es sensible el receptor del radiotelescopio POM-2, la dirección $AZM=178^\circ$, $ELV=70^\circ$ es adecuada para detectar claramente las componentes π de la línea de $^{16}O^{18}O$ a 234 GHz, como se puede ver en éste cálculo.

aparecen claramente en el modelo ya que su matriz de temperatura de brillo tiene una importante proyección en la polarización \vec{H} , lo que ha sido confirmado por las observaciones (fig. 3.8).

Para detectar claramente las componentes π , apuntamos el telescopio hacia el mismo azimut pero a una elevación mayor (70°) para tener más sensibilidad a la polarización vertical. La detección de emisión π debe ser más fácil a pesar de que esta es más débil debido al hecho de que no se está apuntando perpendicularmente al campo geomagnético local.

Las simulaciones (fig. 3.10) muestran que las seis sublíneas aparecen, pero con un bajo contraste. Si usamos entonces el mismo tiempo de integración que en las otras observaciones, será muy difícil distinguir los picos por encima del nivel de ruido. Sin embargo, el perfil de la línea aparecerá más ancho que en los casos anteriores debido, precisamente, a la contribución de las componentes π externas. De hecho, si superponemos las observaciones a 27° y 70° de elevación, corrigiendo el efecto de las diferentes masas de aire, vemos una clara diferencia debido a la emisión π (fig. 3.11).

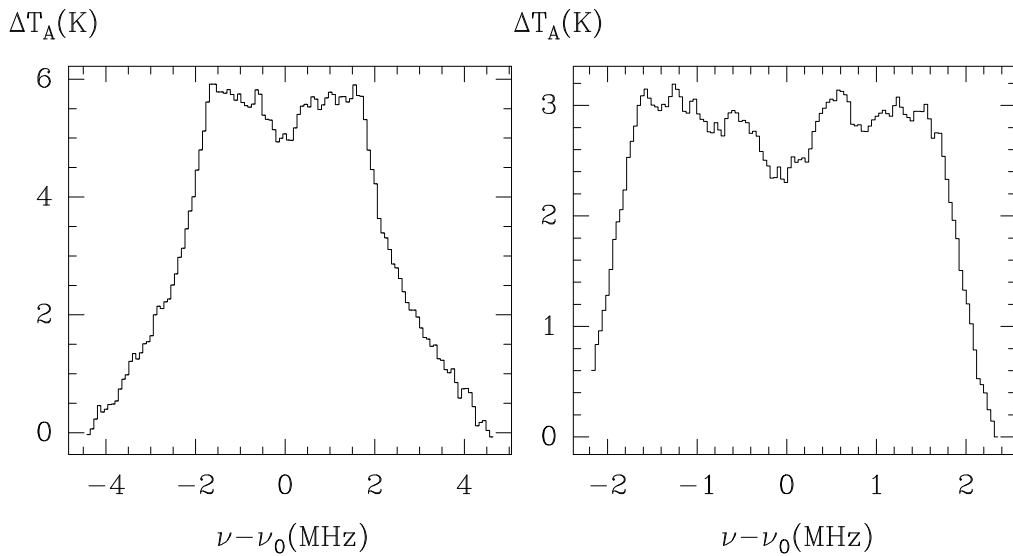


FIG. 3.10 - Estas observaciones muestran un perfil de línea más ancho que en los casos anteriores, sin duda debido a la detección de las componentes externas π (ver la figura siguiente).

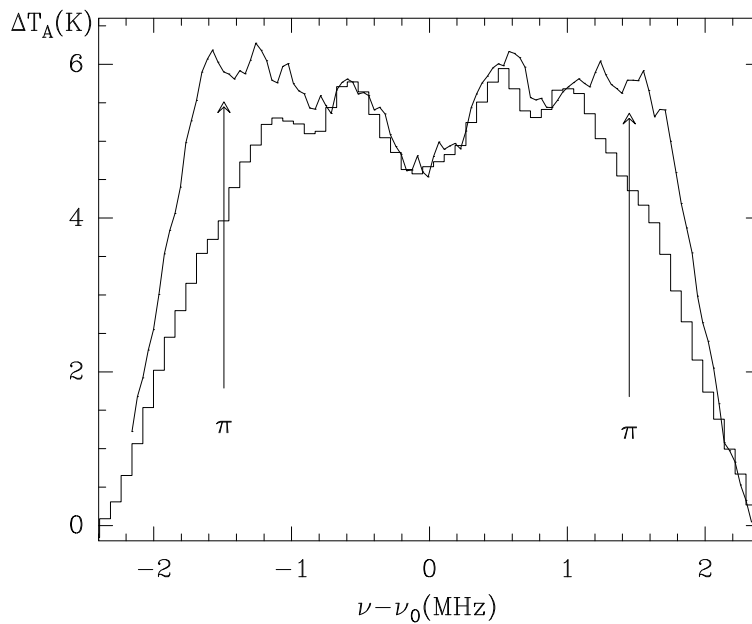


FIG. 3.11 - La comparación, después de corregir el efecto de la masa de aire, entre dos observaciones con el azimut del polo norte magnético pero a elevaciones de 27° y 70° prueba que las componentes π están asociadas con la polarización vertical en el cielo para éste azimut.

Para los tres casos presentados aquí, el ángulo entre la dirección de propagación y el campo geomagnético varía, para la región atmosférica en la que se origina la radiación detectada (en el modelo tomamos 0-130 km ya que los efectos ionosféricos siguen una ley ν^{-2} y se pueden despreciar para $\nu > 3$ GHz). Sin embargo, las variaciones son pequeñas: para el caso $\vec{z} \perp \vec{B}$, éste ángulo cambia desde 87.8° a 130 km hasta 91.6° a 2.5 km según el modelo de campo geomagnético de *Barracough* [5]. Para el caso "paralelo", ángulo varía entre 1.3° y -0.1° . Finalmente, la variación es entre 48.9° y 49.5° para la observación a $ELV=70^\circ$.

Un hecho que resalta al comparar cada observación con el modelo es un ligero desacuerdo sistemático entre la posición esperada de los picos y la observada. Para el espectro de gran calidad tomado en el caso "perpendicular" con una resolución de 84 kHz (figura 3.7 hemos calculado, a partir de la ecuación 3.26, que el valor promedio de la densidad de flujo magnético sobre Plateau de Bure es de $\sim 40 \mu T$, lo cual representa una diferencia de alrededor del 10% con respecto al modelo estándar utilizado ($\sim 44 \mu T$). Esta diferencia puede ser demasiado grande si consideramos las desviaciones respecto a ese modelo que son posibles: efectos ionosféricos, cambios en el campo magnético de la Tierra (del orden de 50 nT/año) desde 1980 (año de las medidas en las que se basa el modelo utilizado), y desviaciones locales de éste modelo, que describe el campo magnético promediado sobre escalas de 1000 km. Sin embargo, si tenemos en cuenta los errores en nuestra determinación de \vec{B} , debidos al nivel de ruido y resolución espectral, los resultados son coherentes.

Bergman (1992) [9] obtuvo un conjunto de espectros de la misma línea atmosférica (sin acompañarlos de una modelización) con el radiotelescopio milimétrico SEST situado en La Silla (Chile) en la posición geográfica 29:15:24 S, 70:43:48 O, y 2347 m de altura. La resolución en frecuencia de estas medidas fue de 100 kHz. El receptor de éste telescopio se mueve solidariamente con la estructura parabólica de forma que la polarización detectada en el cielo es siempre lineal vertical. De esta forma, a partir de los cálculos de nuestro modelo, la observación hacia la dirección perpendicular al campo geomagnético debe mostrar claramente las componentes π . Esto se confirma en la observación *rès clairement les composantes π* . Ceci est confirmé par l'observation (ver la referencia [9]). Las componentes σ no se detectaron por estar contenidas en un plano completamente perpendicular a la polarización de observación. Al observar en la dirección paralela al campo magnético se ve la emisión de las componentes σ , pero estas no son individualmente resueltas. Al impedir la falta de resolución espectral y el ruido observacional fijar la posición central de las

sublíneas, no se puede calcular con gran precisión la intensidad promedio del campo geomagnético sobre La Silla. No obstante, las medidas son compatibles con un valor de $\sim 25 \mu T$ y un error estimado del 10%, lo cual está de acuerdo con el valor dado por el modelo de campo geomagnético que hemos usado [5].

3.1.4 Posibilidades de utilización de otras líneas en el trabajo de validación

La validación del modelo presentado en la sección 3.1 se puede completar con medidas desde la superficie terrestre por otros telescopios situados en lugares diferentes, con el objetivo de observar la misma línea u otras pertenecientes al oxígeno molecular isotópico. Por ejemplo, se hizo un intento con POM-2 para observar la componente más intensa de la estructura hiperfina (a causa del espín nuclear 1/2 del núcleo de ^{17}O) de la transición $2_1 \rightarrow 0_1$ de $^{17}\text{O}^{16}\text{O}$, situada a 239.9756 GHz (intensidad relativa respecto a la suma de las intensidades de las componentes hiperfinas: 0.1592). Esta línea es unas 36 veces más débil que la línea de $^{18}\text{O}^{16}\text{O}$ a 234 GHz debido también a la relación de abundancias $^{17}\text{O}/^{18}\text{O}$. Para llegar por tanto a la misma relación señal-ruido se necesitará un tiempo de integración del orden de 1000 veces mayor. En esas condiciones es bastante difícil obtener un espectro con POM-2 que permita detectar la estructura Zeeman utilizando esta línea. Es mejor utilizar por tanto las líneas del isótopo $^{18}\text{O}^{16}\text{O}$. A frecuencias más allá de la de la línea observada en este trabajo, existe la posibilidad de observar las resonancias a 298.4731, 345.0177, 401.7397 y 463.7781 GHz de $^{18}\text{O}^{16}\text{O}$, lo que en principio es posible con el telescopio submilimétrico CSO situado en la cima de Mauna Kea (Hawaii). En la figura 3.12 presentamos las predicciones del perfil de esas cuatro líneas en el caso de una observación perpendicular al campo magnético local en Mauna Kea.

3.1.5 Aplicaciones

El trabajo presentado en este apartado ha combinado el desarrollo de un modelo de predicción de perfiles de líneas de emisión rotacionales de $^{16}\text{O}_2$ y $^{16}\text{O}^{18}\text{O}$ y la comparación de sus resultados con medidas reales. Así, este trabajo ha supuesto un test efectivo de un modelo que debe ser usado para el tratamiento de los datos procedentes de diferentes sistemas futuros que estudiarán la temperatura y presión mediante medidas de diferentes líneas de O_2 desde 60 GHz hasta el submilimétrico.

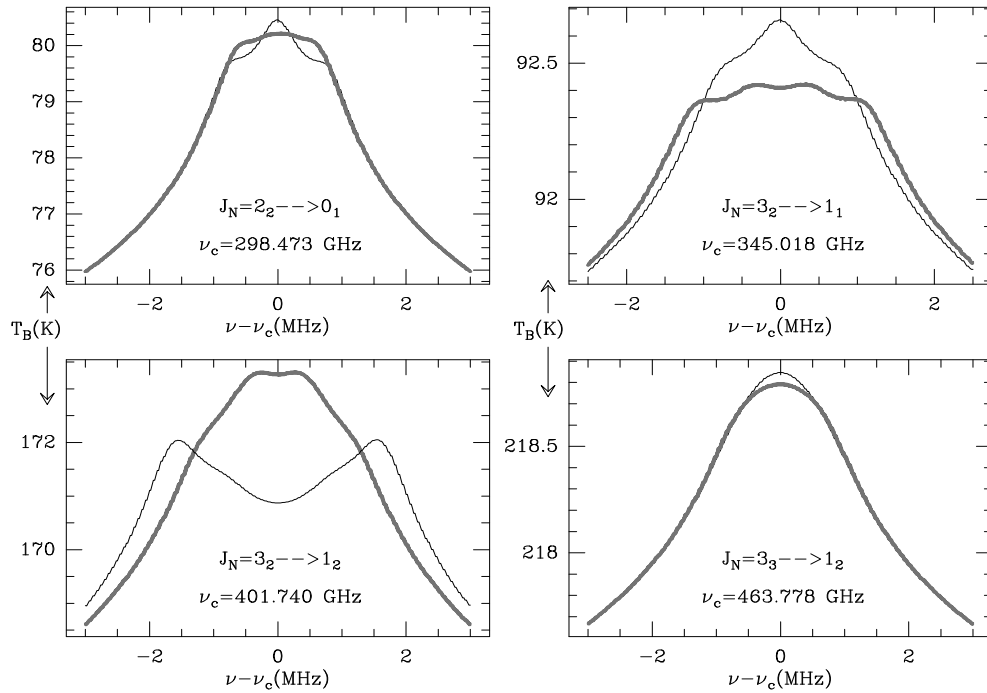


FIG. 3.12 - Simulaciones del perfil de emisión de cuatro líneas atmosféricas de $^{18}O^{16}O$, situadas entre 298 y 464 GHz, para dar una idea de que señal se puede esperar observar en la posición del telescopio submilimétrico CSO. Estas simulaciones corresponden a una dirección de observación perpendicular al campo magnético local. Para cada caso damos las temperaturas de brillo en polarización lineal horizontal ($\perp \vec{B}$) y vertical ($\parallel \vec{B}$).

El primer tipo de instrumentos realizará medidas radiométricas en, típicamente, una quincena de canales alrededor de una fuerte resonancia de $^{16}O_2$ en la banda de 60 GHz. Se trata de instrumentos sobre satélite que hacen barridos con ángulos relativamente pequeños respecto al nódido, de forma que su línea de mirada intersecta la superficie terrestre. Este tipo de sistemas se verán en el capítulo 4. Algunos de estos canales deben situarse a frecuencias muy próximas de la resonancia (menos de 2 MHz de distancia) para ser sensibles a alturas por encima de 50 km, de forma que las medidas se verán afectadas por el efecto Zeeman. Esto se discutirá en detalle en 4.3.

Por otro lado tenemos los satélites que van a realizar sondeos al limbo atmosférico para medir la emisión de los gases atmosféricos. Medidas espectroscópicas en líneas milimétricas y submilimétricas se preveen para estudiar el perfil vertical de presión y temperatura. Cuando el punto de tangencia sobrepasa los 50 km el efecto Zeeman debe ser tenido en cuenta en los cálculos. Este caso será tratado en detalle en el capítulo 5.

3.2 Primera detección desde la superficie terrestre de la emisión a 183 GHz de H₂O en la estratosfera y mesosfera

3.2.1 Carácter innovador de estas observaciones

El vapor de agua es una molécula que tiene cierta importancia en la estratosfera y mesosfera debido fundamentalmente a dos razones: es una fuente importante de radicales, así como un trazador de la dinámica estratosférica a causa de su tiempo de vida fotoquímico relativamente largo (varios meses en esas regiones). En la alta estratosfera y baja mesosfera, el vapor de agua es producido principalmente a partir de la oxidación del CH₄ y es destruido químicamente por una lenta reacción con O(¹D) que produce OH. Esto explica el largo tiempo de vida al que aludíamos con anterioridad y el porqué los mecanismos de transporte juegan un papel importante en la distribución final (*Russell*, 1987 [80]; *Le Texier et al.*, 1988 [85]).

En el rango milimétrico y desde la superficie terrestre, las medidas del vapor de agua estratosférico y mesosférico se han efectuado mediante espectroscopía de una línea relativamente débil (con emisión troposférica no saturada) a 22.2351 GHz (6_{1,6} → 5_{2,3}) [*Tsou et al.*, 1988 [88]; *Olivero et al.*, 1986 [63]; y *Bevilacqua et al.*, 1990 [10]]. Esta elección está justificada por el hecho de que la señal originada por encima de la troposfera es transmitida por ésta y por ello esas capas pueden ser estudiadas desde el suelo. La emisión típica de esta línea (ver sus parámetros espectroscópicos en la tabla

reftb:ensa-agua) es, por ejemplo, unas 100 veces más débil que las líneas mesosféricas de CO a 115 y 230 GHz, lo cual hace que los tiempos de integración sean muy largos (varias horas) para obtener una correcta relación señal sobre ruido que permita el cálculo del perfil de H₂O con garantías. La línea 3_{1,3} → 2_{2,0} a 183 GHz, por su lado, tiene una intensidad $S[300K]=2.254 \cdot 10^{-12}$ cm²·Hz, que es ~200 veces mayor que la de la línea a 22 GHz. En la mayoría de situaciones, la abundancia de vapor de agua en la troposfera por encima de un lugar cualquiera es tan grande que, bajo condiciones normales de observación, la transmisión troposférica es nula en una región de hasta de varios GHz en torno a la frecuencia de resonancia. Por ello hasta la fecha las únicas medidas de la emisión estratosférica y mesosférica en esta línea se han hecho con un instrumento embarcado en un avión a una altura de 10 km. (*Peter y Künzi*, 1988 [68]). Sin embargo, partiendo de cálculos realizados

con la primera versión de ATM *Cernicharo et al.* (1990) [19] pudieron afirmar que ésta línea podría presentar una transmisión troposférica bastante importante en las condiciones atmosféricas que se alcanzan a veces en la Sierra Nevada en Granada. La base de datos meteorológicos del observatorio del IRAM muestra que se producen durante el invierno condiciones en las que la columna de vapor de agua por encima del emplazamiento del telescopio es inferior a 0.5 mm. Esto permite el tipo de estudio que nos ocupa en ésta sección así como otras observaciones astrofísicas que en caso contrario son imposibles (consultar la referencia de *Cernicharo* citada anteriormente). La estadística de esta estación meteorológica da para el periodo 1984-1990 unas cantidades integradas de vapor de agua inferiores a 2 mm durante un 18% del tiempo de invierno. La tabla 3.2 muestra que, efectivamente, bajo esas condiciones existe una transmisión troposférica significativa de forma que puede esperarse el estudio del perfil de vapor de agua por encima de unos ~ 20 km de altura mediante observaciones desde tierra a 183 GHz. La gran ventaja, cuando se dan estas buenas condiciones de observación, respecto a las medidas a 22 GHz es que la emisión que viene de la estratosfera es mucho más intensa de forma que los tiempos de integración para alcanzar una relación señal sobre ruido aceptable se reducen a algunos segundos.

En éste trabajo se presentan las primeras medidas desde Tierra de la emisión estratosférica y mesosférica del vapor de agua a 183 GHz. En las alas de ésta línea, a frecuencias más alejadas de la resonancia, *Schaerer et Wilheit* (1979) ya habían propuesto el realizar medidas desde el suelo para estimar la distribución del agua troposférica, lo que fué llevado a la práctica por *Askne et Göran Skoog*, (1983) [3].

3.2.2 Instrumentación y condiciones de observación

Las observaciones que presento aquí fueron realizadas en Enero de 1991 y Enero de 1994 con el radiotelescopio de 30 metros del IRAM situado en las inmediaciones del Pico de Veleta (Granada) a 2850 metros de altura. Las observaciones se realizaron al mismo tiempo que se pretendía detectar la emisión maser a 183 GHz en diversas fuentes interestelares y circumstelares (*Cernicharo et al.*, 1990 [19]), lo cual sólo puede conseguirse, asimismo, cuando la troposfera presenta una cierta transmisión. La medida de la emisión absoluta sólo es posible gracias al uso de una calibración absoluta con la ayuda de dos absorbentes a temperaturas diferentes (ambiente y N_2 líquido). Se usó un receptor SIS y dos espectrómetros: 512x1MHz y 256X100kHz.

cantidad integrada de H ₂ O (mm) 2.9km-∞	Transm. atmosférica			
	al cénit ($\nu_c = 183.310$ GHz)			
	$\nu_c - 0$ MHz	$\nu_c - 50$ MHz	$\nu_c - 100$ MHz	$\nu_c - 150$ MHz
2	0.013	0.014	0.015	0.015
1	0.103	0.117	0.120	0.123
0.5	0.416	0.465	0.472	0.479
0.3	0.557	0.623	0.631	0.637
0.1	0.744	0.830	0.840	0.846
4km-∞	$\nu_c - 0$ MHz	$\nu_c - 50$ MHz	$\nu_c - 100$ MHz	$\nu_c - 150$ MHz
1.154	0.047	0.053	0.055	0.057
0.577	0.201	0.226	0.230	0.236
0.289	0.416	0.465	0.472	0.479
0.173	0.557	0.623	0.631	0.637
0.058	0.744	0.830	0.840	0.846

TAB. 3.2 - Transmisión atmosférica hacia el Zénit para la línea $3_{1,3} \rightarrow 2_{2,0}$ de H₂O para dos puntos de observación: 2.9 y 4 km del altura y para varias cantidades integradas de H₂O por encima de 2.9 km. El perfil de temperatura y presión asumido en los cálculos es el U. S. Standard Atm. 1962 correspondiente a invierno para 45° de latitud. El perfil de vapor de agua se supuso exponencialmente decreciente con una escala de alturas de 2 km. La espectroscopía de O₂ y H₂O corresponde al modelo de Liebe (1993) [53].

Como el sistema es de doble banda, tanto la temperatura ambiente como las temperaturas de brillo que llegan por las dos bandas forman la temperatura de antena medida hacia el cielo según la ecuación 2.4.

En Enero de 1991, las observaciones se realizaron con la línea del vapor de agua en la banda inferior del receptor, con un acoplamiento al cielo (η_f) de 0.9 y una relación de ganancias de las bandas señal e imagen (g_S/g_I) de 4. Antes de realizar la inversión con el algoritmo descrito en 2.4, los espectros de Enero 1991 fueron simetrizados (se sumó la señal procedente de frecuencias equidistantes a la resonancia, con peso 1/2) para incrementar la relación señal sobre ruido así como para eliminar efectos lineales en la línea de base. La banda de frecuencias que quedó tras esta operación fue diferente para cada medida ya que la línea atmosférica estaba algo desplazada del centro del espectrómetro al estar éste centrado sobre una fuente astrofísica que

se observaba simultáneamente (la diferencia de frecuencias se debe al efecto Doppler y a la velocidad relativa de la fuente respecto a la Tierra).

En Enero de 1994, las observaciones se hicieron con la línea del agua en la banda superior del receptor, siendo el acoplamiento al cielo de 0.9 y $\frac{G_I}{G_S}$ igual a 1.3. La frecuencia intermedia del sistema es de 3.92 GHz de forma que la banda imagen en esta configuración de observación está centrada en torno a 175.47 GHz. Como consecuencia, una línea de ozono a 175.446 GHz ($18_{4,14} \rightarrow 19_{3,17}$) contribuyó en la banda imagen y debió ser tenida en cuenta a la hora del análisis. Asumimos para ello el perfil estándar de ozono dado por la *U.S. Std. Atm. (1976)* [92] para invierno en latitudes medias. Para reducir los errores que pudiesen venir de usar esta información como “verdadero perfil de ozono”, hemos ajustado solamente el ala azul de la línea del vapor de agua, que está mucho menos contaminada por la emisión del ozono. Asimismo, los datos brutos de Enero de 1994 muestran los efectos de ondas estacionarias que se forman entre diferentes espejos de la parte cuasi óptica del sistema. El periodo de éste efecto en los espectros es de unos 20 MHz y su amplitud ~ 1 K. Un análisis mediante transformada de Fourier permite eliminar esas ondas estacionarias. En la figura 3.13 podemos ver ejemplos de espectros obtenidos después del tratamiento previo de los datos que acabamos de describir. Los ajustes realizados por el programa de inversión de espectros están superpuestos en la misma figura.

3.2.3 Análisis de los datos

El análisis de las observaciones espectroscópicas y el cálculo de las abundancias de vapor de agua en ciertas capas (cuya posición y espesor están determinados por la resolución en frecuencias y la banda total del espectro) se lleva a cabo, como se vio en 2.4, mediante un método de ajuste general no lineal por mínimos cuadrados. Las capas de las que se puede extraer información se fijan tras un análisis previo según el procedimiento descrito en 2.4.1. La primera etapa en nuestro análisis es calcular el conjunto de funciones peso monocromáticas (ecuación 2.39) para el H_2O correspondientes a las frecuencias individuales de los espectros. La figura 3.14 muestra dichas funciones normalizadas a la unidad para las observaciones de 1991 que aparecen en la figura 3.13. En éste cálculo se adoptó el perfil atmosférico *U. S. Standard Atm. (1976)* [92] junto a una distribución vertical de vapor de agua exponencialmente decreciente en la estratosfera con una escala de alturas de 2 km, siendo 0.3 mm la cantidad integrada de agua precipitable por encima del lugar de observación, lo

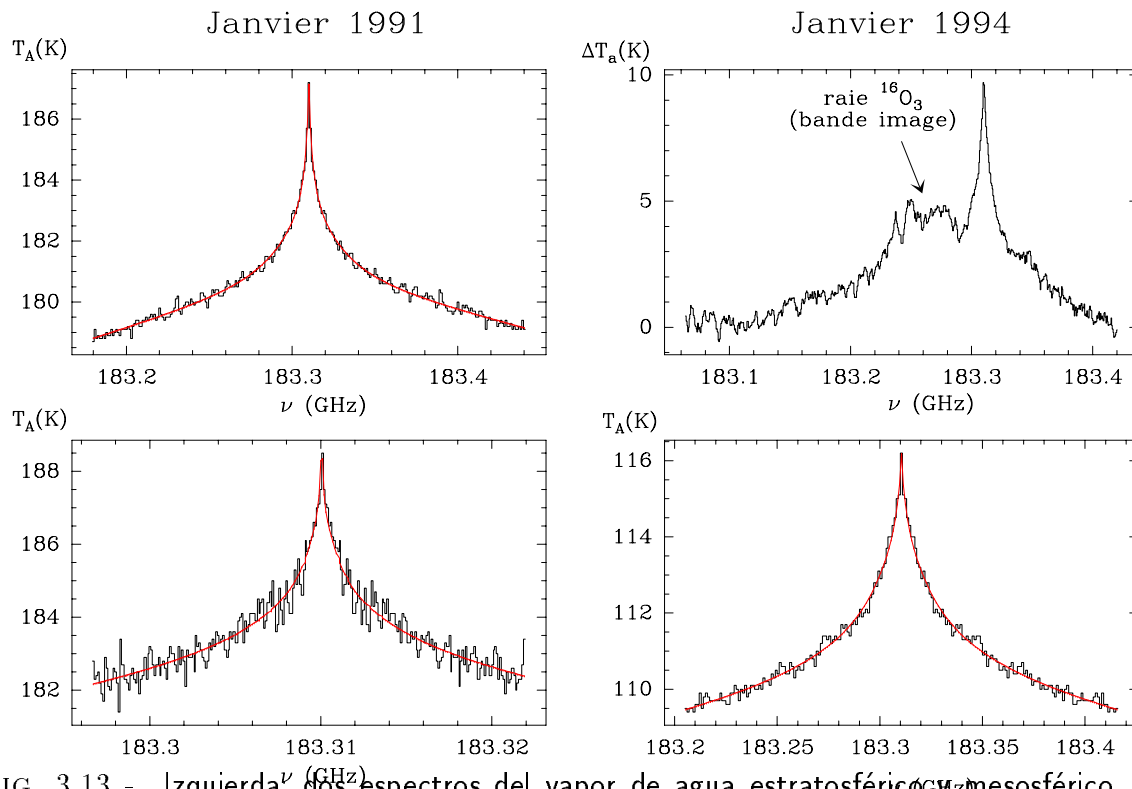


FIG. 3.13 - Izquierda: dos espectros del vapor de agua estratosférico y mesosférico tomados en Enero de 1991, junto a los ajustes obtenidos tras el análisis de los datos. Derecha, arriba: un espectro tomado en Enero de 1994 que muestra la contaminación debido a una línea de ozono que entra por la banda imagen del receptor. Derecha, abajo: suma de varios espectros tomados a la misma elevación y ajuste obtenido por el algoritmo de inversión (sólo en el ala azul).

que corresponde aproximadamente a las condiciones reinantes durante las observaciones. Las funciones de sondeo óptimas se obtienen en la región central (50-60%) del rango en alturas cubierto por las funciones peso monocromáticas [10]. A partir del uso combinado de los dos espectrómetros usados en las observaciones de 1991 se obtienen las funciones de sondeo que se muestran igualmente en la figura 3.14. En el establecimiento de dichas funciones de sondeo usamos un valor del multiplicador de lagrange (γ , cuyo papel se vió en 2.4.1), que tiende a favorecer la precisión en las cantidades de vapor de agua calculadas en contra de la resolución vertical (ver tabla 3.3).

Las correlaciones entre estas funciones de sondeo para el análisis de las observaciones de 1991 son de 0.292 para $A_{59.5km}-A_{46.5km}$, 0.066 para $A_{59.5km}-A_{36km}$ y 0.191 for $A_{46.5km}-A_{36km}$. A partir de estas funciones de sondeo se fijan tres capas en las que el algoritmo de inversión usará la razón de mezcla del vapor de agua como parámetro

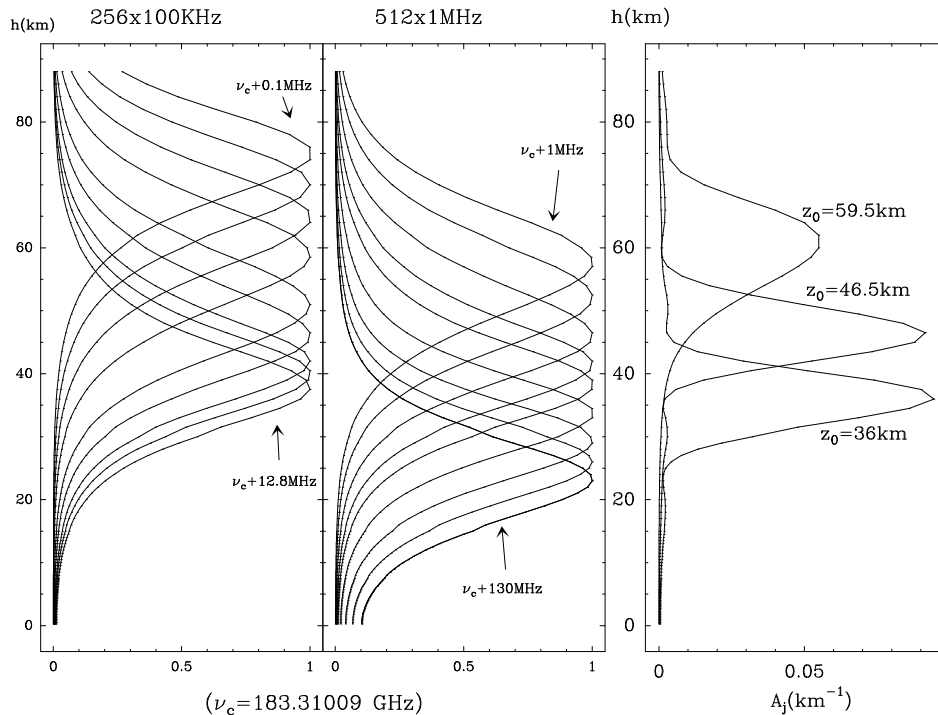


FIG. 3.14 - Funciones de peso monocromáticas de H₂O (normalizadas a la unidad en el máximo) correspondientes a los espectrómetros utilizados en las observaciones de Enero de 1991 junto a las funciones de sondeo calculadas a partir de ellas. Este análisis permite definir las capas donde la información sobre el vapor de agua puede ser derivado de forma óptima a partir de las observaciones.

libre: 31-41 km, 41-52 km y 52-67 km. Un preanálisis similar se realizó para las observaciones de Enero 1994. Para la que se muestra en la figura 3.13 se establece el uso de dos capas en la inversión: 33-44 km y 44-56 km, con una correlación entre las funciones de sondeo ($A_{38.5km} - A_{50km}$) de 0.236. Esta diferencia entre el número y la extensión vertical de las capas seleccionadas a la hora de analizar los datos correspondientes a 1991 y 1994 se debe a dos factores fáciles de entender: a) en 1994 sólo se usó un espectrómetro (512x1MHz), y b) la banda espectral total efectiva retenida varía de unas observaciones a otras debido principalmente a diferencias de centrado de la línea atmosférica. La tabla 3.3 muestra los parámetros correspondientes a éste preanálisis.

Una vez llevado a cabo éste análisis previo, las cantidades de vapor de agua en las capas seleccionadas se ajustan siguiendo el método descrito en 2.4. La cantidad troposférica integrada de vapor de agua juega igualmente como parámetro libre en el proceso para ajustar el nivel de temperatura de antena medida en los canales del espectrómetro 1x512MHz más alejados de la resonancia. Por encima de la troposfera se considera inicialmente una razón de mezcla constante de 2 ppmv que será recalculada, al hacer la inversión, en las capas a las que la sensibilidad es óptima

<i>Ene. 1991: 230x1MHz + 256x100kHz</i>				
z_0	capa (km)	mult. Lagr. γ ($K^2 cm^7$)	$ R_i(\text{capa}) $ ($K^{-1} cm^{-3}$)	$\rho_{H_2O}(\text{layer})$ (cm^{-3}) (para 2 ppmv)
36	31-41	10^{-16}	$7.75 \cdot 10^9$	$3.92 \cdot 10^{11}$
46.5	41-52	$5 \cdot 10^{-16}$	$2.88 \cdot 10^9$	$8.14 \cdot 10^{10}$
59.5	52-67	$5 \cdot 10^{-12}$	$5.58 \cdot 10^7$	$1.73 \cdot 10^{10}$
<i>Ene. 1994: 106x1MHz</i>				
z_0	capa (km)	γ ($K^2 cm^7$)	$ R_i(\text{capa}) $ ($K^{-1} cm^{-3}$)	$\rho_{H_2O}(\text{cpa})$ (cm^{-3}) (for 2 ppmv)
38.5	33-44	10^{-15}	$2.92 \cdot 10^9$	$2.77 \cdot 10^{11}$
50	44-56	$5 \cdot 10^{-16}$	$1.33 \cdot 10^9$	$5.18 \cdot 10^{10}$

TAB. 3.3 - Descripción de las capas seleccionadas para usar la cantidad de H_2O en ellas como parámetro libre en el algoritmo de inversión al analizar las observaciones la figura 3.13.

con el fin de ajustar correctamente la observación.

El perfil de línea del modelo de *Liebe et al.*, 1993 [53] es modificado a partir de ~ 60 km para tener en cuenta el perfil Doppler que empieza a dominar en esas regiones (*Rosenkranz* 1993 [78]).

La figura 3.13 muestra algunas observaciones, correspondientes a Enero de 1991 y Enero de 1994, después de un proceso de reducción previa de los datos brutos. Los ajustes obtenidos por el algoritmo de inversión se han superpuesto. Los perfiles de de H_2O que resultan de esos ajustes se muestran en la figura 3.15. Por otro lado la figura 3.15 nos muestra otras medidas realizadas en 1994 (de algo menor calidad debido a un tiempo de integración más corto).

A la hora de estos cálculos, las principales fuentes de error que afectan a las cantidades de vapor de agua calculadas son el ruido introducido por el sistema, la necesidad de adoptar una información a priori sobre el perfil de temperatura y presión, y, finalmente, ciertas incertidumbres en algunos parámetros instrumentales como el coeficiente de acoplo al cielo de la antena y las ganancias relativas de las dos bandas del receptor. La influencia de todo esto en nuestras se discute a continuación:

Errores debidos al uso de información a priori

Usando diferentes perfiles atmosféricos de temperatura y presión, representativos de situaciones muy diversas, como información a priori para el algoritmo de inversión, vemos que la incertidumbre ligada a éste factor en la determinación de la cantidad de vapor de agua en las capas bajo estudio es de alrededor del 10% en términos de razón de mezcla. Esto ocurre tanto para los datos de 1991 como para los correspondientes a 1994. El perfil asumido para el vapor de agua troposférico (exponencialmente decreciente con la altura) es una fuente de error menos importante ya que la contribución troposférica al perfil de línea que nosotros observamos en una anchura de banda de 200 MHz no es importante debido a las presiones relativamente altas reinantes por debajo de 15 km. Lo que sí influye en el nivel de emisión medido en los canales más externos es la cantidad troposférica integrada, la cual se usa como parámetro libre en el algoritmo de inversión.

Errores inducidos por el nivel de ruido en los espectros

Suponiendo la ausencia de correlación del ruido entre los canales del espectrómetro, hemos estimado el error que éste introduce en nuestros cálculos a partir del valor de $|R_i|$ correspondiente a las funciones de sondeo seleccionadas (véase la tabla 3.3). El método de estimación de errores se explicó en el apartado 2.4. El nivel típico de ruido en los espectros que mostramos en éste trabajo es 0.1-0.2 K lo cual provoca errores relativos en la estimación de $[H_2O]$ que no superan el 3% en el peor caso. Teniendo en cuenta la existencia de cierta correlación entre las funciones de sondeo de las capas consideradas (figura 3.14) estimamos que esto puede dar hasta un 10% de error en las razones de mezcla de H_2O calculadas para las dos épocas de observación. Si se fuerza al algoritmo de inversión a mejorar, por ejemplo, la resolución vertical de 10 to 8 km para la capa centrada a $z_0=36$ km al analizar el espectro de baja resolución de 1991 de la figura 3.13, esta fuente de error se multiplicaría por un factor de al menos 15 (ejemplos in *Bevilacqua y Olivero* (1988) [10]). Esto nos muestra la importancia de la correcta elección de la posición y extensión vertical de las capas para realizar la inversión de cada medida espectroscópica.

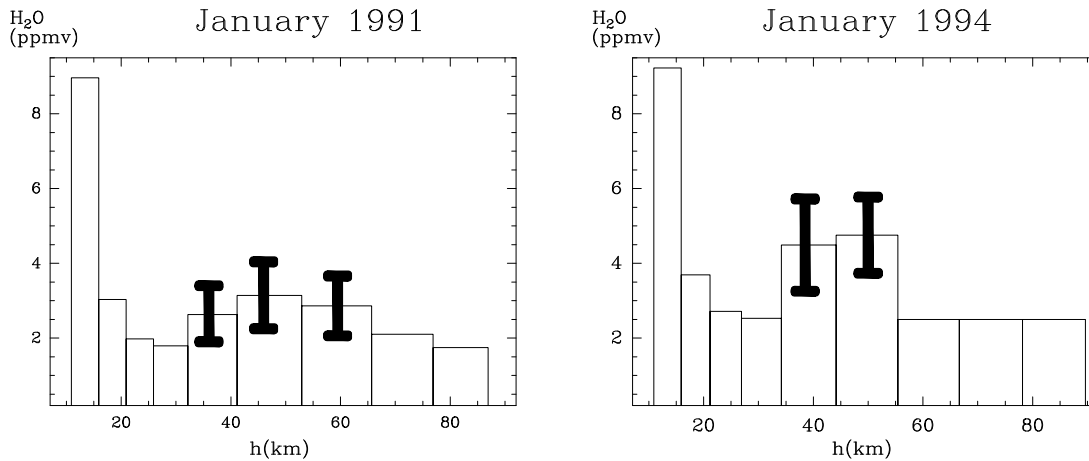


FIG. 3.15 - Perfiles de vapor de agua calculados a partir de las observaciones presentadas en la figure 3.13. Las capas donde hay barras de error corresponden a aquellas donde las que las medidas dan una mejor información sobre la razón de mezcla del vapor de agua según las funciones de sondeo. Las cantidades integradas de vapor de agua troposférico son de alrededor de 0.25 mm.

Errores debidos a incertidumbres en los parámetros instrumentales.

La fuente de errores más importante es la calibración de las medidas. Si suponemos una estabilidad en temperatura aceptable en los dos cuerpos negros de referencia usados para la calibración, el error se debe principalmente a la incertidumbre en el valor del coeficiente de acoplo al cielo de la antena, así como en las ganancias relativas de las bandas del receptor. Estos parámetros se conocen con una incertidumbre del $\sim 6\%$ para el radiotelescopio usado en estas observaciones. Para estimar el impacto de esto sobre la determinación del perfil de H_2O , hemos llevado a cabo los cálculos usando diferentes valores de η y G_S en el rango $\pm 3\%$ alrededor de los valores asumidos ($\eta=0.9$ and $G_S=0.8$). Para los espectros de 1991 de la figura 3.13, las cantidades calculadas de H_2O muestran, por esta razón, una incertidumbre dentro de $\pm 25\%$, mientras que para el espectro de 1994 en la misma figura tenemos $\pm 25\%$.

Asumiendo que el error total se obtiene como la raíz cuadrada de la suma de los cuadrados de los errores individuales, obtenemos las barras de error que vemos en la figura 3.15.

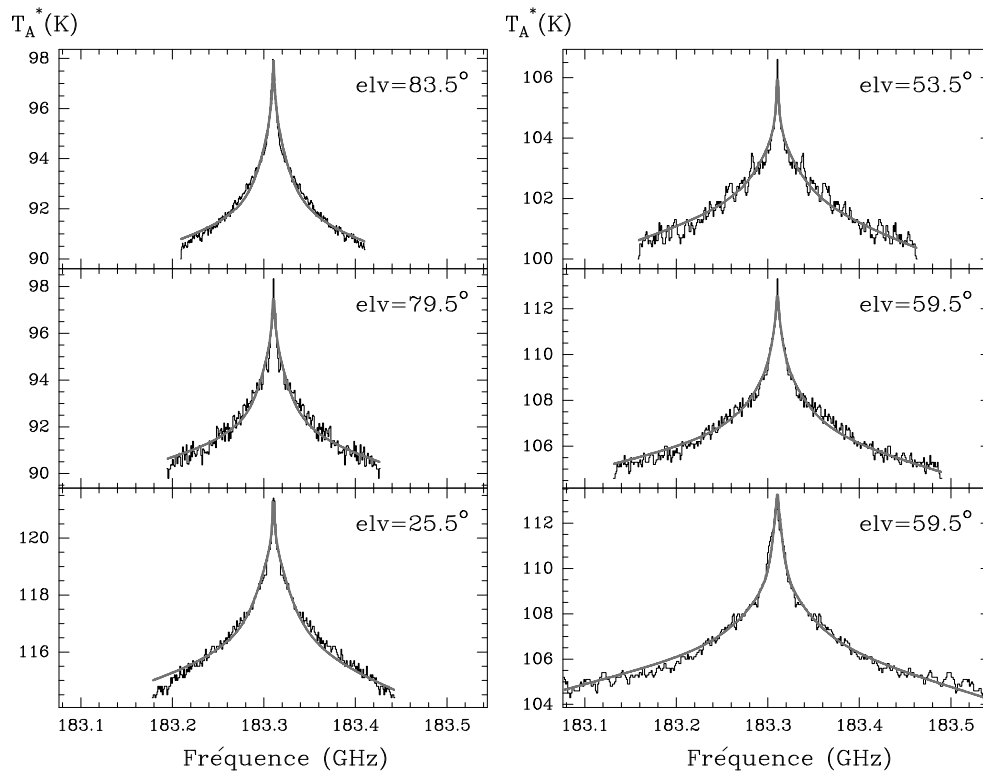


FIG. 3.16 - Otras observaciones de H₂O a 183 GHz realizadas en Enero de 1994 (tras reducción de los datos brutos) y ajustes obtenidos por el algoritmo de inversión de espectros. Los tiempos de integración oscilan entre 3 y 15 segundos. Las cantidades integradas de vapor de agua troposférico oscilaron según nuestras estimaciones entre 0.18 y 0.3 mm.

3.2.4 Comparación con otras medidas. Conclusiones

Los abundancias de vapor de agua obtenidas a partir de nuestras medidas entre unos 30 y 65 km son del orden de varias partes por millón en volumen, en concordancia con las medidas realizadas hasta la fecha a 22 GHz (*Tsou et al.* (1988) [88] y *Bevilacqua et al.* (1990) [11]). Los modelos fotoquímicos disponibles predicen cantidades del mismo orden (consúltese, por ejemplo, *Le Texier et al.* (1988) [85]). Una concordancia especialmente buena se ha encontrado entre nuestros resultados de 1994 y las medidas de *Peter y Künzi* [1988] [68] a 183 GHz, obtenidas mediante un sensor embarcado en un avión a un nivel de vuelo de 10 km. Estas medidas se efectuaron a altas latitudes en el hemisferio Norte. La latitud más baja en la que se obtuvieron datos es 45° N. Ahí, los autores citados anteriormente dan valores de la razón de mezcla de H₂O en el intervalo 4-5 ppmv entre 25 y 60 km mientras que nosotros obtenemos, teniendo en cuenta nuestras barras de error, entre 3.5 y 6 ppmv para la región 33-56 km a la latitud 37° N.

Este trabajo experimental nos permite proponer que éste tipo de observaciones se

pueden efectuar durante una porción significativa de la estación invernal en lugares de alta montaña sobre áreas secas. Estas medidas tienen como ventaja, sobre las realizadas desde tierra a 22 GHz, el menor tiempo de integración requerido (varias horas para 22 GHz en comparación con algunos minutos a 183 GHz para obtener la misma relación señal sobre ruido). Respecto a las medidas realizadas a 183 GHz desde aviones tenemos un menor coste al aprovecharse la logística de observatorios ya en funcionamiento. Los datos obtenidos desde avión son hoy en día muy raros lo que prueba las dificultades de llevarlos a cabo. Sin embargo, el inconveniente de las medidas desde tierra es el carácter local de los datos obtenidos.

3.3 Sondeo del perfil de los gases atmosféricos minoritarios

Al contrario de la mayor parte de líneas de $^{16}\text{O}_2$ y H_2^{16}O , que al ser observadas desde tierra no permiten obtener información de capas más allá de la troposfera debido a la gran absorción que se produce en ésta, para los gases minoritarios es posible, en principio, la realización de un estudio de su perfil de abundancia desde la Tierra. Las limitaciones son las siguientes:

- A) El gas minoritario en cuestión debe poseer líneas cuya contribución a la temperatura de brillo por encima del continuo determinado por H_2O y O_2 sea accesible a la sensibilidad de nuestro instrumento.

- B) La línea de observación elegida debe estar alejada de las resonancias de H_2O y O_2 y no estar críticamente contaminada por la emisión de otras moléculas a frecuencias muy próximas (véase por ejemplo en la figura 3.22 que la línea a 241 GHz de ^{35}ClO no es adecuada para éste tipo de estudios.

Uno de los objetivos presentados al principio de éste trabajo era la observación de líneas milimétricas de ozono et su uso para estudiar el perfil de distribución vertical de éste gas en la atmósfera. El proyecto europeo EMCOR (*"European Minor Constituents Radiometer"*), en el que participo tanto de parte del *Observatorio Astronómico Nacional* (España) como del *Laboratoire de Radioastronomie Millimétrique* del Observatorio de París-Meudon (Francia), reúne además a otros cinco laboratorios europeos y tiene por objetivo la construcción y puesta en funcionamiento de un radiómetro muy sensible para la detección de líneas rotacionales débiles de diversas

moléculas atmosféricas, especialmente ClO cuyo importante papel en la destrucción del ozono estratosférico ya se citó en el primer capítulo. Las observaciones que presentaremos a continuación han constituido los primeros pasos en nuestro grupo con el objetivo de adquirir la experiencia necesaria en éste tipo de estudios de cara a trabajos futuros.

3.3.1 Introducción a las observaciones de líneas de ozono y objetivos

La importancia del ozono por la absorción del ultravioleta solar y para el perfil vertical de temperatura en la estratosfera se vió en el capítulo 1. Para profundizar en el conocimiento de la química y la dinámica estratosférica y mesosférica es muy importante realizar medidas de la abundancia del ozono y de otros gases minoritarios de la manera más global posible. La primera etapa consiste en estudiar los perfiles verticales locales a partir de medidas desde tierra.

Vimos en el capítulo 2 que el ozono posee un espectro rotacional muy rico debido a su geometría no lineal. En el dominio de frecuencias 10-1000 GHz, el ozono es la molécula atmosférica más importante por su contribución al espectro electromagnético atmosférico, justo tras O_2 y H_2O (con excepción de unas pocas líneas de $^{16}O^{18}O$). Desde la superficie terrestre, las líneas de ozono pueden alcanzar niveles de emisión de hasta algunas decenas de grados Kelvin (en temperatura de brillo) por encima del nivel de continuo.

La sección 2.4 describe la manera de estimar la distribución vertical de un gas a partir de la espectroscopía de una de sus líneas rotacionales en el dominio milimétrico. Una aplicación a la observación de H_2O se vió en la sección 3.2 por ello evitaremos repetir aquí conceptos ya vistos.

Los dos telescopios utilizados para los trabajos descritos anteriormente en éste capítulo (3.1 et 3.2) se han utilizado para la observación de líneas rotacionales atmosféricas de $^{16}O_3$ a frecuencias diferentes y usando diversos espectrómetros.

Numerosos grupos realizan de forma regular observaciones desde tierra de líneas milimétricas de ozono desde hace al menos unos diez años. Por ello, con el fin de aportar algo nuevo hemos emprendido la realización de ciertas medidas originales desde diversos puntos de vista. Primero hemos querido medir un gran número de líneas diferentes (ocho en total) utilizando dos telescopios que presentan importantes

diferencias técnicas. Todos los datos se han analizado con ayuda de un único programa (presentado en la sección 2.4) para resaltar sus capacidades. Ciertas líneas de ozono que hemos observado y utilizado para calcular los perfiles verticales lo han sido por vez primera (es el caso de dos transiciones situadas más allá de 358 GHz). Finalmente, hemos utilizado en algunos casos resoluciones espectrales muy finas (39 kHz) o coberturas espectrales muy grandes (500 MHz), lo que nos ha permitido estudiar los perfiles verticales de ozono en un dominio de altitudes pocas veces conseguido. La utilización de un espectrómetro (512x1MHz) ha permitido calcular razones de mezcla des ~ 24 km hacia arriba. Esto es muy importante ya que es en la baja estratosfera donde encontramos las densidades numéricas de ozono mayores y donde éste gas juega un papel decisivo para la protección contra la radiación UV solar (el perfil de razón de mezcla de ozono alcanza su máximo generalmente hacia los ~ 40 km, pero la densidad numérica de éste mismo gas lo hace hacia 23-25 km, lo que se puede entender haciendo una convolución del perfil vertical de la razón de mezcla con el de la densidad atmosférica). Por otra parte hemos podido efectuar medidas muy precisas de la variación diurna de la abundancia de ozono mesosférico entre 56.5 y 72.5 km para latitudes intermedias gracias a medidas de gran calidad con una resolución espectral de 39 kHz.

3.3.2 Descripción de las observaciones

Las resonancias rotacionales de ozono que hemos observado se encuentran en el intervalo de frecuencias entre 142.175 y 358.853 GHz, localizados en mitad de las ventanas atmosféricas situadas entre las fuertes resonancias de H_2O (centradas a 183, 325, y 380 GHz) y O_2 (119 y 368.5 GHz). La tabla 3.4 muestra los parámetros espectroscópicos de las líneas de O_3 más importantes en esas ventanas atmosféricas. Esos mismos parámetros se han utiliza para el análisis posterior.

La mayor parte de las campañas de observación de O_3 en el dominio de las ondas milimétricas desde tierra han seleccionado líneas de ozono de frecuencias inferiores a 150 GHz. Por ejemplo *Tsou et al.* (1995) [89] y *Ricaud et al.* (1991) [71] han llevado a cabo medidas de la transición $6_{1,5} \rightarrow 6_{0,6}$ centrada a 110.836 GHz, mientras que *Lobsiger and Künzi* (1987) [54] y *Zommerfelds et al.* (1989) [99] han observado la línea $5_{1,5} \rightarrow 4_{0,4}$ a 142.175 GHz. El aumento de la absorción del vapor de agua troposférico con la frecuencia es la principal justificación de ésta elección. Sin embargo, habría que tener en cuenta que la intensidad de las líneas de ozono aumenta en

$J_{K_a K_b}$	$J'_{K'_a K'_b}$	$\nu_c(\text{GHz})$	F. osc.	$E_{inf}(K)$	$\gamma_c \frac{\text{MHz}}{\text{mb}}$	x
• $10_1 9$	$10_0 10$	142.17510	8.27	66.1	2.50	0.70
$12_1 11$	$12_0 12$	165.78451	8.85	93.4	2.36	0.76
• $5_1 5$	$4_0 4$	208.64242	3.07	12.1	2.41	0.76
• $16_1 15$	$16_0 16$	231.28151	9.02	161.9	2.30	0.76
$16_2 14$	$16_1 15$	235.70982	13.0	173.0	2.29	0.76
• $14_2 12$	$14_1 13$	237.14613	10.9	134.8	2.30	0.76
• $18_2 16$	$18_1 17$	239.09326	14.9	216.1	2.28	0.76
• $12_2 10$	$12_1 11$	242.31869	8.77	101.4	2.31	0.76
$12_0 12$	$11_1 11$	243.45378	7.35	81.7	2.31	0.76
$20_2 18$	$20_1 19$	248.18340	16.5	263.9	2.27	0.76
$7_1 7$	$6_0 6$	249.78857	4.24	25.3	2.39	0.76
$10_2 8$	$10_1 9$	249.96196	6.79	72.9	2.31	0.76
$8_2 6$	$8_1 7$	258.71612	5.03	49.3	2.32	0.76
$22_2 20$	$22_1 21$	263.69263	17.6	316.4	2.25	0.76
$6_2 4$	$6_1 5$	267.26655	3.50	30.7	2.33	0.76
$18_1 17$	$18_0 18$	273.05091	8.82	203.0	2.27	0.76
$18_1 17$	$17_2 16$	286.08769	5.77	202.4	2.25	0.76
$24_2 22$	$24_1 23$	286.15656	18.3	373.7	2.23	0.76
$9_1 9$	$8_0 8$	288.95915	5.55	43.3	2.36	0.76
$5_2 4$	$5_1 5$	293.17135	2.51	22.1	2.32	0.76
$14_0 14$	$13_1 13$	301.81299	9.22	110.9	2.28	0.76
$13_2 12$	$13_1 13$	352.32404	5.64	110.9	-	-
$28_2 26$	$28_1 27$	352.81524	18.3	501.7	-	-
$20_1 19$	$19_2 18$	357.62983	7.08	246.7	-	-
• $30_3 27$	$30_2 28$	358.19981	24.0	591.5	2.30	0.76
• $16_0 16$	$15_1 15$	358.85334	11.2	144.7	2.25	0.76
$28_3 25$	$28_2 26$	359.64962	21.8	518.6	-	-

TAB. 3.4 - Principales líneas de O_3 en las ventanas atmosféricas hasta 368 GHz. Hemos señalado con un punto a la izquierda las transiciones observadas y analizadas en el cuadro de éste trabajo (los parámetros siguen la notación de la ecuación 2.29).

INFORMACIONES	INSTRUMENTO	
	IRAM-30m	POM-2
Latitud	37:04:05.60 N	44:38:02.00 N
Longitud	3:23:58.10 W	5:54:28.50 E
Altitud	2850 m	2550 m
Diámetro	30 metros	2.5 mètres
Frecuencias de operación	82-116 GHz (réc. 3 mm) 129-190 GHz (réc. 2 mm) 204-280 GHz (réc. 1.3 mm) 345-365 GHz (réc. experimental)	195-250 GHz
lóbulo a 230 GHz	~12"	~2'
acoplo al ciel (η)	0.9	0.82
relación de ganancias (G_S/G_I)	<ul style="list-style-type: none"> • 4 para los recep. de 2 mm y 1.3 mm • 1 a 1.5 para el 355 GHz 	1.3
Incertidumbres sobre η , G_S	$\pm 3\%$	$\pm 5\%$
configuraciones de los espectrómetros durante las observ.	512x1MHz 256x100kHz 1024x39kHz	232x156kHz 232x39kHz

TAB. 3.5 - Informaciones generales sobre los instrumentos utilizados en las observaciones de líneas atmosféricas de ozono.

general con la frecuencia y, por tanto, la utilización de frecuencias más altas puede ser ventajosa en observatorios de alta montaña.

Las observaciones que presentamos aquí se realizaron entre 1991 y 1995 utilizando los dos radiotelescopios ya mencionados en los apartados anteriores. Las características principales de estos para las observaciones que nos ocupan se presentan en el cuadro 3.5.

Para la calibración de las observaciones del telescopio de 30 metros del IRAM se usó, al igual que para las observaciones de H_2O , dos absorbentes de referencia, el primero a temperatura ambiente y el otro a la del nitrógeno líquido. La mayor parte de las observaciones se han llevado a cabo a elevaciones cercanas al cénit, aunque en otras se usaron elevaciones intermedias. Teniendo en cuenta los valores típicos de los parámetros de ensanchamiento de colisional de las líneas de ozono (2 a 3 MHz/mb

por colisiones con O_2 et N_2 , ver tabla 3.4) y el perfil atmosférico de presión, el espectrómetro 512x1MHz utilizado en algunas observaciones del telescopio de 30 m del IRAM (tabla 3.5) permite el estudio de la emisión del ozono en capas atmosféricas a partir de una altitud de ~ 24 km.

La frecuencia intermedia del receptor de POM-2 puede variar entre 1.4 y 1.8 GHz como ya se precisó en la la sección . Este fue seleccionada en cada observación tratando de evitar la presencia de líneas atmosféricas de emisión fuerte en la banda imagen (recordemos que la relación de ganancias señal/imagen se estima a 1.3 para POM-2). Las observaciones con POM-2 siempre se llevaron a cabo a una elevación de 85° (masa de aire=1.004). En éste instrumento no es posible realizar una calibración absoluta y es por ello necesario trabajar en modo diferencial por desplazamiento de frecuencia. Esto complica el analisis de los datos aunque, no obstante, sea posible añadir a la señal diferencial sin corrección de opacidad atmosférica (ya que se trata de una señal interna a la atmósfera) un continuo calculado a partir de la estimación de la opacidad atmosférica a una frecuencia de referencia.

Las figuras 3.18 y 3.19 muestran ejemplos de observaciones llevadas a cabo con los dos radiotelescopios citados. En todos los casos se muestra el residuo entre la observación y el ajuste realizado por el algoritmo de inversión. La estimación de los errores para cada observación aparece en el cuadro 3.7). Finalmente, la comparación entre las razones de mezcla obtenidos por el algoritmo de inversión aplicado a las diferentes líneas observadas se muestra en la figura 3.20. En dicha figura no hay que comparar los resultados individuales a cada frecuencia ya que las fechas de las observaciones son distintas. Lo que hay que hacer es mirar la coherencia de la totalidad de puntos calculados y para ello damos como referencia un perfil vertical estándar de la razón de mezcla de ozono para latitudes templadas.

3.3.3 Análisis de las observaciones

La selección de las capas donde se puede estudiar la razón de mezcla de ozono al usar en las observaciones una cierta banda y resolución espectral se hace mediante un análisis similar al que se llevó a cabo para las observaciones del vapor de agua. El análisis preliminar presentado en la sección 3.2.3 también se debe hacer, pero aplicado a las líneas rotacionales de ozono. Los cálculos se llevan a cabo según el procedimiento expuesto en 2.4.1. A partir de esos cálculos y par cada configuración utilizada, se usará la razón de mezcla del ozono como parámetro libre en nuestro

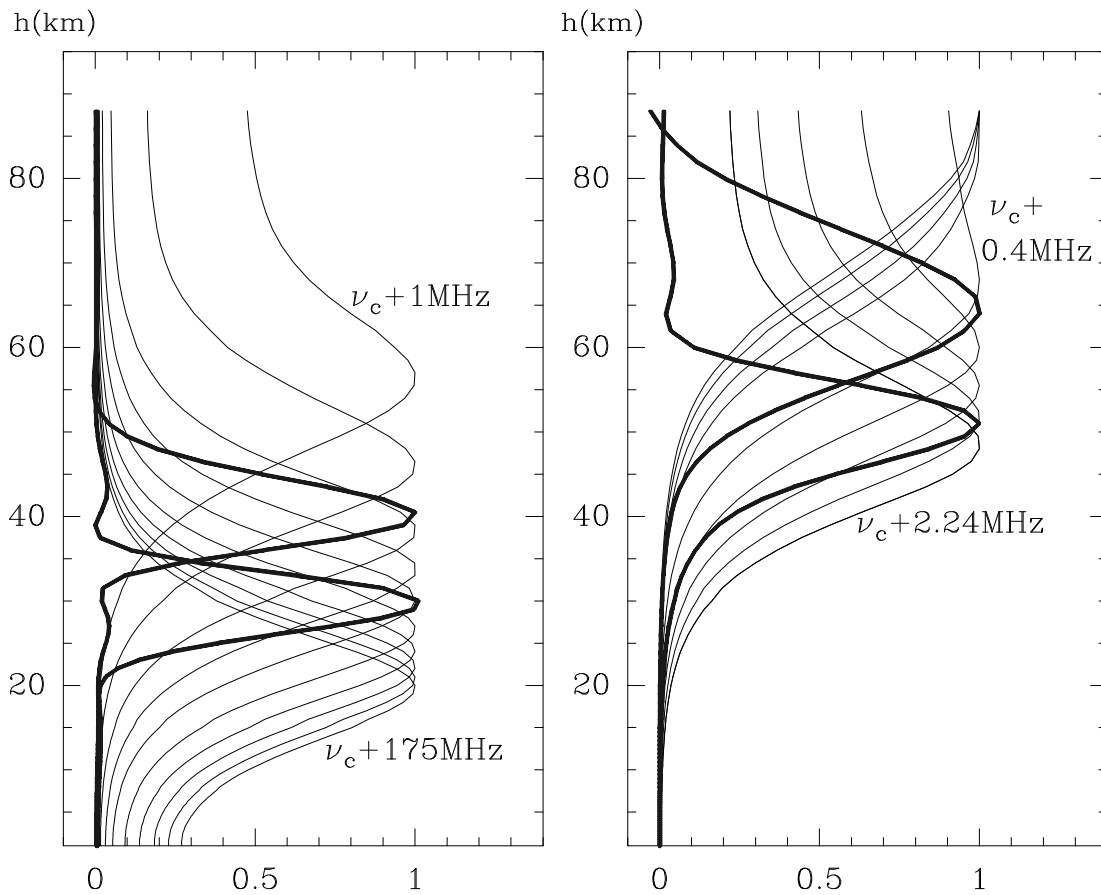


FIG. 3.17 - Funciones de peso monocromáticas (trazos finos) y funciones de sondeo (trazos gruesos) normalizadas a la unidad en el máximo calculadas en el estudio preliminar correspondiente al uso de los espectrómetros 512x1MHz (izquierda) y 232x39kHz (derecha) para observar la línea atmosférica de ozono centrada a 231.28 GHz. En estos cálculos se ha considerado la atmósfera U.S. Std. 1976, 45° de latitud. Las funciones de sondeo ayudan a fijar las capas para una correcta deconvolución de los espectros observados (ver cuadro 3.6).

algoritmo de inversión en las capas descritas en el cuadro 3.6.

El proceso de inversión arranca a partir de un perfil atmosférico estandar de temperatura, presión y razón de mezcla de ozono. Dicho perfil se elije según criterios de estación y de posición geográfica. La distribución vertical de H₂O considera en la troposfera ya se ha descrito anteriormente. El acoplamiento al cielo y la relación de ganancias señal/imagen del instrumento se toman asimismo en cuenta. Los parámetros libres son la cantidad troposférica integrada de vapor de agua y las razones de mezclan del ozono en las capas elegidas. El nivel de continuo cambia lige-

ν_c (GHz) (fecha/tel.)	Espectrómetro	cobertura efectiva	capas (km)	masa de aire	inct. ($\pm\%$) sur la raz. mél. ¹
142.17510 (Jul. 91/IRAM-30m)	512x1MHz	350x1MHz	23.9-33.9 33.9-46.2	1.000	10.2 11.3
142.17510 (Jul. 91/IRAM-30m)	1024x39kHz	944x39kHz	31.6-43.0 43.0-54.8 54.8-70.0	1.000	5.8 10.7 11.5
208.64242 (Jul. 93/IRAM-30m)	512x1MHz	252x1MHz	25.8-36.3 36.3-48.6	1.050	10.1 7.9
231.28151+ 239.09326 (Jul. 91/IRAM-30m)	512x1MHz	350x1MHz	23.3-33.6 33.6-46.3	1.000	5.6 3.7
231.28151 (Jan. 95/POM-2)	256x156kHz	116x312kHz	37.0-48.0 48.0-60.7	1.004	4.0 3.7
231.28151 (Jul. 91/IRAM-30m)	256x100kHz	256x100kHz	39.2-50.2 50.2-62.7	1.000	9.7 10.6
231.28151 (Jan. 95/POM-2)	256x39kHz	232x39kHz	46.9-57.9 57.9-69.5	1.004	14.5 12.4
237.14613 (Jul. 96/IRAM-30m)	512x1MHz	256x2MHz	23.9-33.9 33.9-44.2	1.773	4.1 4.9
239.09326 (Jan. 95/POM-2)	256x156kHz	116x312kHz	30.5-41.2 41.2-53.5	1.004	3.2 3.1
242.31870 (Jan. 95/POM-2)	256x156kHz	116x312kHz	38.3-48.4 48.4-59.5	1.004	4.7 4.2
358.19981 (Jan. 93/IRAM-30m)	512x1MHz	251x1MHz	28.0-38.0 38.0-48.5	1.238	5.6 5.0
358.85334 (Jan. 93/IRAM-30m)	512x1MHz	256x2MHz	25.7-33.5 33.5-42.9	1.495	6.2 5.0

TAB. 3.6 - Análisis preliminar basado en el método de Backus-Gilbert, para fijar las capas donde la razón de mezcla de O_3 se va a considerar como un parámetro libre en el proceso de ajuste de las observaciones. En éste análisis, la banda de frecuencias total y la resolución espectral de los datos a tratar son factores determinantes. (1) Las estimaciones de las incertidumbres sobre las razones de mezcla en las capas propuestas se dan para ruidos gaussianos de 0.1 K (en la configuración de la tercera columna). Un multiplicador de Lagrange es utilizado en éste análisis para ponderar éste error con la resolución vertical (columna 4).

ramente a lo largo de la banda espectral de una observación. La diferencia máxima que resulta de ello sólo es importante para las observaciones con el 512x1MHz. En nuestro análisis se toma en cuenta este efecto para mejorar la inversión de ciertas observaciones. En lo que respecta a la espectroscopía del ozono, se han adoptado los parámetros ya presentados en el cuadro 3.4.

Las incertidumbres sobre las cantidades de ozono calculadas se deben a las mismas causas que las que presentamos en el estudio sobre las observaciones del vapor de agua a 183 GHz: el ruido observacional (aquí se tiene en cuenta también la calidad de la línea de base), la información atmosférica *a priori* y las incertidumbres sobre el valor de ciertos parámetros instrumentales. La sección 3.2.3 describe la forma de evaluar cada tipo de error. Los detalles sobre los errores estimados en el análisis de las observaciones presentadas aquí y los barras de error total se dan en el cuadro 3.7.

Al igual que para el análisis de las observaciones del vapor de agua, se ha fijado la resolución vertical para la inversión de los espectros de manera que se tengan errores relativos no demasiado importantes sobre las razones de mezcla del ozono a consecuencia del ruido típico en los espectros (0.1-0.3 K en nuestro caso). Como estos errores se vuelven importantes al intentar mejorar la resolución vertical de los resultados se vió en la section 3.2.

3.3.4 Discusión. Algunos resultados particulares.

Las observaciones presentadas en las figuras 3.18 y 3.19 dan información de la abundancia de ozono en un dominio de altitudes importante (~ 25 a 72.5 km como valores extremos), que corresponden a las observaciones a mayor anchura de banda espectral por un lado (esto fija el límite inferior en altitud) y a la mejor resolución espectral por (límite superior en altitud).

La mayoría de nuestras observaciones se han llevado a cabo a frecuencias por encima de 200 GHz, mientras que casi todos los radiómetros ozono sobre tierra trabajan a frecuencias inferiores a 150 GHz. Los instrumentos utilizados, por estar emplazados en regiones de alta montaña, pueden trabajar en condiciones de opacidad troposférica bastante débil entre 200-300 GHz y con la ventaja de que ahí las líneas de ozono son intrínsecamente más intensas que aquellas situadas por debajo de 150 GHz.

Queremos señalar también la posibilidad de realizar observaciones simultáneas

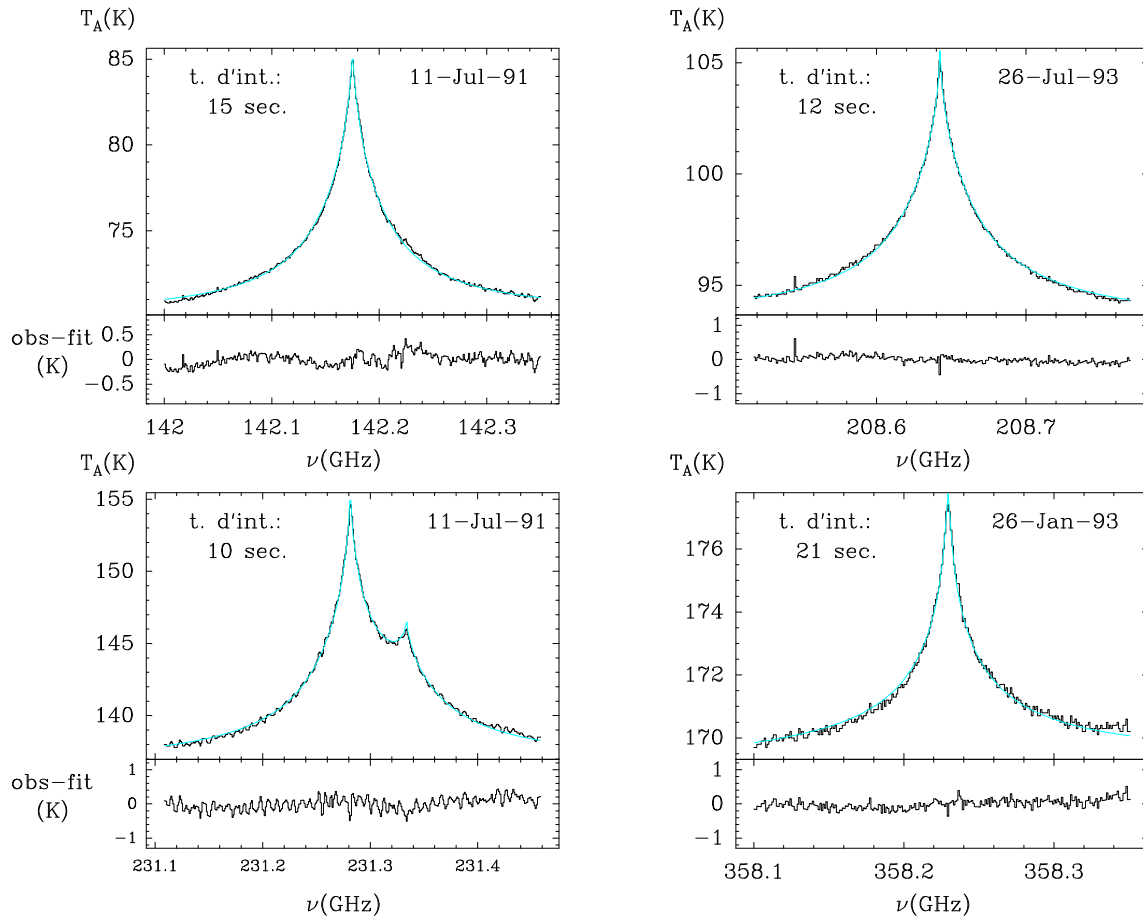


FIG. 3.18 - Ejemplos de observaciones de líneas rotacionales de ozono llevadas a cabo con el radiotelescopio de 30 metros del IRAM. En cada caso se muestra el residuo entre los datos y el ajuste efectuado por el programa de inversión presentado en éste trabajo. La información sobre la distribución vertical del ozono que se deduce del conjunto de observaciones efectuadas puede verse en la figura 3.20.

Observación		Err. rel. ($\pm\%$) debidos à:					
ν_c (GHz)	Espectrómetro (cobertura ef.)	capas (km)	perfil atm. a priori	ruido ² obs.	Param. Ins.		TOTAL
					η	G_S	
142.17510	512x1MHz	23.9-33.9	6	11	1	3.5	13
	(350x1MHz)	33.9-46.2	15	13	1	3.5	20
142.17510	1024x39kHz	31.6-43.0	12	9	1	4	16
	(944x39kHz)	43.0-54.8	15	17	1	3	27
		54.8-70.0	12	18	1	4	22
208.64242	512x1MHz	25.8-36.3	8	11	0.5	5	14
	(252x1MHz)	36.3-48.6	12	8	0.5	3	15
231.28151 + 239.09326	512x1MHz	23.3-33.6	6	11	1	2	13
	(350x1MHz)	33.6-46.6	12	7	1	6	15
231.28151	256x156kHz	32.5-42.5	10	17	24		32
	(116x312kHz)	42.5-56.5	13	15	21		31
231.28151	256x100kHz	39.5-51	15	15	1	6	27
	(256x100kHz)	51-64.5	12	25	1	2	30
231.28151	256x39kHz	42.5-56.5	19	7	16		31
	(232x39kHz)	56.5-72.5	9	7	11		18
237.14613	512x1MHz	23.9-33.9	14	11	1	3.5	18
	(256x2MHz)	33.9-44.2	17	12	1	3.5	21
239.09326	256x156kHz	32.5-42.5	8	13	25		30
	(116x312kHz)	42.5-56.5	13	22	12		31
242.31870	256x156kHz	32.5-42.5	12	14	23		31
	(116x312kHz)	42.5-56.5	12	16	12		26
358.19981	512x1MHz	25-35	6	8	2	5	11
	(251x1MHz)	35-46.5	2	7	2	4	9
358.85334	512x1MHz	23.7-33.5	7	16	4	6	20
	(256x2MHz)	33.5-42.9	4	13	3	5	15

TAB. 3.7 - Errores relativos (en porcentaje) sobre las razones de mezcla calculadas a partir de algunas observaciones de ozono presentadas en éste trabajo. (1) Los valores en esta columna se calculan a partir del ruido en los espectros et los valores estimados en el análisis presentado en el cuadro 3.6.

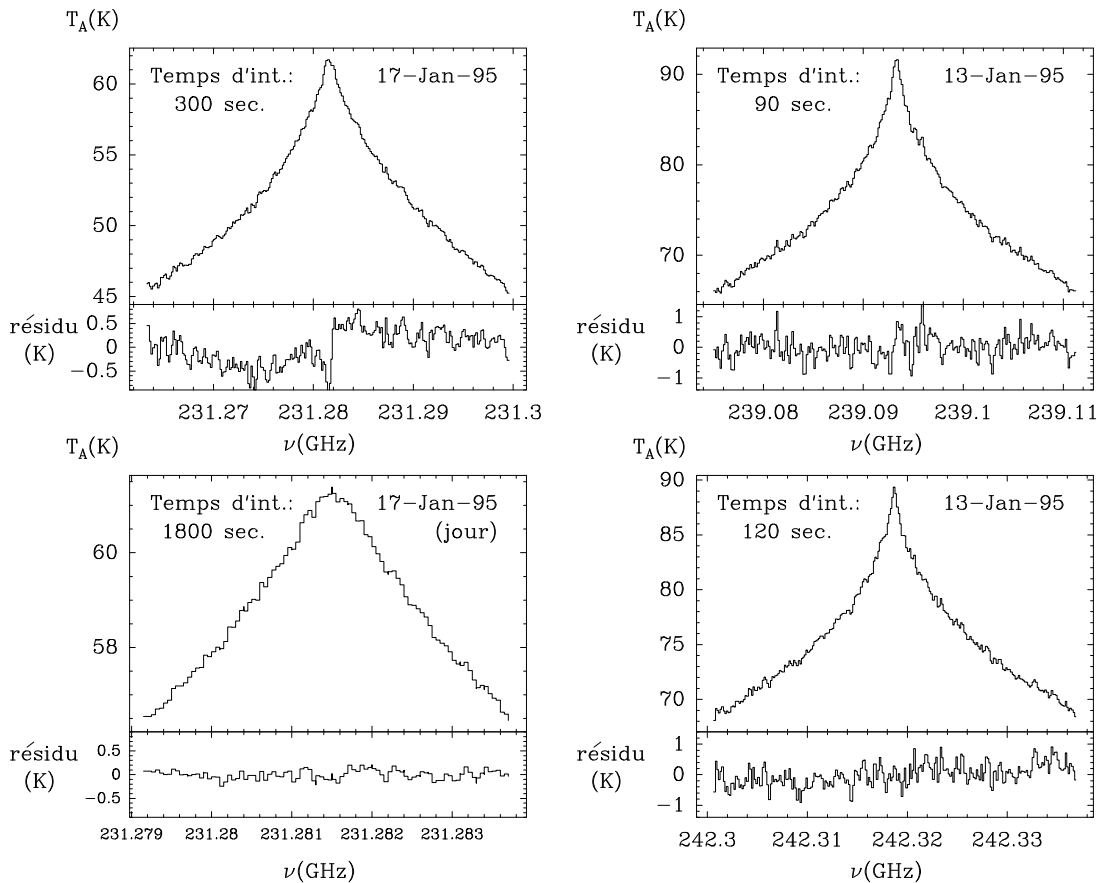


FIG. 3.19 - Ejemplos de observaciones de ozono en POM-2 y residuo tras su ajuste.

de varias líneas de ozono con los diversos receptores del radiotelescopio de 30 m del IRAM. Esto podría permitir una inversión simultánea, posible con nuestro programa, lo que, no cabe duda, supondría una mejora en la fiabilidad de los resultados ya que entonces sería posible disminuir los errores ligados a factores experimentales o a parámetros espectroscópicos.

Variabilidad diurna de la cantidad de ozono por encima de ~ 55 km

Las medidas presentadas en ésta sección no forman parte de una campaña sistemática de observación del ozono atmosférico. Se trata más bien de un estudio de las posibilidades que ofrecen las diferentes elecciones de frecuencia, resoluciones y coberturas espectrales para éste tipo de estudios. No obstante, hemos realizado durante dos semanas en Enero de 1995, una serie de medidas de la región central de la línea de ozono centrada a 231.281 GHz. Estas observaciones se hicieron a una gran resolución espectral: 39 kHz.

Se esperan diferencias bastante importantes entre el día y la noche en lo que respecta a la razón de mezcla del ozono para altitudes más allá de 50 km según

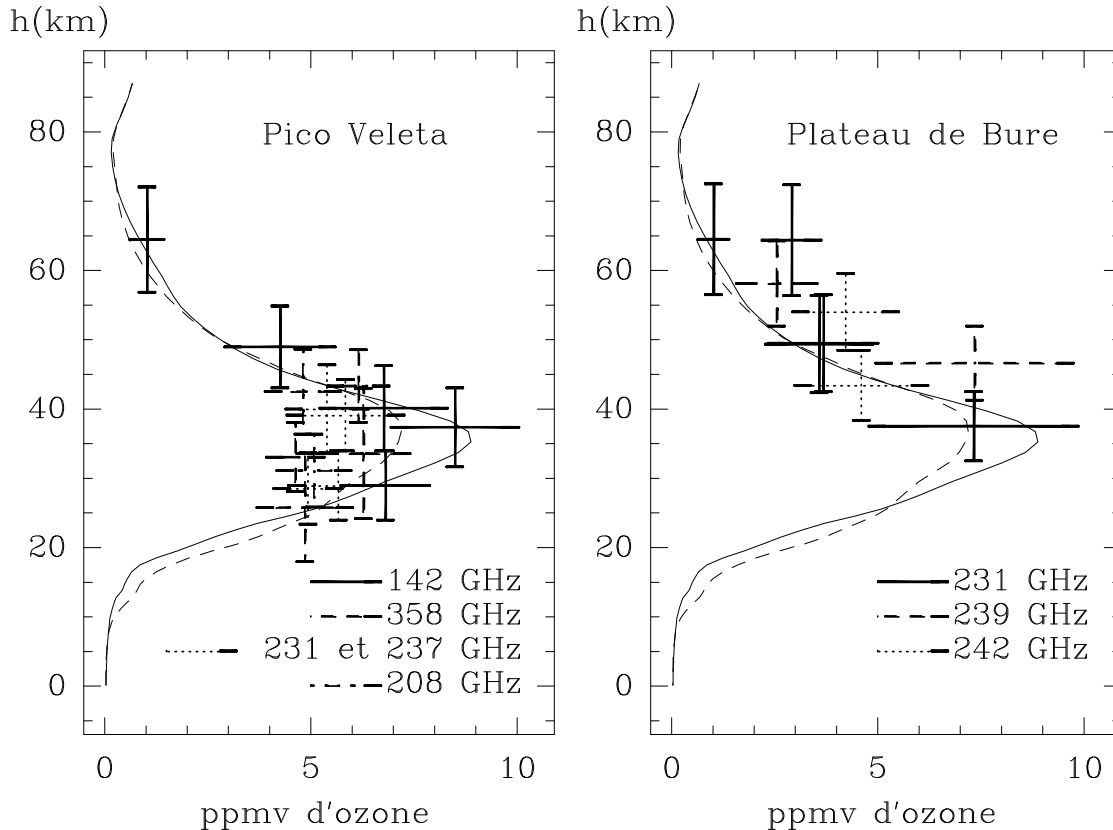


FIG. 3.20 - Razones de mezcla de ozono obtenidas de las observaciones a diversas frecuencias que he presentado en éste apartado. Se dan separadamente los resultados para los dos instrumentos utilizados (IRAM-30m et POM-2). Los diferentes trazos están asociados a las distintas líneas utilizadas. Hay que comparar cada resultado individual al perfil estandar de ozono en latitudes templadas que se encuentra en la misma figura, pero en la mayor parte de los casos los resultados no se pueden intercomparar ya que las fechas de observación son diferentes.

modelos (*Vaughan et al.*, 1984 [93], *Prather et al.* 1981 [69], etc...) y antiguas medidas como por ejemplo *Lean et al.* (1982) [46] et sobre todo *Lobsiger et Künzi*, 1986, et *Zommerfelds et al.*, 1989). Estos investigadores utilizaron 31 canales con una resolución espectral variable (30 MHz en las alas hasta 0.2 MHz en el centro) para observar la resonancia a 142.175 GHz. Por otro lado *Ricaud et al.* (1991 et 1994) [71] [72] han realizado medidas de la línea de ozono a 110.836 GHz con un espectrómetro 256x100kHz. *Kawabata et al.* (1995) [44] han utilizado un espectrómetro acusto-óptico de 35 kHz de resolución, mientras que *Tsou et al.* (1995) [89] han llevado a cabo medidas con una resolución de 50 kHz alrededor de la resonancia a 110.836 GHz. En nuestro trabajo aportamos unas medidas hechas en Plateau de Bure a muy alta resolución (39 kHz) y con la relación $\nu/\Delta\nu$ más alta que en todos los otros

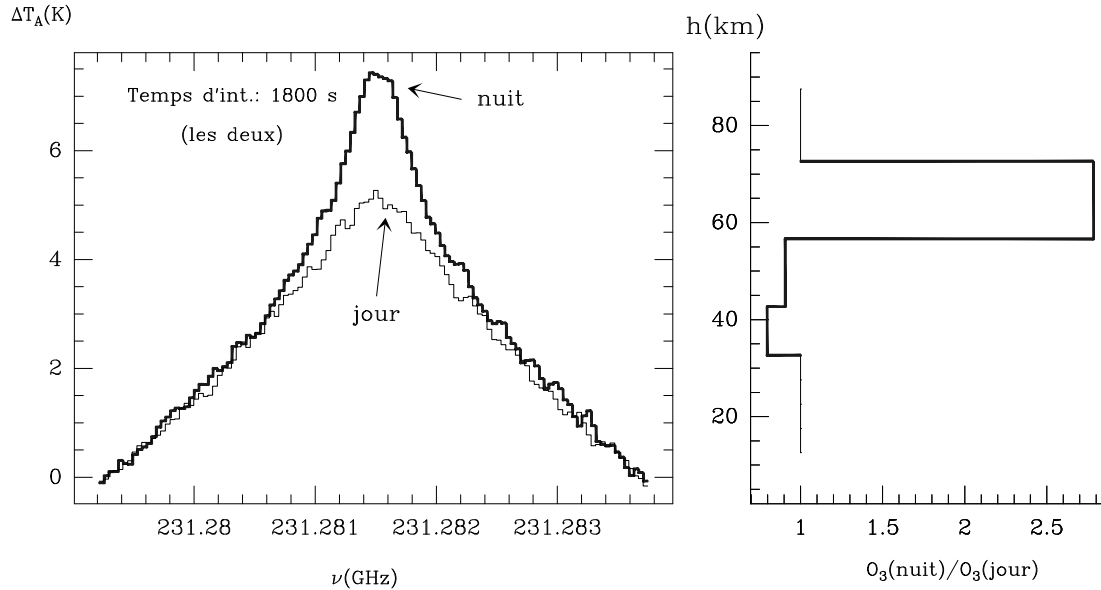


FIG. 3.21 - Comparación de dos observaciones de la línea de ozono a 231.282 GHz realizadas a la misma elevación con POM-2 durante la noche (trazo grueso) et durante el día (trazo fino). Se muestra asimismo la relación de abundancias de ozono entre el día y la noche a partir de un conjunto completo de observaciones llevadas a cabo en Enero de 1995 en Plateau de Bure. La forma redondeada de la parte central de la línea es consecuencia del perfil Doppler que es competitivo con el ensanchamiento colisional en el dominio de altitudes que contribuye a la señal que se detecta en esa zona. Las cantidades de ozono en la capa 32.5-42.5 km se han obtenido a partir de observaciones en las que el autocorrelador de POM-2 se utiliza en modo 232x156kHz.

experimentos citados.

La figura 3.21 muestra una comparación entre dos observaciones de la línea de ozono centrada a 231.281 GHz realizadas a la misma elevación pero con 12 horas de diferencia. El aumento de la razón de mezcla mesosférica de ozono durante la noche es evidente. La de abundancias día/noche se muestra sobre la misma figura. Los resultados obtenidos dan una razón de mezcla ~ 2.5 veces mayor durante la noche que durante el día para la capa 56.5-72.5 km. Estos resultados concuerdan con las medidas de Kawabata *et al.* (1995) et con los modelos antes citados. Por debajo de 56.5 km no hay diferencias importantes que sobrepasen la barrq de error, lo que era de preveer según los modelos fotoquímicos.

3.3.5 Ozono en la baja estratosfera sobre Pico Veleta

Dans quelques observations menadas avec le télescope IRAM-30m on a utilisé un spectromètre 512x1MHz (0.512 GHz de couverture en fréquence) et obtenus des spectres de grande qualité de plusieurs líneas de l'ozone (figure 3.18. Le tableau 3.5 montre qu'une couverture spectrale aussi grande permet d'obtenir une information sur le rapport de mélange de l'ozone à partir d'une altitude de ~ 25 km, ce qui rend possible l'étude depuis le sol de ce gaz dans les couches où la densité numérique de ce gaz est la plus grande et, donc, les sections efficaces d'absorption UV dans la bande de Hartley ont la plus grande importance. Très peu de mesures depuis le sol ont apporté ce type d'information en-dessous de 30 km d'altitude (*Tsou et al.*, 1995 [89]), car la plupart des expériences depuis le sol ne fournissent de rapports de mélange de l'ozone qu'au delà de ~ 40 km.

Le tableau 3.8 rassemble les densités numériques d'ozone (nous préférons ici donner cela au lieu du rapport de mélange de l'ozone car c'est la densité numérique qui permet de calculer directement l'absorption du rayonnement UV) mesurés dans la basse stratosphère au dessus de la région du Pico Veleta à différentes dates. L'extension verticale de ces couches dépend de la couverture spectrale effective retenue pour l'inversion des spectres. Les mesures à 142 et 231 GHz menadas à la même date montrent une bonne compatibilité étant donnadas les barres d'erreur. De ces observations, on ne conclut pas à une réduction importante de l'ozone sur ce site ès altitudes, c'est qui est pour l'instant le cas dans les latitudes tempéradas.

L'idée principale de cette série d'observations des líneas de l'ozone était de vérifier le fonctionnement et la souplesse de l'algorithme d'inversion d'observations spectroscopiques dans le domaine des longueurs d'onde millimétriques présenté dans ce travail. Les fréquences des différentes líneas ont été choisies dans un intervalle très grand (142 à 358 GHz) pour être observadas en tenant compte de ce qui nous était techniquement possible. L'algorithme a fonctionné correctement avec des résultats cohérents (étant donnadas les barres d'erreur) pour différentes líneas de l'ozone observadas le même jour avec le même instrument, et pour les différentes dates d'observation si on compare avec un profil standard de ce gaz pour des latitudes tempérées.

ν_c (GHz)	date	couche	$\overline{\rho_{O_3}(cou.)}$ (cm ⁻³) (barre d'erreur)	$\overline{\rho_{O_3}(cou.)}_{std.}$ (cm ⁻³)
142.17510	11-Jul-91	23.9-33.9 km	3.8 à 5.0 ·10 ¹²	3.07·10 ¹²
231.28151	11-Jul-91	23.3-33.6 km	3.0 à 3.9 ·10 ¹²	3.10·10 ¹²
358.19981	27-Jan-93	28.0-38.0 km	1.2 à 1.6 ·10 ¹²	1.82 ·10 ¹²
358.85334	27-Jan-93	25.7-33.5 km	3.0 à 6.0 ·10 ¹²	2.67·10 ¹²
208.64242	26-Jul-93	25.8-36.3 km	1.9 à 2.8 ·10 ¹²	2.77·10 ¹²
237.14613	7-Jul-96	23.9-33.9	2.8 à 3.9 ·10 ¹²	2.97·10 ¹²

TAB. 3.8 - Abondances d'ozone dans la basse stratosphère au Sud de l'Espagne calculadas à partir des observations effectuadas avec le télescope IRAM-30m en utilisant un spectromètre 512x1MHz.

3.4 El proyecto EMCOR

Éste proyecto, una colaboración de siete institutos europeos (Francia, España, Suiza, Reino Unido, Alemania y Finlandia), del que forma parte el Observatorio de París-Meudon (Francia) y el Observatorio Astronómico Nacional (España), tiene como objetivo el construir un radiómetro que realizará observaciones espectroscópicas de la emisión rotacional de diferentes gases atmosféricos minoritarios en el dominio de frecuencias entre 198 y 211 GHz (según la decisión adoptada en la reunión del grupo en la sede del OAN en el campus universitario de Alcalá de Henares, el 29 de Febrero de 1996).

3.4.1 Objetivos

El objetivo fundamental de éste proyeto es el de poder medir la abundancia de la molécula de ClO en la estratosfera y hacer un de ésta. El interés en ésta molécula es a causa de su papel decisivo en la destrucción del ozono estratosférico. La intensidad de las líneas de ClO (muy faibles en général, véase la posición ocupada por ésta molécula en la tabla 2.1) aumenta con la frecuencia al menos hasta 300 GHz. Desde tierra, la única posibilidad es la de trabajar en la ventana atmosférica situada entre 200 y 300 GHz. En ésta región hay tres transiciones rotacionales que, en principio, se pueden utilizar: ~ 204.35 , 241.45 et 278.60 GHz. El trabajo del grupo de espec-

J=11/2→9/2					J=15/2→13/2				
F→F'	Λ	ν_c (GHz)	Force osc.	E_{low} (K)	F→F'	Λ	ν_c (GHz)	Force osc.	E_{low} (K)
5→6	e	204.26963	0.0004	18.736	7→8	e	278.56413	0.0003	28.543
5→6	o	204.27061	0.0004	18.736	7→8	o	278.56581	0.0003	28.543
6→6	e	204.29385	0.0265	18.736	8→8	e	278.58236	0.0230	28.543
6→6	o	204.29502	0.0265	18.736	8→8	o	278.58400	0.0230	28.543
4→5	o	204.32125	0.0005	18.733	7→7	e	278.61195	0.0003	28.541
4→5	e	204.32148	0.0005	18.733	6→7	e	278.61285	0.0003	28.541
5→5	e	204.32738	0.0349	18.733	6→7	o	278.61287	0.0304	28.541
5→5	o	204.32783	0.0349	18.733	7→7	o	278.61289	0.0304	28.541
7→6	o	204.34600	0.6720	18.736	9→8	e	278.62712	0.7890	28.543
7→6	e	204.34600	0.6720	18.736	9→8	o	278.62814	0.7890	28.543
4→4	o	204.35090	0.0264	18.732	8→7	e	278.63010	0.6730	28.541
4→4	e	204.35094	0.0264	18.732	8→7	o	278.63122	0.6730	28.541
6→5	e	204.35163	0.5560	18.733	7→6	e	278.63265	0.0229	28.540
6→5	o	204.35222	0.5560	18.733	6→6	e	278.63353	0.0229	28.540
5→4	e	204.35688	0.4570	18.732	6→6	o	278.63374	0.5720	28.540
5→4	o	204.35748	0.4570	18.732	7→6	o	278.63378	0.5720	28.540
4→3	o	204.36256	0.3760	18.731	6→5	e	278.63557	0.4870	28.539
4→3	e	204.36256	0.3760	18.731	6→5	o	278.63658	0.4870	28.539

TAB. 3.9 - Componentes hiperfinas de las transiciones rotacionales J=11/2→9/2 y J=15/2→13/2 de ^{35}ClO .

troscopía de éste proyecto ha consistido en hacer un modelo lo más preciso posible de la emisión de esas líneas en diferentes situaciones con el fin de elegir la frecuencia de trabajo más conveniente. La espectroscopía del ClO ya se vió en la sección (2.2). Esta molécula posee un isospín nuclear que produce una estructura hiperfina en su espectro rotacional. En las simulaciones de la figura 3.22 se pueden identificar claramente las componentes hiperfinas principales. Las frecuencias, fuerzas de oscilador y otros parámetros espectroscópicos se muestran en el cuadro 3.9.

Una vez elegida la resonancia a ~ 204.35 GHz del ClO como la más apropiada para éste proyecto (la situada alrededor de 241.45 se rechazó ya que una línea de $^{16}\text{O}^{18}\text{O}^{16}\text{O}$ se encuentra en superposición crítica, y la situada hacia 278.60 GHz no se retuvo argumentandose la opacidad troposférica más fuerte como argumento en contra), otras moléculas entraron en los objetivos de EMCOR. Se trata, por ejemplo, de N_2O , H_2^{18}O , HNO_3 , NO_2 y otras.

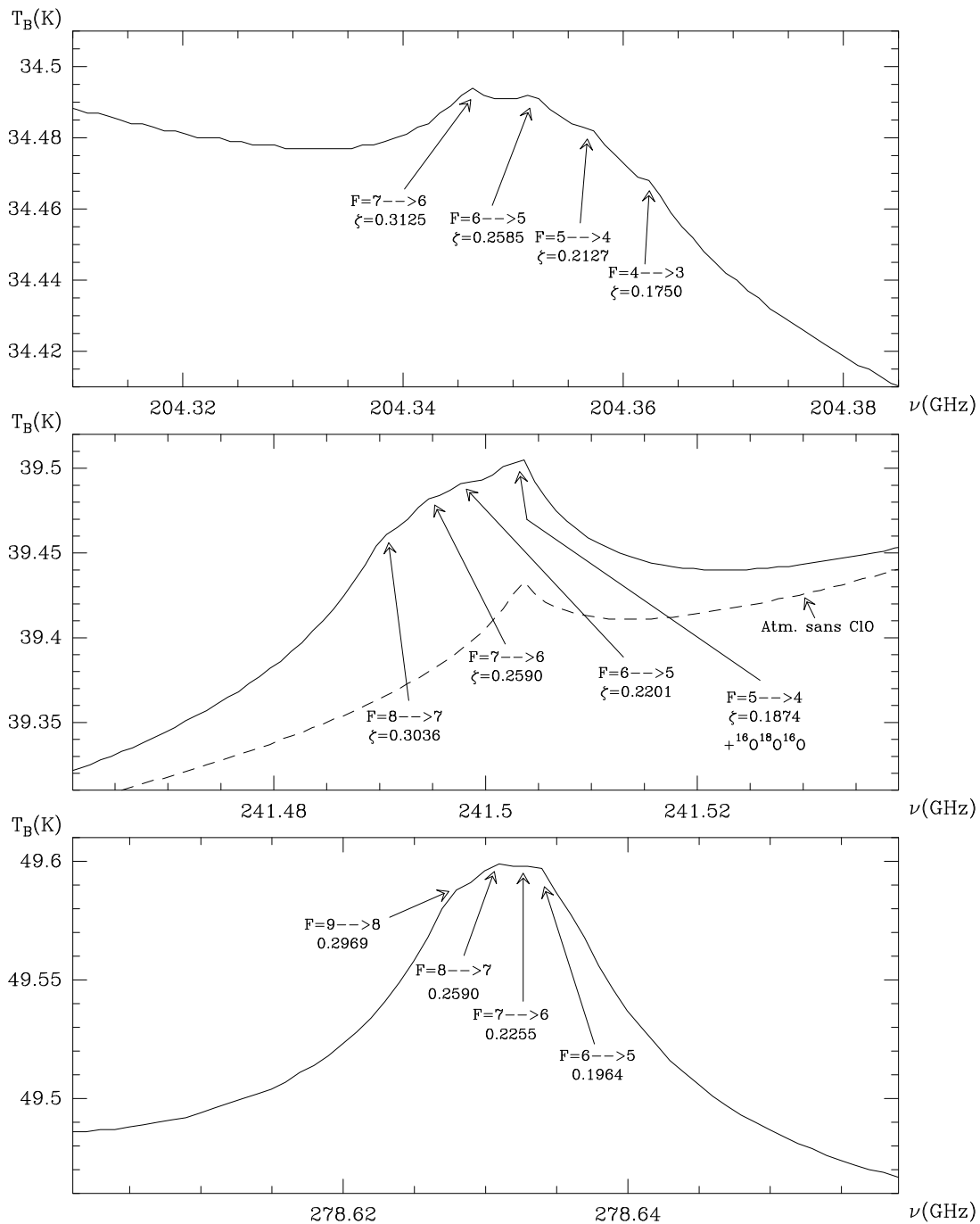


FIG. 3.22 - Simulación de las líneas rotacionales de ClO en la banda 200-300 GHz, e identificación de las componentes hiperfinas más importantes. Estos cálculos corresponden a una atmósfera no activa en ClO en la baja estratosfera, una masa de aire igual 2 y un lugar de observación situado a 3.5 km sobre el nivel del mar. Es interesante señalar que la línea a 241 GHz no se puede utilizar para EMCOR ya que la señal de ClO se ve contaminada por la procedente de una línea de $^{16}\text{O}^{18}\text{O}^{16}\text{O}$, la cual hemos puesto en evidencia al retirar ClO de los cálculos (trazos discontinuos).

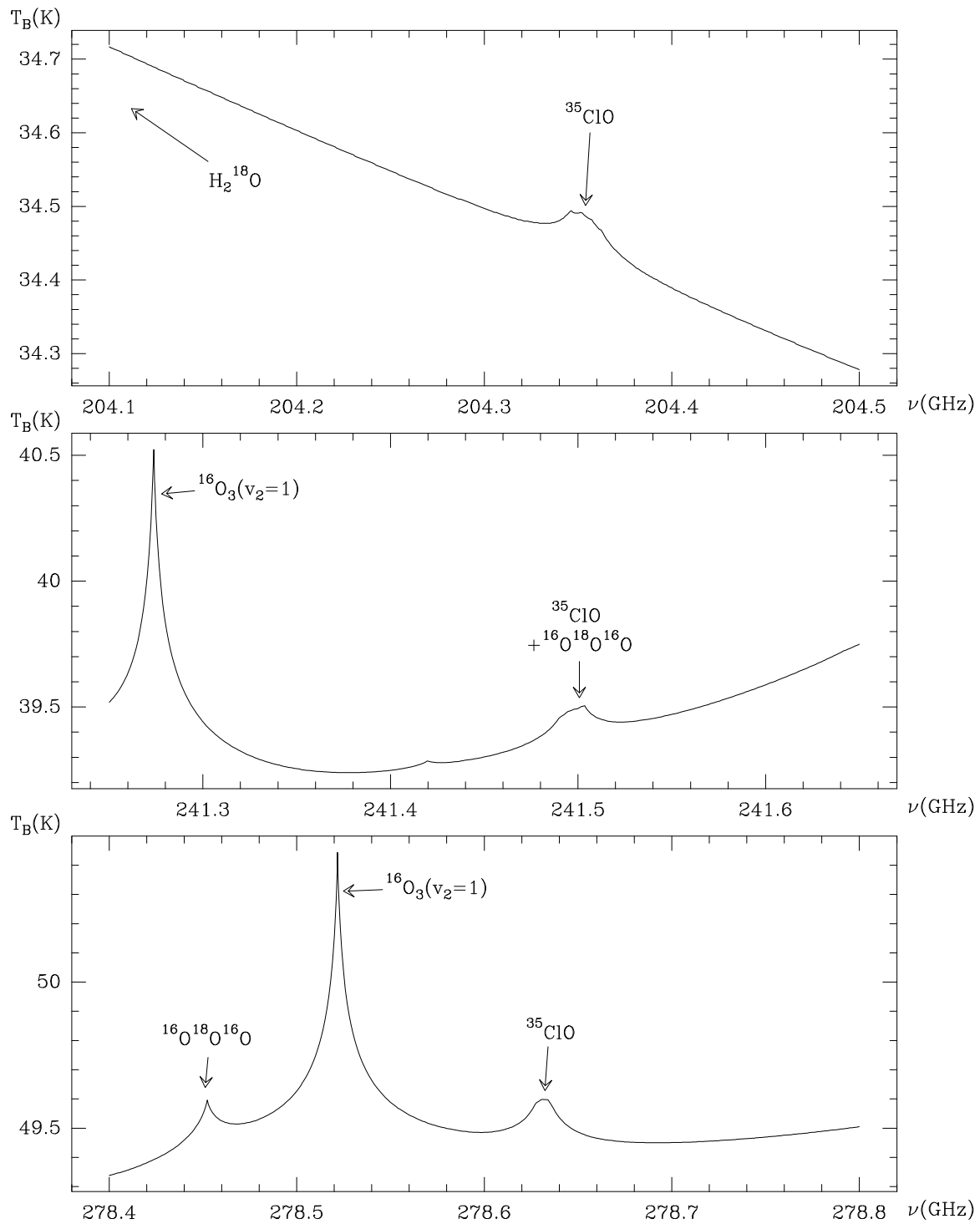


FIG. 3.23 - Espectro atmosférico en la vecindad de las líneas rotacionales de ClO en el dominio 200-300 GHz. El perfil atmosférico utilizado es el mismo que en la figura anterior.

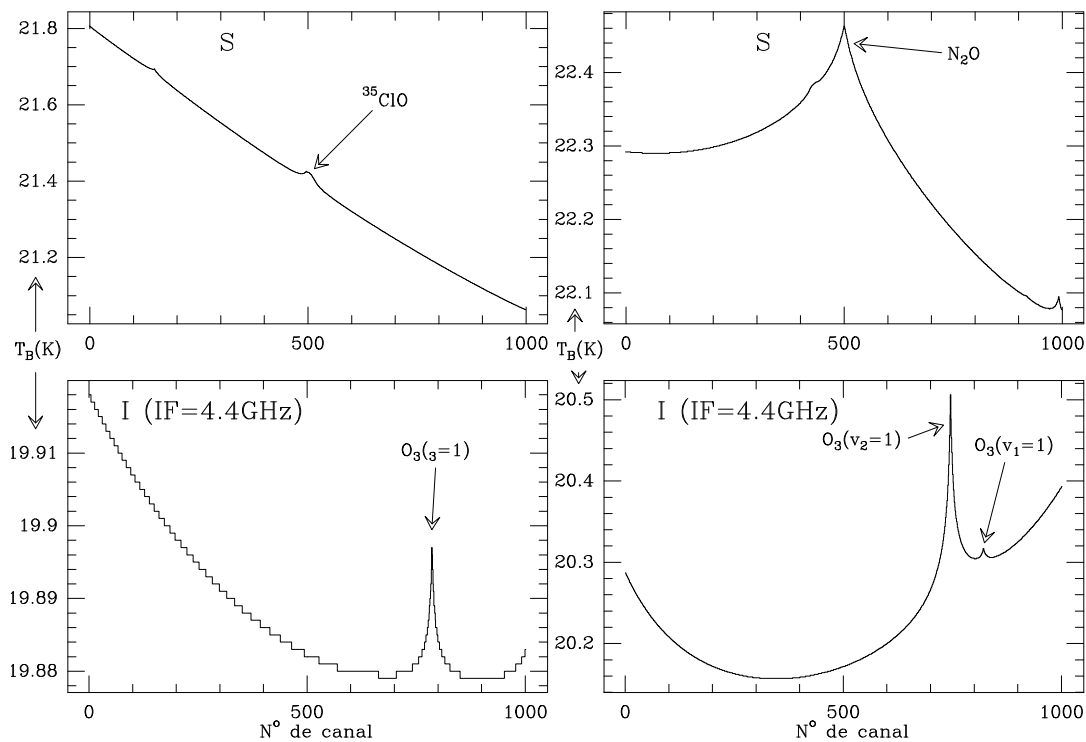


FIG. 3.24 - Cálculos realizados para elegir la frecuencia intermedia de EMCOR. En la parte de arriba mostramos el espectro atmosférico esperado en la banda señal si se observa ClO o N_2O , y en la parte de abajo vemos el espectro que correspondería a la banda imagen si se toma una frecuencia intermedia de 4.4 GHz. En estos cálculos se adoptó la atmósfera U.S. Std. 76, 3.5 km de altitud y elevación cenital. La elección $\text{IF} = 4.4$ GHz es el mejor pues minimiza los riesgos de señales parásitas en la banda imagen para el conjunto de líneas que se pretende observar con EMCOR y por ello se adoptó dicho valor en acuerdo con los otros miembros del grupo de espectroscopía del proyecto.

3.4.2 Características

El radiómetro EMCOR se instalará muy probablemente en Jungfraüjoch, estación geofísica de la Universidad de Berna en los Alpes Suizos (a 3500 metros sobre el nivel del mar). Una gran parte de las características técnicas del instrumento aún no se han decidido completamente y serán tema para las próximas reuniones del grupo de trabajo. La frecuencia seleccionada Se construirá un receptor SIS a la frecuencia seleccionada con una frecuencia intermedia entre 3 et 5 GHz. El espectrómetro a utilizar deberá cubrir ~ 1 GHz de banda total con una resolución de ~ 1 MHz, aunque el uso de otros espectrómetros de mejor resolución espectral no esté excluido con el fin de realizar estudios de la alta estratosfera y de la mesosfera.

En lo que respecta al CIO, y con las resoluciones espectrales que se contemplan, el efecto Zeeman sobre las líneas elegidas se puede despreciar.

La cuestión actual es la banda imagen, cuya supresión total no es más que un caso ideal. El grupo de espectroscopía ha debido llevar a cabo un estudio para la elección de una frecuencia intermedia que minimize los riesgos de contaminación de la señal por líneas atmosféricas fuertes presentes en la banda imagen. Tomando como base las transiciones más interesantes que se pueden observar con EMCOR, los cálculos de ATM (algunos de los cuales se muestran en la figura 3.24) sugieren que el valor más adecuado de dicha frecuencia intermedia es 4.4 GHz.

Capítulo 4

Sondeos milimétricos desde satélite hacia la superficie terrestre

Ya vimos en el capítulo 2 la solución general de la ecuación de transferencia radiativa en el dominio de frecuencias tratado en éste trabajo (ec. 2.13). Vamos a tratar a continuación el caso de una hipotética observación desde satélite con los radiómetros apuntando hacia la superficie de la Tierra.

La temperatura de brillo que medirá el satélite estará compuesta de dos términos: i) una contribución de la señal reflejada por la superficie terrestre así como la emisión propia de la superficie a una temperatura T_S , ii) la señal emitida por la propia atmósfera en la dirección del satélite. Si llamamos $e_S(\nu, \theta)$ a la emisividad direccional de la superficie a la frecuencia ν (valor entre 0 y 1), entonces el coeficiente de reflexión será $1 - e_S(\nu, \theta)$. Podremos dar finalmente la siguiente expresión para la temperatura de brillo que llega a la posición de un satélite que observa según un ángulo θ respecto al nádir, suponiendo aproximación plano-paralela y ausencia de procesos de difusión:

$$T_{B\nu\theta} = [T_S e_S(\nu, \theta) + (1 - e_S(\nu, \theta)) T_{\downarrow}(\nu, \theta)] e^{-\tau_{\nu}(surf., \infty) \sec\theta} + \int_{surf.}^{\infty} T(z) e^{-\tau_{\nu}(z, \infty) \sec\theta} \kappa_{\nu}(z) \sec\theta dz \quad (4.1)$$

donde $T_{\downarrow}(\nu, \theta)$ representa exactamente la temperatura de brillo en el caso descendente (ecuación 2.13). En realidad e_s puede depender en general de la polarización. El término que representa la temperatura de brillo de fondo adquiere, como vemos, una cierta complejidad respecto al caso de observación desde tierra. Por otro lado, el factor que atenúa la emisión térmica de cada capa en el término integral es debido a

toda la atmósfera situada entre ésta y el satélite. En líneas rotacionales del oxígeno molecular o del vapor de agua hay en general una alta opacidad en la troposfera, que hace que la detección de la radiación procedente de capas superiores sea muy difícil desde Tierra (véanse las secciones 3.1 y 3.2). La idea de realizar observaciones desde satélite nace, por tanto, de la necesidad de estudiar la emisión del O_2 y H_2O por encima de la troposfera. La diferencia en el aspecto que presenta la banda de O_2 entre 50 y 70 GHz, vista desde la superficie terrestre hacia el zénit y desde un satélite hacia el nódin en la misma vertical, se muestra en la figura 4.1.

4.1 Estudios de la temperatura en torno a 60 y 119 GHz

Como se verá más detalladamente en el capítulo 5, dedicado a los sondeos al limbo atmosférico, la espectroscopía milimétrica y submilimétrica de líneas del O_2 se usa para el estudio del perfil vertical de temperatura (y también de presión) ya que la razón de mezcla de éste gas es muy estable (mucho más que la de cualquier otro gas atmosférico con emisión dipolar eléctrica rotacional, lo que hace que esta dependa casi exclusivamente de P y T en la atmósfera). En éste capítulo hablaremos de instrumentos embarcados en satélites de órbita relativamente baja (~ 800 - 1000 km) que realizan sondeos angulos cenitales como máximo de 50° , de forma que la observación se dirige e intersecta la superficie terrestre. El sondeo de la atmósfera hacia el limbo se discutirá en el capítulo 5.

4.1.1 Introducción

En las frecuencias a que trabajaremos aquí va a ser posible reducir la complejidad de la solución de la ecuación de transporte radiativo (ec. 4.1). Esto se produce a frecuencias en las que la transmisión atmosférica total ($e^{-\tau_\nu(sup,\infty)sec\theta}$) es prácticamente cero de forma que nos queda la siguiente expresión:

$$T_{B\nu\theta} = \int_{sup}^{\infty} T(z)e^{-\tau_\nu(z,\infty)sec\theta} \kappa_\nu(z) sec\theta dz \quad (4.2)$$

En el dominio milimétrico las frecuencias en la parte central de la banda 50-70 GHz o alrededor de 118.75 GHz, (espectro de espín-rotación de O_2), así como alrededor de 183.31 GHz (ver observaciones desde tierra de ésta línea del vapor de agua

en la sección 3.2) verifican ésta simplificación. No obstante, hay que asegurarse que las frecuencias de trabajo sean adecuadas para el estudio del perfil de temperatura. Es decir, debemos usar frecuencias en las que los cambios en la temperatura de brillo medida respondan esencialmente a de la temperatura y para ello la abundancia y distribución vertical del gas en cuestión debe variar muy poco. No cabe duda que para esto es mucho mejor trabajar en las frecuencias correspondientes a las líneas de O_2 por estar sujeta la distribución vertical de dicha molécula a cambios mucho menos importantes y mejor conocidos que los asociados a cualquier otra. Finalmente, dentro de las dos posibilidades (60 o 119 GHz), parece más conveniente el uso de frecuencias en torno a 60 GHz por el hecho de estar éste conjunto de resonancias sujeto a un menor continuo de absorción (principalmente debido al vapor de agua). Además, esta banda está compuesta por unas 30 resonancias importantes, lo que da mucho más juego a la hora de elegir los canales de observación, frente a la única línea existente a 119 GHz. Ésta última, sin embargo, podría presentar otras ventajas. Ésta línea aislada está suficientemente lejos de otras resonancias del oxígeno molecular que se pueden despreciar los términos de acoplo en el perfil de línea (lo cual no es aplicable entre 50 y 70 GHz). Además, el efecto Zeeman sobre ésta línea da tan sólo lugar a tres sublíneas (ya que los números cuánticos son $N_J=1_1 \rightarrow 1_0$). Otra ventaja muy importante es el hecho de que al trabajar en el límite de difracción, la resolución espacial a 119 GHz es el doble mejor que a 60 GHz para un mismo tamaño de antena. Para una discusión más detallada, nos remitimos al final de éste capítulo.

4.1.2 Discusión sobre la aplicación de ésta técnica al estudio del perfil de temperatura

Si suponemos que estamos trabajando a una frecuencia en la que la transmisión atmosférica total es prácticamente cero la temperatura de brillo en el punto de observación vendrá dada por la ecuación (4.2). A partir de esto podemos introducir de forma sencilla el concepto de **función de peso en temperatura** para una observación desde satélite (definida de forma general en la ecuación 3.18): $W_{\nu,\theta}(z) = e^{-\tau_{\nu}(z,\infty)\sec\theta} \kappa_{\nu}(z)$ que tiene dimensiones $[L^{-1}]$ y que nos va a dar una idea de la importancia relativa con que las diferentes zonas de la atmósfera están contribuyendo a la temperatura de brillo medida en la posición del satélite. La elección de un modelo de atmósfera y de un modelo de del coeficiente de absorción

del O_2 permiten calcular un valor de κ_ν para cada capa y de ahí calcular la función de peso a la frecuencia ν . la función de peso cuya variable libre es la altura. Estas funciones de peso "monocromáticas" así calculadas son válidas en la medida que la atmósfera sea completamente opaca a la superficie, lo cual sucede entre unos 55.5 y unos 64 GHz. Dentro de ese rango, dichas funciones suelen tener un único máximo local, a una altura diferente según la frecuencia, y una anchura a media altura típica de varios kilómetros, lo cual significa que las medidas de éste satélite que se estudia en éste capítulo tendrán una resolución vertical del orden de 10-15 km (ver figura 4.2). La opacidad total atmosférica tiene, debido al solapamiento de las líneas del espectro de spín-rotación del O_2 , un comportamiento general de aumento hasta unos 60-61 GHz, y una posterior disminución a excepción de los picos locales de opacidad en las proximidades de las frecuencias de resonancia (figura 4.1). Precisamente en las proximidades de éstas frecuencias con alta opacidad total relativa es donde se pueden encontrar las funciones de peso con el pico a alturas más elevadas.

La transmisión atmosférica entre z e ∞ , $\Gamma_{\nu\theta}(z, \infty) = e^{-\tau_\nu(z, \infty)\sec\theta}$ guarda una relación muy sencilla con la función peso en temperatura:

$$W_{\nu\theta}(z) = \frac{\partial \Gamma_{\nu\theta}(z, \infty)}{\partial z} \quad (4.3)$$

Sentadas estas bases teóricas, vamos a ver a continuación como se aplica todo esto a la elección de frecuencias con el objetivo de realizar un sondeo óptimo del perfil de temperatura atmosférica (necesario para los modelos de predicción meteorológica).

El cálculo de las funciones de peso es muy importante para una posterior selección de frecuencias para los receptores que irán embarcados a bordo del satélite. En el marco de la colaboración entre el Departamento de Radioastronomía Milimétrica del Observatorio de París y el Observatorio Astronómico de Nacional, hemos realizado cálculos de funciones peso y opacidad atmosférica total en la región de frecuencias en torno a 60 GHz (ver figura 4.1) destinados a un proyecto de un satélite para el sondeo de temperatura de la atmósfera del CNES (Centro Nacional de Estudios Espaciales de Francia) que se presentará en la sección 4.1.8. Lógicamente, un canal real de recepción tiene una cierta anchura en frecuencias, e incluso puede estar compuesto por varias bandas (vimos el ejemplo de receptores de doble banda usados en los trabajos observacionales del capítulo 2). De ahí que para el cálculo de las funciones peso reales hay que hacer una convolución en frecuencia de funciones peso monocromáticas teniendo en cuenta la forma de la banda de cada canal. Esto suele

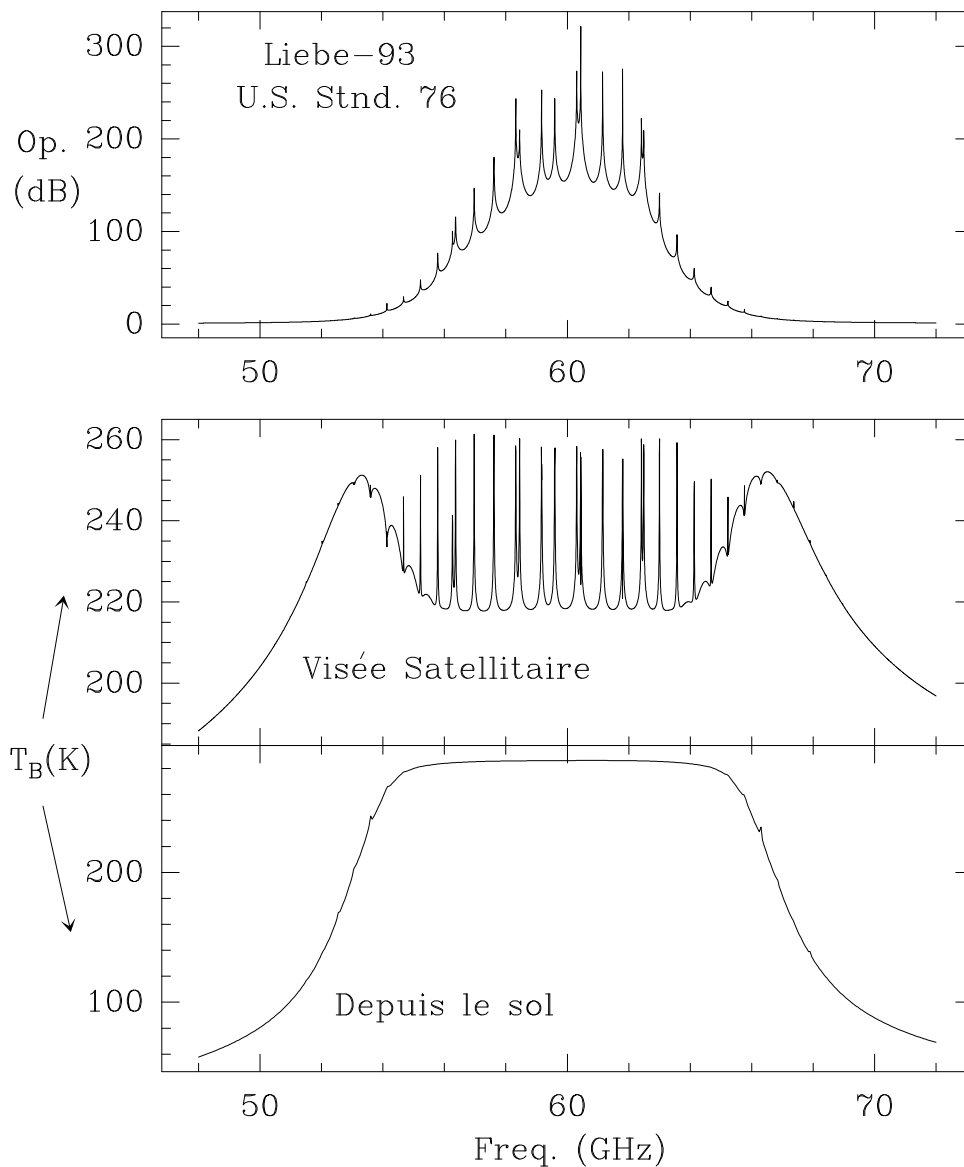


FIG. 4.1 - Simulación de la opacidad total atmosférica en la banda spín-rotación del oxígeno utilizando el modelo *Liebe* (1993) [53] para la absorción del vapor de agua y el O_2 , así como el modelo de atmósfera estándar *U.S. Stnd. 1976* [92] (superficie a 0 km). Véase el aspecto diferente que presenta la temperatura de brillo en ésta banda en el caso de observación desde el suelo o desde un satélite (en los dos casos se ha considerado una masa de aire igual a 1).

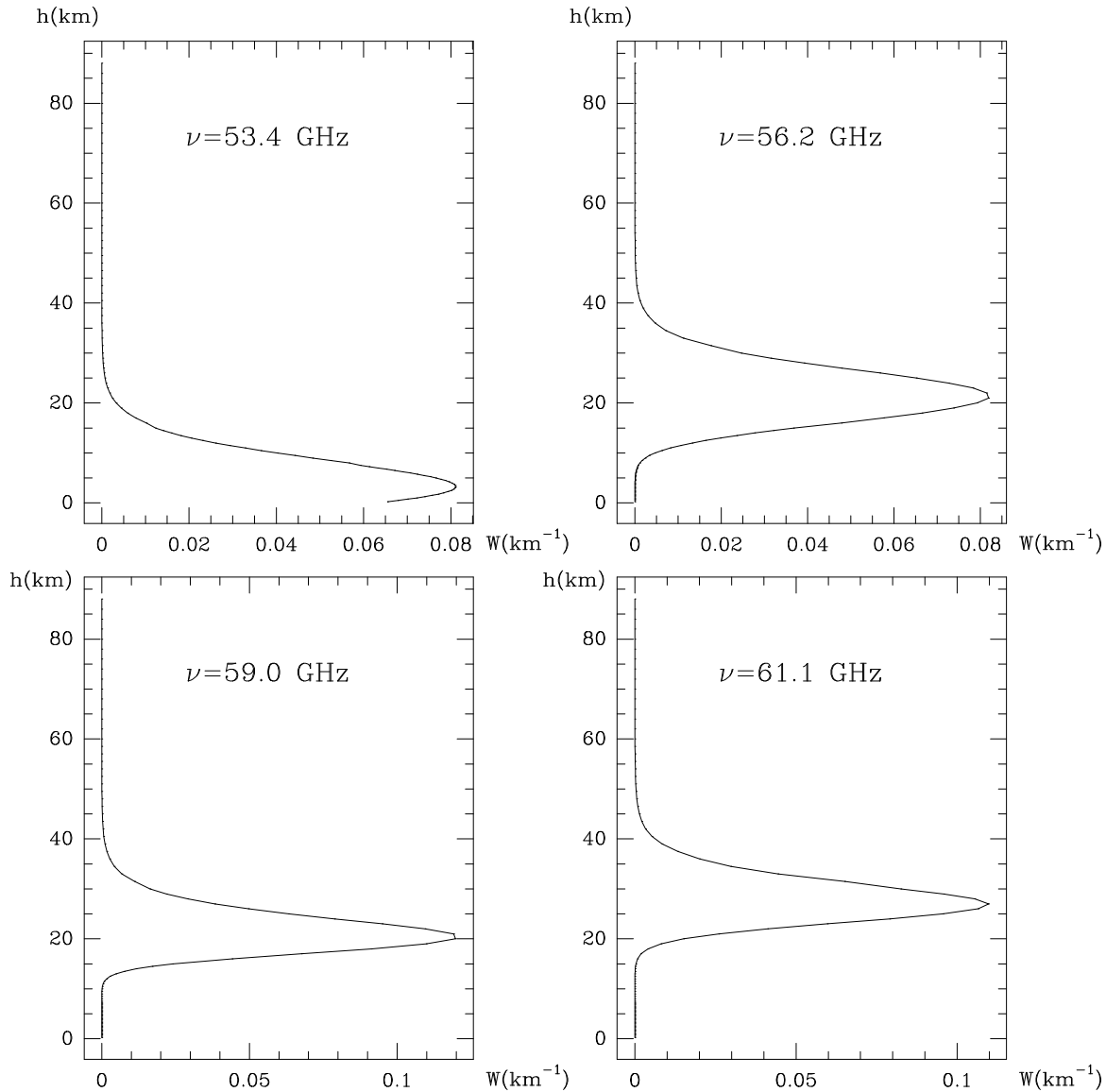


FIG. 4.2 - Ejemplos de funciones de peso en temperatura a diferentes frecuencias en la banda espín-rotación del O_2 , calculadas a partir de los modelos citados en la figura precedente. Para el cálculo de la función de peso a 53.4 GHz se debió generalizar la ecuación 4.3 para tener en cuenta la radiación atmosférica reflejada por la superficie.

tener como consecuencia un ligero incremento de la anchura espacial de dicha función (pérdida en resolución vertical). Sin embargo, la anchura $\Delta\nu$ de un canal no se puede reducir arbitrariamente ya que hay que conservar una sensibilidad aceptable para los tiempos de integración dados. . Estas y otras muchas cuestiones de tipo técnico como la selección de órbitas para el satélite, el sistema de barrido espacial de las antenas (para cubrir la mayor extensión geográfica posible), etc..., serán discutidas en el apartado 4.1.8.

En éste tipo de sondeos se trabaja por un lado a frecuencias en las que la propa-

gación de ondas electromagnéticas en la atmósfera no depende ni de la dirección ni del estado de polarización (ya vimos en la sección 3.1 que esto sucede para frecuencias alejadas más de ~ 5 MHz de las resonancias de O_2 , apartado 3.1). La propagación es entonces isótropa y la transferencia de radiación se describe mediante una ecuación escalar. Por otra parte, tenemos los canales que sondan a frecuencias muy próximas de las resonancias (menos de 5 MHz), donde la propagación es anisótropa y dependiente del estado de polarización, lo que hace necesario un tratamiento de los datos como el descrito en la sección 3.1. Para fijar los canales de sondeo hay que fijar, por tanto, una serie de reglas:

A) Cada canal debe ser sensible a un dominio de alturas diferente en la atmósfera. Veremos que existe en ello un límite superior por razones de opacidad de las líneas.

B) Se debe optimizar el nivel de sensibilidad.

C) No es conveniente colocar canales a frecuencias muy distantes pues esto complica enormemente el sistema desde el punto de vista técnico.

D) Las frecuencias elegidas no deben correr el riesgo de ser contaminadas por emisiones no naturales (comunicaciones entre satélites, redes de telecomunicaciones terrestres, etc...).

Vamos a desarrollar de forma más ampliamente cada uno de estos requisitos.

4.1.3 Funciones de peso

El programa **ATM** ha sido adaptado con el objetivo de calcular de forma precisa las funciones peso. En el apéndice A se dan las informaciones pertinentes sobre ello.

Nivel de sensibilidad

La sensibilidad de un receptor de ondas milimétricas viene dada por la cantidad mínima de energía que es capaz de detectar por encima del ruido asociado al aparato. Éste umbral depende de factores de tipo técnico así como de las condiciones de observación. Para hacernos una idea, la siguiente ecuación es válida de forma general:

$$\Delta T_S = \frac{\alpha T_S}{(\Delta \nu t)^{1/2}} \quad (4.4)$$

donde ΔT_S es el umbral de detectabilidad (a 3σ), α es una constante que toma valores entre 0.5 y 1 que engloba distintas características del sistema receptor, T_S es

la temperatura de ruido operacional (suma de las contribuciones debidas al propio receptor, al sistema de captación y transmisión de energía, así como a las condiciones atmosféricas), $\Delta\nu$ es la anchura en frecuencias del canal, y t es el tiempo total de integración. El avance de la técnica de los receptores de ondas milimétricas va optimizando poco a poco el parámetro (αT_S). Nosotros podemos mejorar el nivel de sensibilidad aumentando $\Delta\nu$ y t . En la práctica, las limitaciones que tendremos sobre ellos son las siguientes:

A) No podemos hacer B excesivamente grande sin pagar por ello el precio de un ensanchamiento de la función peso asociada al canal (pérdida de resolución en altura).

B) El tiempo de integración para cada observación está limitado por la necesidad de hacer barridos con la antena para conseguir una cobertura geográfica lo mayor posible. En la sección 4.1.8 podemos ver algunas características de distintos sistemas en proyecto.

Altitud máxima de exploración

Según hemos visto en su definición, las funciones peso están determinadas por las propiedades de absorción en diferentes altitudes de la atmósfera. De una forma general, podemos decir que en aquellas frecuencias en las que globalmente la absorción es más importante, las capas superiores absorberán y emitirán más fuertemente que a otras frecuencias de forma que la información que llega al receptor embarcado en el satélite provendrá de alturas mayores. Esto tiene su reflejo en una mayor altura del pico de la función peso a frecuencias donde la opacidad total es mayor. Así, eligiendo canales a frecuencias cada vez más próximas a las de resonancia de las líneas más fuertes del O_2 , se podrá sondear la temperatura a alturas cada vez mayores. Pero existe un límite ya que la opacidad de las líneas no crece hasta el infinito. Un análisis a la frecuencia de 61.15056 GHz (resonancia muy intensa del O_2), sin tener en cuenta el campo magnético terrestre, nos da un máximo de la función peso hacia 85 km. No obstante, nos engañaríamos al pensar que estas técnicas nos van a permitir estudiar el perfil de temperatura hasta esa altura. Esto es debido a la alteración que sufre el coeficiente de absorción a causa del efecto Zeeman a frecuencias próximas a la resonancia. Los cálculos de funciones peso monocromáticas a frecuencias separadas más de 5 MHz de la resonancia, donde dicho efecto es despreciable, muestran que los picos de las funciones de peso llegan como máximo a unos 45 km.

Este es el límite para un sistema de observación que utilice canales en la zona de frecuencias donde la propagación es anisótropa y dependiente de la polarización. A menos de 5 MHz de la resonancia hay que recalcular las matrices de funciones de peso generalizadas tal como se definieron en la ecuación 3.19. zona de sensibilidad (dada por la función peso), va a ser extremadamente más complejo y se abordará en el apartado 4.1.7.

4.1.4 Competencia con los servicios activos para el reparto de frecuencias cercanas a resonancias del oxígeno

Las observaciones pasivas de la atmósfera terrestre desde satélites para deducir parámetros físicos (perfiles de temperatura, presión o humedad) se deben efectuar en ciertas bandas de frecuencia muy específicas del espectro electromagnético (discusión en el apartado 4.1.1). Podríamos decir que dichas bandas son un recurso natural que se debe proteger ante el riesgo de un desarrollo extralimitado de los servicios activos de telecomunicación en esas mismas bandas. En general se denominan "activos" a los sistemas emisores de radiación (y eventualmente receptores), mientras que un sistema "pasivo" es aquel que sólo recibe radiación. Un radar, por ejemplo, es un sistema activo.

Las frecuencias entre 50 y 70 GHz se están empezando a explotar, por ejemplo, para la comunicación entre satélites con el fin de separar estas de las comunicaciones terrestres. Así, por ejemplo, una eventual alineación del lóbulo principal del diagrama de radiación de la antena de un satélite emisor con el lóbulo secundario de un sistema pasivo, puede contaminar suficientemente como para inutilizar la medida. El problema es aun más grave si nos damos cuenta que puede ser imposible determinar si la medida está o no contaminada. Otros proyectos de sistemas activos en tierra se están empezando a desarrollar, con la idea de satisfacer unas necesidades de comunicación locales sin interferir con otras zonas. Conviene estudiar con detenimiento cual es la potencia máxima de estas emisiones que se puede tolerar sin que exista peligro de que una señal parásita pueda llegar, debido a la difusión, a los sistemas pasivos a bordo de satélites.

Las medidas de la emisión natural atmosférica en las líneas de O_2 y H_2O , realizadas por sistemas de observación pasivos, sirven para determinar parámetros de entrada para los modelos numéricos de predicción meteorológica. La importancia de estas predicciones es muy grande en campos tan diferentes como los transportes, la

agricultura, la producción de energía, etc... La utilización de medidas contaminadas por emisiones artificiales puede acarrear varios efectos sobre la predicción numérica:

* Una medida contaminada no detectada da lugar a un dato erróneo de entrada en el modelo de predicción. Éste error se propaga amplificándose hasta poder tener un efecto inaceptable.

* Incluso si las medidas contaminadas se pueden reconocer y eliminar habrá problemas ya que el riesgo de contaminación estará concentrado en zonas urbanas lo que acarreará una falta de información que puede imposibilitar reconocer y seguir fenómenos meteorológicos de escala media.

* En los estudios de cambio climático global las interferencias sistemáticas con señales artificiales podrían interpretarse erróneamente como un recalentamiento progresivo de la atmósfera.

* Para la calibración de las medidas es necesario comparar con datos de radiosondeos en coincidencia espacial y temporal con dichas medidas (ver apartado 4.1.5). Normalmente los radiosondeos se lanzan desde estaciones próximas a zonas urbanas, donde las medidas de los satélites tendrían más riesgo de resultar contaminadas.

La situación legal actual del reparto de frecuencias es heredera de la Conferencia Mundial de Radiotelecomunicaciones (WRC, 1979) y se debe revisar (previsto para la WRC 1997) para tener en cuenta no sólo la situación actual sino también el desarrollo previsto de las telecomunicaciones en ondas milimétricas. Las tablas 4.1 y 4.2 muestran el estado actual y el propuesto por la Conferencia Europea de Correos y Telecomunicaciones (CEPT). En éste contexto nuestra contribución ha sido la modelización del espectro electromagnético atmosférico en las bandas de interés y el análisis de las posibilidades de cada frecuencia para el sondeo de los diferentes parámetros físicos atmosféricos, con contribuciones a los informes realizados por el CNES-Toulouse y el CMS-Lannion (Francia).

◦

4.1.5 Sistemas de sondeo actuales a 60 GHz. Trabajos de validación

Vamos a hablar aquí de los sistemas de sondeo a 60 GHz que están operacionales hoy en día. Así como del estudio de datos suministrados por estos instrumentos

<i>Estado legal actual del reparto de la banda 50-65 GHz</i>		
Interv. de frecuencia	Atrib. actual	prop. WRC 1997
50.2-50.4 GHz	Compartido act./pasivo	Exclusivamente pasiv.
50.4-51.4 GHz	Exclusivamente act.	Exclusivamente act.
51.4-52.6 GHz	Exclusivamente pasivo	Exclusivamente act.
52.6-54.25 GHz	Exclusivamente pasivo	Exclusivamente pasiv.
54.25-55.78 GHz	Compartido act./pasivo	Exclusivamente pasivo
55.78-58.2 GHz	Compartido act./pasivo	Compartido act./pasivo
58.2-59.0 GHz	Exclusivamente pasivo	Compartido act./pasivo
59.0-60.3 GHz	Exclusivamente activo	Exclusivamente activo (con excepción de comunic. entre satélites NGSO ¹)
60.3-61.3 GHz	Exclusivamente activo	Compartido act./pasivo (sin derecho a com. entre satélites NGSO)
61.3-64 GHz	Exclusivamente activo	Exclusivamente activo (con excepción de comunic. entre satélites NGSO)
64.0-65.0 GHz	Exclusivamente pasivo	Exclusivamente pasivo
65.0-66.0 GHz	Compartido act./pasivo	Compartido act./pasivo
66.0-71.0 GHz	Exclusivamente activo	Exclusivamente activo

TAB. 4.1 - Podemos ver que, en la situación actual, los servicios de observación pasiva de la atmósfera sólo poseen en exclusividad un intervalo muy pequeño en la zona central de la banda 50-70 GHz. Es precisamente en ésta zona donde se pueden emplazar los canales de observación para las capas más altas de la atmósfera. Es por ello que los representantes de los servicios de observación pasiva de la atmósfera desean una mejora de ésta situación para la WRC de 1997.

Órbitas no geoestacionarias

<i>Estado legal del reparto de la banda de 112-126 GHz</i>		
Frecuencia	Atrib. actual	Prop. WRC 1997
112.0-116.0 GHz	Exclusivamente pasivo	Exclusivamente pasivo
116.0-119.98 GHz	Compartido act./pasivo	Exclusivamente pasivo
119.98-120.02 GHz	Compartido act./pasivo	a negociar
120.02-126.0 GHz	Compartido act./pasivo	Compartido act./pasivo
<i>Estado legal actual del reparto de la banda de frecuencias 168-200 GHz</i>		
Frecuencia	Atrib. actual	Prop. WRC 1997
168.0-174.5 GHz	Exclusivamente act.	A discutir
174.5-176.5 GHz	Compartido act./pasivo	“
176.5-182.0 GHz	Exclusivamente activo	“
182.0-185.0 GHz	Exclusivamente pasivo	“
185.0-200.0 GHz	Exclusivamente activo	“

TAB. 4.2 - meteorológicos (cerca de la resonancia milimétrica de O₂ a 118.75 GHz y de la del H₂O a 183.31 GHz). Hasta ahora, no se ha tomado ninguna decisión sobre la atribución definitiva de esas bandas de frecuencia.

en coincidencia espacial y temporal con medidas del perfil atmosférico mediante globos-sonda, con miras a la validación de los modelos de transferencia radiativa en la banda de 50-70 GHz.

Historia. Primeras propuestas

Las primeras ideas sobre la posibilidad de realizar sondeos de la temperatura en la atmósfera de la Tierra usando alguna línea molecular intensa se hicieron a finales de los años 50. Kaplan [42] sugirió en 1959 el uso para ello de las fuertes líneas de CO₂ en torno a 15 μ m. Poco después, varios investigadores hicieron notar la posibilidad del uso de medidas en ondas milimétricas para tal fin, concretamente en torno a la fuerte banda del O₂ a 5 mm (60 GHz). Casi al mismo tiempo, Gautier y Robert ([32]) incluyen el efecto Zeeman producido por el campo magnético terrestre en estudios sobre dicha banda y señalan la necesidad de tener esto en cuenta éste efecto a ciertas posibles frecuencias cercanas a las resonancias.

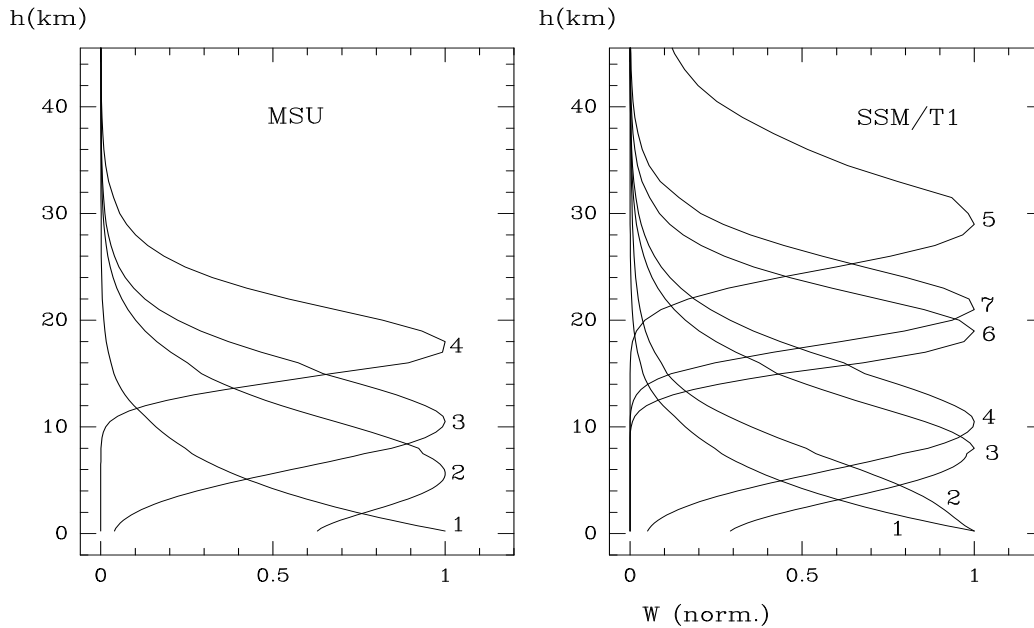


FIG. 4.3 - Izquierda: Funciones de peso de los 4 canales MSU para la atmósfera U.S. Std. Atm. (1976) y el modelo MPM-93 (Liebe, 1993) sobre la absorción del oxígeno. Los canales 1 y 2 detectan parte de la radiación emitida y reflejada por la superficie terrestre. Por eso es necesario tener en cuenta la emisividad de la superficie en el cálculo de la función de peso. Para ello hemos tomado un modelo escalar de la emisividad de superficie (Lambertz) con $e_s=0.5$. Derecha: Lo mismo para los siete canales de SSM/T1.

Sistemas operativos: MSU y SSM/T1

Los primeros satélites en embarcar sistemas de detección en el rango de frecuencias que nos ocupa fueron los de la serie TIROS-N de la NOAA ("*National Oceanographic and Aerospace Administration*", *EE.UU.*), el primero de los cuales fue lanzado en 1978. Tienen un peso total de 1421 kg de los que 194 corresponden a experiencias científicas cuyo objetivo es la medida del flujo emitido por la atmósfera de la Tierra en diferentes dominios espectrales desde el visible a las ondas milimétricas. Para una información completa del conjunto de instrumentos embarcados en esa serie de satélites se puede consultar *Werbowetzki* (1981) [98] y *Schnapf* (1985) [82]. En el contexto de éste trabajo nos interesamos en el sistema de sondeo de la temperatura hasta ~ 35 km de altura llamado MSU ("*Microwave Sounding Unit*").

MSU posee cuatro canales radiométricos de simple banda cuyas frecuencias son: 50.2-50.4 GHz (canal 1), 53.86-54.06 GHz (canal 2), 54.86-55.96 GHz (canal 3) y 57.85-58.05 GHz (canal 4). Éste instrumento observa haciendo barridos perpendiculares a la dirección del satélite en 11 pasos entre $\pm 47.35^\circ$ respecto al nadir. La resolución angular (anchura a media altura del lóbulo de antena) es de 7.5° lo que

corresponde a 110 sobre la superficie terrestre para una observación hacia el nadir desde la posición del satélite. Las funciones de peso de los canales se muestran en la figura 4.3.

Las medidas de MSU son muy útiles para chequear los modelos de transferencia radiativa de cara a la puesta en funcionamiento de nuevos sistemas de observación entre 50 y 70 GHz dotados de un mayor número de canales y sustanciales mejoras en la sensibilidad. Para el trabajo de validación disponemos de datos MSU correspondientes a los años 1990 a 1995 en coincidencia espacial y temporal con radiosondeos del perfil físico atmosférico efectuados gracias al lanzamiento de globos-sonda desde diferentes estaciones terrestres. La base de datos de radiosondeos usada, denominada EVA, ha sido compilada por el Centro de Meteorología Espacial de Lannion (Francia) y se limita a una cobertura geográfica de 40°W-40°E y 33°N-66°N (21 estaciones). Los perfiles atmosféricos de EVA proporcionan la temperatura y densidad de vapor de agua para 40 niveles de presión (definidos en *Werbowetzki*, 1981 [98]) entre 0.05 mb y 1013.0 mb. Normalmente, los perfiles atmosféricos no pueden ser medidos hasta el nivel 0.05 mb y entonces son extrapolados mediante modelos atmosféricos globales 4D (latitud, longitud, altura y época del año). A notar que ésta extrapolación puede representar problemas para ciertos tipos de estudios. Los datos de MSU son las temperaturas de brillo equivalentes para cada canal MSU corregida de los efectos de la superficie y del ángulo de observación. Es por ello que en nuestro análisis no tendremos en cuenta los canales muy sensibles a la superficie (canal 1 de MSU). Tomando las situaciones atmosféricas de cielo claro, hemos hecho cálculos de transferencia radiativa directa a las frecuencias correspondientes a los canales 2, 3 y 4 de MSU para compararlas a las medidas (corregidas) del satélite.

Otro sistema del mismo tipo que ya lleva varios años en actividad es **SSM/T1** (*"Special Sensor Microwave/Temperature Sounder"*). Posee siete canales de simple banda cuyas frecuencias son: 50.3-50.7 GHz (polarización lineal horizontal, canal 1), 53.0-53.4 GHz (horizontal, 2), 54.15-54.55 GHz (horizontal, 3), 54.7-55.1 GHz (horizontal, 4), 58.3425-58.4575 GHz (vertical, 5), 58.625-59.025 GHz (vertical, 6) et 59.275-59.525 GHz (vertical, 7). Las funciones de peso, calculadas asimismo por nuestro programa ATM, aparecen en la figura 4.3. Este sistema ha sido desarrollado por *AEROJET* y está embarcado sobre diferentes satélites pertenecientes a la DMSP (*"Defense Meteorological Satellite Program"*, EE.UU.). El sistema de barrido es perpendicular al movimiento del satélite y la resolución angular (anchura a media altura del diagrama de antena) corresponde a 175 km sobre la superficie terrestre

para observación hacia el n adir desde la posici on del sat elite.

El sistema SSM/T1 es m as completo que MSU para el estudio del perfil de temperatura. Disponemos de datos SSM/T1 proporcionados por la NOAA que, al igual que los datos de MSU presentados anteriormente, son completados con perfiles atmosf ericos obtenidos mediante radiosondeos en una determinada coincidencia espacio-temporal. Las medidas SSM/T1 se han comparado a los resultados de la transferencia radiativa sobre los perfiles obtenidos en los radiosondeos. Al igual que en la base de datos EVA, existe el inconveniente de que los radiosondeos suelen extenderse como m aximo hasta niveles de 10 mb (lo que para una atm osfera est andar corresponde a unos 30 km), ocurriendo a veces que el sondeo se acaba entre 100 y 10 mb. Dependiendo del rango de alturas a que sea sensible el canal (dado por su funci on peso) podremos utilizar o no el perfil dado por el globo-sonda para abordar la transferencia radiativa directa y comparar su resultado con las medidas. Dado que en  este conjunto de datos, al contrario de los suministrados para MSU (EVA), no se ha efectuado previamente ninguna extrapolaci on para rellenar los niveles que faltan en los perfiles, hemos incorporado una subrutina de extrapolaci on a ATM para tal menester (*Karcher*, 1990 [43]). As ı, caso de disponer de informaci on al menos hasta 10 mb, el programa extrapola hasta 0.1 mb teniendo en cuenta las coordenadas geogr aficas y la  epoca del a no (modelos 4D).  Este procedimiento no da resultados completamente satisfactorios ya que se observa una dispersi on de resultados muy grande para el canal 4 de SSM/T1 (aquel cuya funci on peso indica una sensibilidad m axima en zonas que los globo-sonda no alcanzan de forma que los c alculos usan valores de P y T generados por el algoritmo de extrapolaci on. En nuestro an alisis hemos rechazado todos los perfiles atmosf ericos que no llegan al nivel 50 mb y hemos incrementado las exigencias de coincidencia espacio-temporal entre las medidas del sat elite y el globo-sonda respecto a la impuesta en la creaci on de los propios ficheros (300 km, 6 h) para dejarla en 50 km de distancia m axima entre la estaci on de lanzamiento del globo-sonda y el punto subsat elite, y 3 h, como m aximo, de diferencia temporal. Los modelos de absorpci on del ox igeno que se han comparado han sido MPM-93,89,93 [53], [51], [50], todos ellos incluidos en ATM; y FASCOD3, *Clough et al.*, (1989) [20].

Los detalles concernientes a  este estudio se detallan en el art iculo, *Comparison of direct radiative transfer models in the 60 GHz O₂ band with SSM/T-1 and MSU observations* pde *Pardo et al.*, (1995) [67] presentado en la Conferencia Mundial TOVS de 1995 en Nueva Zelanda (consultar as ı mismo la referencia complementaria

Fleming et al., 1991 [28]).

La conclusión principal de éste trabajo es que los modelos subestiman el valor de la temperatura de brillo respecto a los valores que se suministran como productos oficiales de las observaciones de los satélites. Algunas diferencias son independientes de los parámetros atmosféricos u observacionales (temperatura, humedad, ángulo, latitud...) et se pueden atribuir a la calibración de los instrumentos. En las frecuencias que hemos analizado aquí, los tres modelos MPM tienen un comportamiento similar respecto a las medidas. En el caso de SSM/T1, el modelo FASCOD3 presenta una diferencia sistemática más grande que el resto para los canales troposféricos, pero se acerca ligeramente más en el caso de los canales más altos. Encontramos una dependencia en latitud de la diferencia modelo/medida para los canales 3 y 4 de SSM/T1. Dicha diferencia es mayor para FASCOD3 que para los modelos MPM. Para más adelante estamos interesados en realizar comparaciones directas con los datos brutos (en términos de temperatura de antena) con el fin de eliminar los efectos sistemáticos que pueden introducir los algoritmos de corrección de los datos de los satélites.

De acuerdo a éste trabajo, y para el tratamiento de los datos de futuros instrumentos que vamos a describir en el apartado siguiente, hemos sugerido la utilización de un modelo de absorción del tipo MPM con el fin de realizar la transferencia radiativa directa en la banda de O_2 ya que ese tipo de modelos son más fáciles de utilizar y parecen dar mejores resultados que FASCOD3 en el dominio de frecuencias que nos ocupa. Se ha instalado una versión adaptada de ATM en el Centro de Meteorología Espacial de Lannion (Francia). En éste estudio, las tres versiones revisadas de MPM dan resultados similares en la región de frecuencias que nos interesa, aunque los resultados son bastante diferentes a otras frecuencias, especialmente en las ventanas atmosféricas (*English et al.*, 1995 [25]). Las diferencias reales entre simulaciones y observaciones se pueden corregir fácilmente en el proceso de inversión de las medidas.

4.1.6 Sistemas futuros a 60 GHz: AMSU-A, SSMIS, MTZA,...

La NOAA, tras su experiencia MSU sobre los satélites Tiros-N, ha preparado el nuevo proyecto avanzado denominado **AMSU-A** (*Advanced Microwave Sounding Unit A*) para el estudio del perfil de temperatura atmosférica. Éste sistema todavía no es operativo aunque se espera que sustituya a MSU sobre la nueva serie de

SSM/T1 (début 1994)									
Ca.	Ty. d'at.	MPM85		MPM89		MPM93		FASCOD3	
		$\Delta T(K)$	$\sigma(K)$	$\Delta T(K)$	$\sigma(K)$	$\Delta T(K)$	$\sigma(K)$	$\Delta T(K)$	$\sigma(K)$
3	tropic.	1.36	0.37	1.69	0.37	1.37	0.36	3.56	0.56
	interm.	1.49	0.53	1.72	0.54	1.56	0.54	2.89	0.65
	polaire	0.97	0.76	1.16	0.80	1.13	0.68	2.21	1.08
4	tropic.	2.04	0.42	2.18	0.42	1.94	0.42	3.79	0.43
	interm.	1.31	0.62	1.41	0.62	1.31	0.63	2.14	0.71
	polaire	1.19	0.72	1.27	0.73	1.22	0.71	1.96	0.89
5	tropic.	0.41	1.45	0.41	1.45	0.62	1.46	-0.13	1.49
	interm.	1.92	2.51	1.92	2.51	2.08	2.51	1.47	2.44
	polaire	1.87	4.01	1.87	4.01	2.03	3.98	1.51	3.97
6	tropic.	1.76	0.45	1.81	0.45	1.99	0.44	1.67	0.48
	interm.	0.81	0.98	0.82	0.98	0.84	0.99	0.98	1.02
	polaire	0.66	0.69	0.66	0.69	0.65	0.70	0.90	0.63
7	tropic.	1.50	0.70	1.28	0.70	1.60	0.71	0.80	0.70
	interm.	1.07	0.98	1.03	0.98	1.10	0.98	1.08	1.02
	polaire	0.98	0.83	0.97	0.82	1.00	0.84	1.08	0.73

MSU (EVA-92 et MPM93)		
Canal	$\Delta T (K)$	Dev. Std. (K)
2	1.16	0.70
3	2.42	0.52
4	2.12	0.90

TAB. 4.3 - Arriba: Diferencias entre simulaciones y medidas SSM/T1 para 120 coincidencias (entre el punto de lanzamiento del globo-sonda y el punto subsatélite) de menos de 50 km y tres horas 3, correspondientes a los tres primeros meses de 1994. 30 coincidencias corresponden a atmósferas de tipo tropical, 59 a latitudes intermedias y 31 a atmósferas polares. Abajo: Resultados de un análisis similar realizado sobre datos MSU y radiosondeos sobre la zona europea durante el año 1992 (EVA-1992). En éste caso sólo se comparó con resultados de MPM-93.

satélites de la NOAA a finales de 1997. Es posible que ese sistema se embarque igualmente sobre los satélites europeos METOP a partir del año 2000. El conjunto de canales seleccionado para AMSU-A se encuentra en la tabla 4.4. Las funciones peso correspondientes a los canales del 3 al 14 (1, 2 y 15 están situados en "ventanas" atmosféricas y sirven para otro tipo de estudios) pueden verse en la figura 4.4. Vemos que esta elección de frecuencias reparte de forma muy conveniente las funciones de peso de los distintos canales respecto a la altura. °

Con objeto de extender la capacidad del sistema hasta capas más altas, se han propuesto seis canales adicionales para una versión futura del instrumento. Todos ellos serían de doble banda con la inferior centrada en las cercanías de la resonancia 7+ del O₂ a 60.43478 GHz y la superior en torno a la 9+ a 61.15056 GHz. Para esos canales se debe tener en cuenta el campo magnético terrestre a la hora de hacer la inversión de los datos, ya que las frecuencias se hallan situadas a menos de 5 MHz de la resonancia. La figura 4.4 muestra los cálculos que hemos realizado de las matrices función peso asociadas a estos canales suponiendo que se trabaja en polarización circular (no tendría sentido la polarización lineal ya que la simetría de la opacidad respecto a ν_c en esa polarización haría redundantes algunos canales según puede verse en la figura 4.6). Finalmente, señalaremos que dentro de las especificaciones técnicas de AMSU-A se contempla una mejora de la resolución geográfica respecto a los sistemas actuales. Esta llegará a ser de unos 49 km sobre la superficie de la Tierra para una observación hacia el nódido, lo que corresponde a una apertura del diagrama de radiación de 3.3 grados, y órbita a 850 km sobre la superficie terrestre. Un barrido completo tomará 6.5 s con un total de 30 pixels, de forma que el tiempo de integración por pixel será $t = \frac{6.5}{30} = 216\text{ms}$. Usando la ecuación 4.4, pero a 1 σ , y tomando una temperatura de sistema (T_{sys}) de 2300 K y una anchura de banda típica de unos 250 MHz, obtendremos una sensibilidad $\Delta T = 0.3$ K en promedio.

Por otro lado AEROJET, la sociedad que ha puesto a punto SSM/T1 para la DMSP (fuerza aérea de los Estados Unidos), tiene perfilado un nuevo proyecto de sistema de sondeo más completo llamado **SSMIS** ("*Special Sensor Microwave Imager Sounder*") con 13 canales dedicados al estudio de T(z) sobre un total de 24 [12]. Este sistema volará sobre los satélites de la serie 5D-3. La tabla 4.4 nos muestra la posición de las frecuencias centrales de los canales SSMIS dedicados al estudio del perfil de temperatura, junto con la polarización a que son sensibles. Los canales 1 a 7 y el 24 se usan para estudios en la baja atmósfera (hasta ~ 30 km), mientras que los canales 19 a 23, situados muy cerca de una resonancia del O₂,

AMSU-A			
Canal	$\nu_c(GHz)$	$\Delta\nu(MHz)$	Sensib. $\delta T(K)$
3	50.3±0.050	±40	0.4
4	52.8±0.105	±95	0.25
5	53.596±0.115	±85	0.25
6	54.4±0.105	±95	0.25
7	54.94±0.105	±95	0.25
8	55.5±0.0875	±77.5	0.25
9	57.290344±0.0875	±77.5	0.25
10	57.290344±0.217	±39	0.4
11	57.290344±0.3222±0.048	±18	0.4
12	57.290344±0.3222±0.022	±8	0.6
13	57.290344±0.3222±0.010	±4	0.8
14	57.290344±0.3222±0.0045	±1.5	1.2
16	60.79267±0.3539	±1.5	1.5
17	60.79267±0.3558	±0.4	2.8
18	60.79267±0.3569	±0.25	3.5
19	60.79267±0.3579	±0.5	2.5
20	60.79267±0.3589	±0.25	3.5
21	60.79267±0.3600	±0.4	2.8
SSM/IS			
Canal	$\nu_c(GHz)$	polariz.	Sensib. $\delta T(K)$
1	50.300	H	0.4
2	52.800	H	0.4
3	53.956	H	0.4
4	54.400	H	0.4
5	55.500	H	0.4
6	57.290	H	0.4
7	59.400	H	0.5
19	63.2832±0.2853	H+V	1.9
20	60.7927±0.3579	H+V	1.9
21	60.7927±0.3579±0.002	H+V	1.4
22	60.7927±0.3579±0.0055	H+V	1.0
23	60.7927±0.3579±0.016	H+V	0.6
24	60.7927±0.3579±0.050	H+V	0.7/0.35

TAB. 4.4 - Características de los sistemas futuros AMSU-A y SSM/IS. Hacemos ver que gran parte de los canales se hallan en la zona de frecuencias compartida con los servicios activos (ver tabla 4.1), por lo que un análisis detallado de los posibles riesgos que esto puede suponer es absolutamente imprescindible. Los seis últimos canales de AMSU-A no formarán parte del equipo operacional en una primera fase.

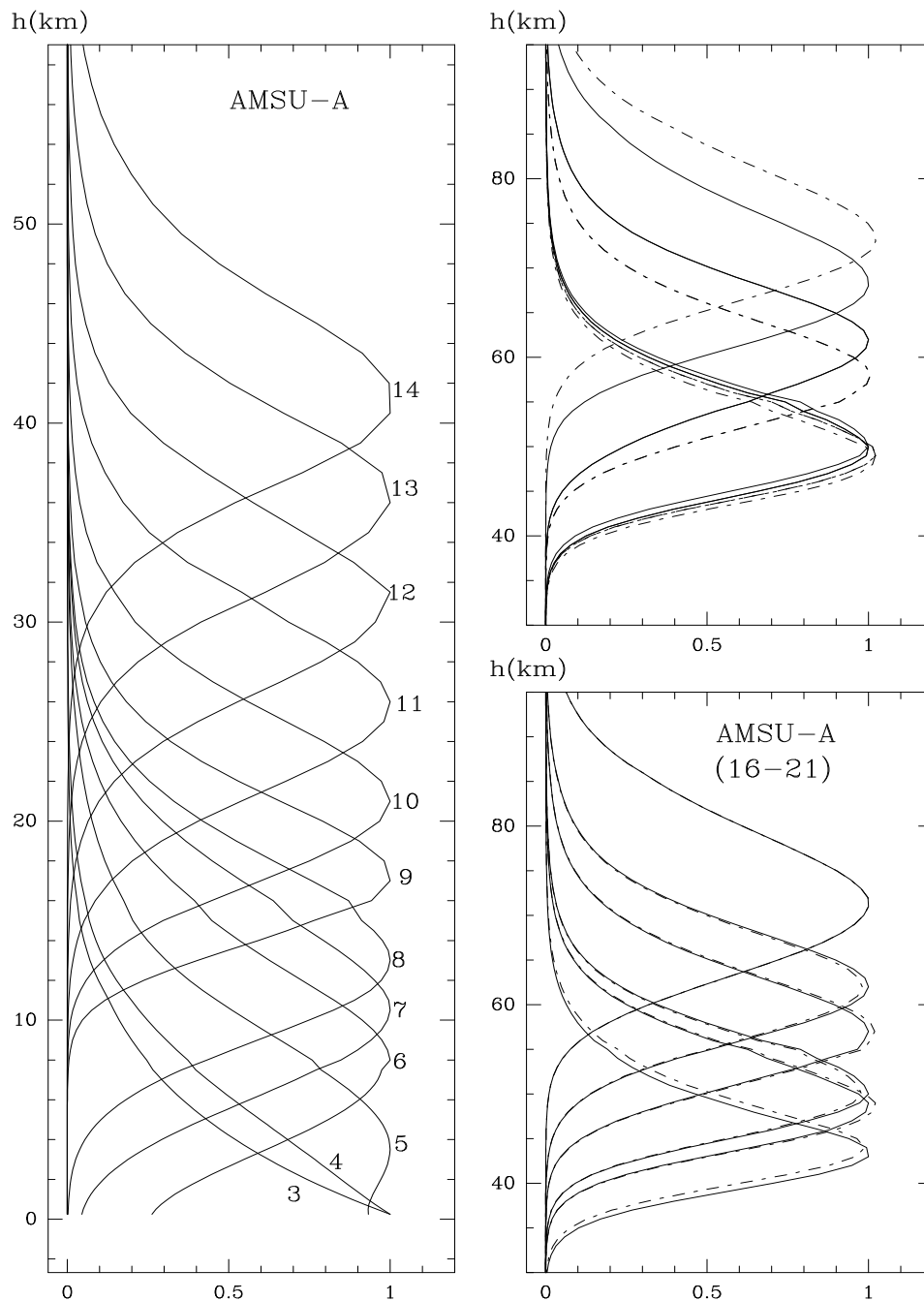


FIG. 4.4 - Izquierda: Funciones de peso normalizadas de los canales 3 a 14 de AMSU-A calculadas por ATM. Derecha: Funciones de peso para las frecuencias centrales en la banda superior de los canales 16 a 21 de AMSU-A para las polarizaciones lineales (arriba) o circulares (abajo) calculadas aquí para una observación al nadir sobre el punto $40^{\circ}\text{N}, 0^{\circ}\text{E}$. Si suponemos una polarización circular para los receptores, obtendremos una buena repartición de las zonas de sensibilidad de los canales, evitando los problemas de redundancia que tienen lugar en el caso de polarización lineal.

sirven para el estudio en niveles más altos (del nivel 10 mb al 0.03 mb, es decir, hasta unos ~ 70 km). En estos últimos canales la inversión de los datos debe tener en cuenta el ya citado efecto Zeeman sobre las líneas de O_2 . Estos canales para la alta atmósfera están pensados para trabajar en polarización lineal. Se puede ver que para una desviación de ~ 1 MHz respecto a la frecuencia de resonancia, la función peso se degrada presentando dos picos y quedándose una zona de alturas sin cubrir. Para obtener una función peso centrada en esa zona, se ha situado un canal de doble banda en las resonancias 15+ y 17+ (canal 19, véase la figura 4.5 y la referencia *Rosenkranz et Staelin*, 1988 [79]).

° Finalmente, otro proyecto existente es MTZA que será embarcado sobre los satélites meteorológicos rusos METEOR-3M. Estará dotado de 10 canales y un barrido espacial cónico. No disponemos, por el momento, de mucha más información sobre los detalles técnicos concretos de éste instrumento.

4.1.7 Exploration de la température au-delà de ~ 50 km.

Hemos visto en el apartado 4.1.6 que los dos sistemas en desarrollo (SSM/IS y AMSU-A) tiene previsto canales a frecuencias muy próximas a las resonancias de oxígeno situadas a 60.434776 GHz con el objetivo de prolongar el estudio de los perfiles de temperatura más allá de 50 km. Vamos a discutir aquí el problema del tratamiento de las observaciones de estos canales con ayuda de la teoría que incluye el efecto Zeeman (presentada en la sección 3.1).

La figura 4.6 muestra la temperatura de brillo calculada por nuestro modelo en los alrededores de la línea 9+ del oxígeno molecular ($\nu_c=61.15056$ GHz) con y sin el campo geomagnético para una observación desde satélite dirigida hacia la superficie terrestre. Esta figura pone en evidencia claramente que los datos suministrados por los canales de “alta atmósfera” (muy próximos a las resonancias) están afectados por el campo magnético. Hemos representado solamente los elementos de la diagonal principal de la matriz T_B , que corresponden a las temperaturas de brillo calculadas para polarización lineal H (T_{B11}) o V (T_{B22}). Hemos representado igualmente los elementos diagonales de T_B pero en la base de polarizaciones circulares (a derechas e izquierdas). Los elementos no diagonales, son al menos un orden de magnitud menores. También hemos realizado cálculos de la matriz de función de peso en temperatura (definida en la ecuación 3.18) para los canales 16 a 21 de AMSU-A. La posición central de la banda superior de estos canales se muestra en la figura 4.6. Si

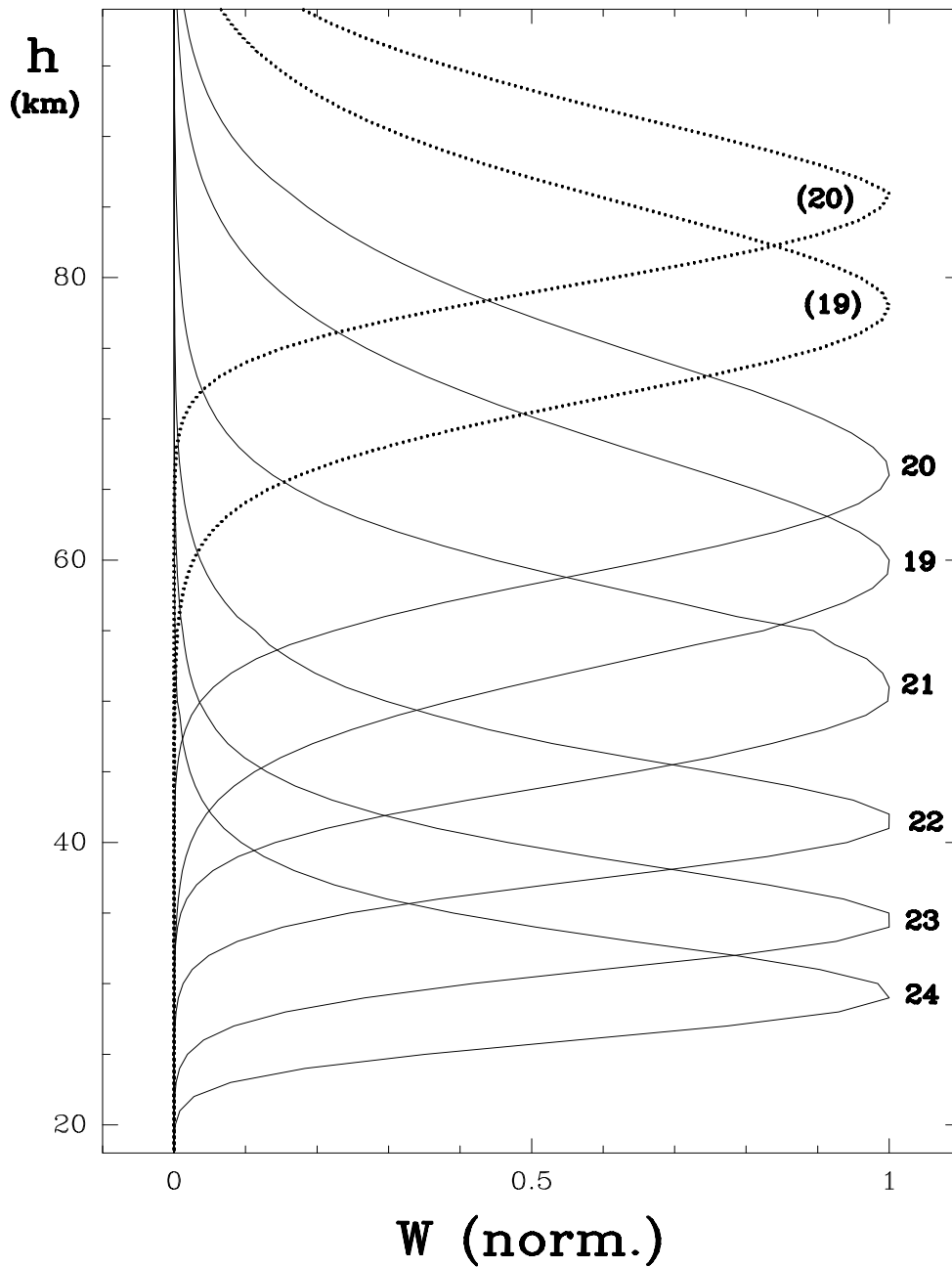


FIG. 4.5 - Funciones de peso para las frecuencias centrales en la banda superior de los canales 19 a 24 de SSM/IS (trazos continuos). Este sistema trabaja en polarización lineal. La figura muestra los elementos de la matriz de función de peso asociados a una polarización lineal para observación al nadir sobre el punto [Lat.=40°N,Long=0°]. Como comparación se muestra en la misma figura, en trazos discontinuos, los mismos cálculos para los canales 19 y 20 pero sin tener en cuenta el campo magnético terrestre. El dominio de alturas de las funciones peso cambia en éste caso (línea de puntos).

consideramos que el receptor para estos canales trabaja en polarización lineal, podremos darnos cuenta fácilmente que los canales 17 a 21 así como los 18 y 20 serían redundantes, es decir, que sus funciones de peso se centran prácticamente a la misma altura y tienen más o menos la misma anchura. Sin embargo, considerando que los canales 16 a 21 de AMSU-A funcionan en polarización circular ya no tendremos esa redundancia y, además, sus funciones de peso estarán repartidas verticalmente de forma muy regular. Esto se puede ver más claramente en la figura 4.4. De forma general, el efecto Zeeman hace descender la altitud de exploración para los dispositivos de los que hablamos. En la figura 4.7 podemos ver una comparación entre la función de peso en el centro de la línea 7+ del oxígeno con y sin el efecto del campo geomagnético. A esta frecuencia, pasamos de una función de peso que llega a 85 km a una matriz función peso cuyos elementos $W_{\nu 11}(z)$ y $W_{\nu 22}(z)$ se centran a ~ 65 km en el máximo (en la base LH, LV). El efecto Zeeman hace descender la altitud de sondeo para observaciones próximas de las resonancias ya que la opacidad disminuye a esas frecuencias respecto al caso sin campo magnético (figuras 4.6 y 4.7).

El efecto Zeeman también hace que se desplace el máximo de opacidad total hacia una frecuencia ligeramente desplazada del centro de la resonancia rotacional para polarizaciones circulares (allí donde las componentes σ son más intensas, dependiendo del valor exacto de la intensidad del campo magnético).

4.1.8 Estudio y selección de frecuencias para un proyecto “Push-Broom” a 57 GHz del CNES

Uno de los trabajos realizados en el contexto de esta tesis ha sido la evaluación científica de un proyecto del Centro Nacional de Estudios Espaciales (Francia): un sistema de sondeo de temperatura para observaciones desde satélite en la banda de espín-rotación del oxígeno molecular, con el objetivo de obtener campos de temperatura y presión para alimentar los modelos de previsión meteorológica. Los resultados de éste estudio han constituido tres informes técnicos para el CNES: 961/93/CNES/1012/00-I, 961/93/CNES/1012/00-F et 961 /CNES/94/1271/00.

Los dos aspectos anaizados para éste instrumento fueron la geometría de observación y la elección de los canales de sondeo. La idea era definir un instrumento con capacidades equivalentes como mínimo a las del radiómetro AMSU-A antes descrito. En éste estudio, se dió prioridad a facilitar el trabajo técnico posterior.

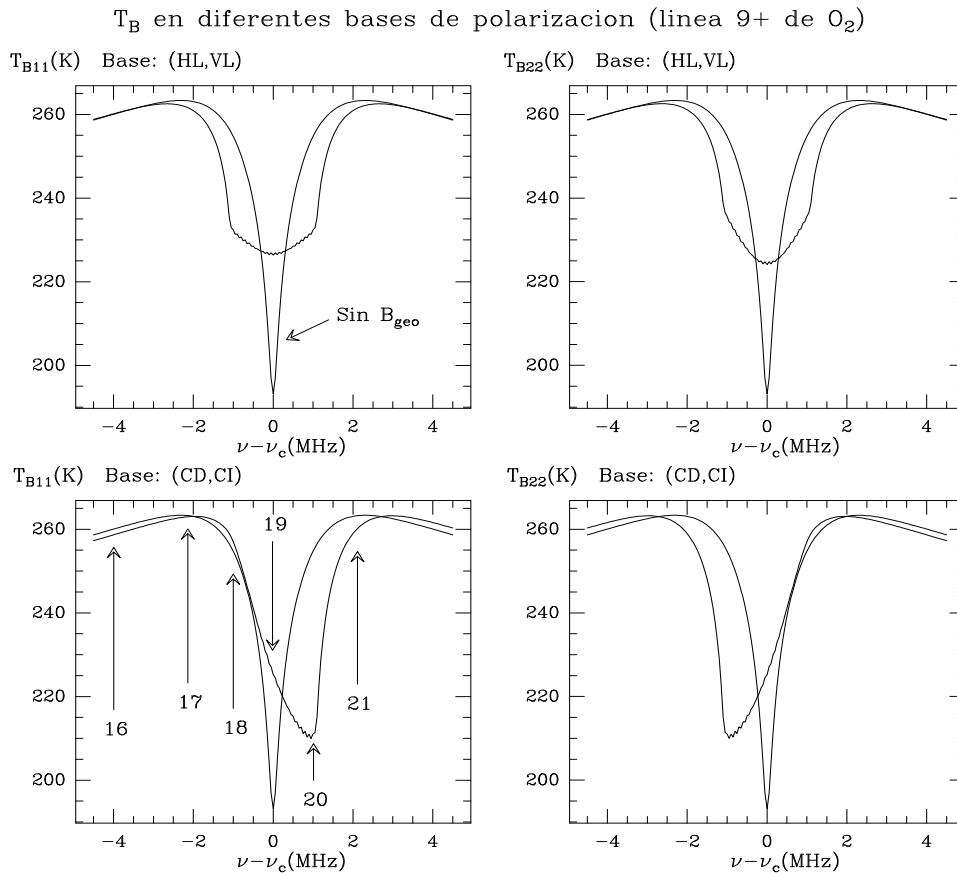


FIG. 4.6 - Temperaturas de brillo en los alrededores de la resonancia rotacional 9+ del oxígeno molecular ($\nu_c=61.15056$ GHz), con y sin campo geomagnético, generadas por el modelo ATM para una observación desde satélite hacia el nódido. La banda superior de los canales 16 a 21 de AMSU-A se sitúa en esta región. Hemos indicado la posición de las frecuencias centrales de estas bandas para ver mejor las diferencias que pueden existir en el caso sin campo magnético. La absorción central se debe a la disminución de la temperatura al pasar por la mesosfera cuando la radiación va camino del satélite.

Geometría de observación

Los radiómetros del tipo en estudio aquí que están actualmente en servicio (MSU a bordo de los satélites TIROS-NOAA, y SSM/T1 - SSM/T2 a bordo de los DMSP, éste último a ver en el apartado 4.2) o que lo estarán muy pronto (AMSU-A et AMSU-B) serán de barrido mecánico, rectilíneo, y perpendicular a la trayectoria del punto sub-satélite. Vamos a resumir aquí las características de barrido del radiómetro AMSU-A que sirven de base a ésta reflexión. Para todas las frecuencias, la anchura de haz a 3dB es de 3.3° , y la eficacia del haz supera el 95%. La proyección en el suelo de los treinta pixels generados son contiguas al nivel de 3 dB. El barrido va de $+ a - 50^\circ$ para asegurar una cobertura total de 2343 km en el suelo, para una altura

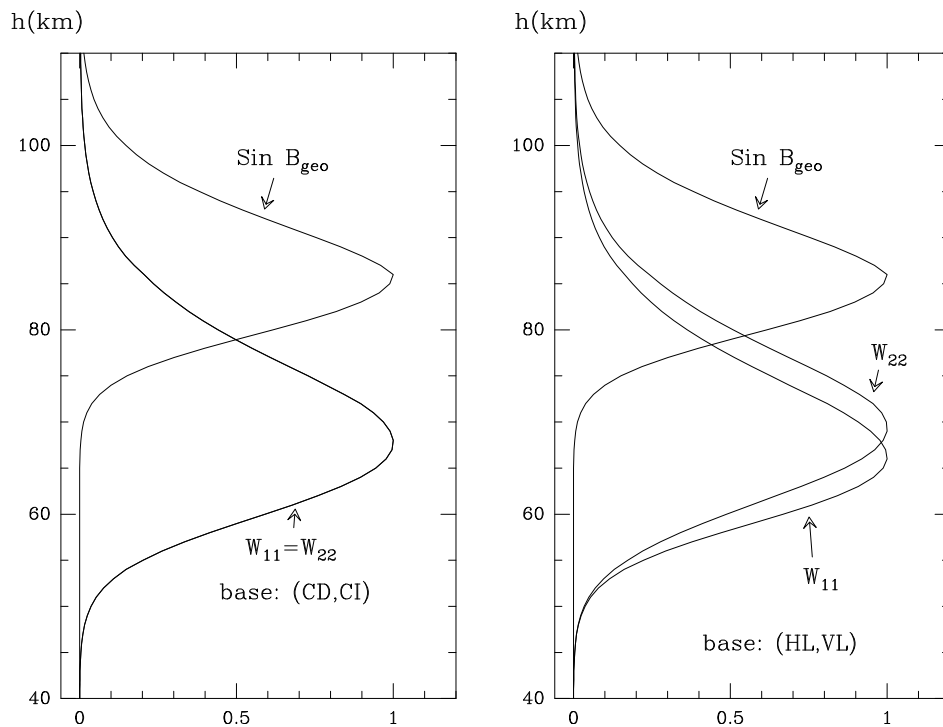


FIG. 4.7 - Comparación entre la función de psp en el centro de la línea 7+ del oxígeno con y sin el efecto del campo geomagnético. La base de polarizaciones es LH, LV

nominal de la órbita de 870 km. La polarización de los canales siempre es lineal (una combinación variable y et conocida de las polarizaciones H y V en función del ángulo de barrido).

Sin embargo, las "cámaras" microondas de tipo SSM/I (también a bordo de los satélites DMSP, ver *Holliger*, 1987 [38]) son de barrido cónico, con un ángulo de observación constante (del orden de 50°) que cubre zonas de tamaño igual sobre la superficie. Para éste ángulo observación próximo a 50° , la sensibilidad al viento de superficie en el mar es máxima caso de disponer de medidas en dos polarizaciones lineales ortogonales en una ventana atmosférica. Entonces, la velocidad del viento de superficie se puede restituir a partir de esas observaciones. A título de ejemplo, con un ángulo de barrido constante de 53° , SSM/I escanea 64 pixels en cada barrido a 19, 22 y 37GHz (128 pixels a 85GHz), con un pequeño recubrimiento de los pixels a 3dB. Dicho recubrimiento es función de la posición de los pixels en el barrido. La cobertura en el suelo es de 1400 km, para una órbita a 833 km de altitud. La eficacia del haz se encuentra entre 91% y 96% y el grado de polarización cruzada es inferior al 2%.

El barrido contemplado para SSM/IS es de tipo cónico, con un ángulo constante respecto a la superficie de 53.1° y una cobertura total de 1707 km.

El concepto “push-broom”, contemplado por el CNES conserva las ventajas del barrido cónico con un ángulo de sondeo constante respecto al nódido y con la ventaja de una cobertura simultánea de todos los pixels. Esto se consigue al reemplazar el barrido mecánico por un sistema de recepción consistentes en varias bocinas en paralelo de forma que cada una de ellas reciba la proveniente de un pixel diferente. Esto hace que, respecto a los barridos que fueron presentados antes, el tiempo de integración sobre cada línea de observación se multiplica por el número total de bocinas. La sensibilidad radiométrica (ΔT) se ve dividida por la raíz cuadrada de ese número (véase la ecuación 4.4). Éste sistema es usado corrientemente en longitudes de onda del visible para observaciones desde satélite. Su aplicación al dominio de las ondas milimétricas tiene ya un precedente. Se trata de un sistema a 34 GHz realizado para MATRA en colaboración con el Observatorio de París-Meudon (véase *Tabart*, 1991 [84]). Éste sistema se utilizó para observaciones de la superficie terrestre embarcando el sistema en un avión. Para un sistema de detección de éste tipo, la antena no es un paraboloide sino un toro parabólico generado por la rotación de un arco de parábola alrededor de un eje diferente del suyo. El lugar geométrico de los focos es un arco de circunferencia perpendicular al eje de rotación cuyo centro está sobre eje. Las bocinas de recepción de deben situar en éste arco de circunferencia para permitir la recepción de la radiación procedente de las diferentes líneas de observación deseadas. El diagrama de radiación de cada bocina tendrá una abertura angular adaptada al campo total que se debe cubrir y al número de bocinas utilizadas.

Podemos evaluar lo que la utilización de un sistema “Push-Broom” puede suponer de mejora respecto a un instrumento como AMSU-A. Éste último sistema realiza un barrido completo en 6.5 s (tiempo de integración por pixel = $\frac{6.5}{30} = 216$ ms). Las nuevas tecnologías de preamplificadores de bajo ruido deben permitir la obtención de valores de la temperatura de sistema (T_S) de unos 550 K. Si consideramos una anchura de banda de 20 MHz, la sensibilidad obtenida para 6.5 s de tiempo de integración es $\Delta T=0.05$ K. Podríamos aprovechar estas ventajas para mejorar la resolución geográfica hasta unos 10 km con un tiempo de integración reducido a 1.5 s. De ésta forma tendríamos un nivel de sensibilidad de ~ 0.1 K.

Un sistema como el que acabamos de describir tiene el inconveniente principal de la complejidad del sistema de recepción comparado a los sistemas clásicos de barrido.

Impacto del ángulo de observación sobre las funciones de peso del instrumento

En el caso de utilización de un barrido de tipo perpendicular, se pensó primero en analizar el impacto del ángulo de observación sobre las funciones de peso de los canales de sondeo. Supongamos un canal de sondeo insensible a la emisión de la superficie terrestre (frecuencia típica entre 57 y 63 GHz). La solución general de la ecuación de transferencia radiativa para una observación de satélite (2.13) permite expresar la función de peso, para el caso de observación hacia el nódido, de la siguiente forma:

$$W_0(\nu, z) = e^{-\tau_\nu(z, \infty)} \kappa_\nu(z) \quad (4.5)$$

donde θ es el ángulo respecto al nódido, τ_ν es la opacidad, κ_ν el coeficiente de absorción y z la coordenada vertical. Para observación según un ángulo θ respecto al nódido tendremos la siguiente función de peso:

$$W_\theta(\nu, z) = W_0(\nu, z) \sec\theta e^{-\tau_\nu(z, \infty)(\sec\theta - 1)} \quad (4.6)$$

El efecto del ángulo de observación sobre la función de peso está descrito por el término $\sec(\theta)e^{-\tau_\nu(z, \infty)(\sec\theta - 1)}$. Ésta es una función creciente con la altitud. Para $z=0$ dicha función toma el valor $\sec\theta e^{-\tau_\nu(0, \infty)(\sec\theta - 1)}$ mientras que en $z=\infty$ el valor es cero ya que la opacidad vale 0. El efecto de multiplicar la función de peso para el nódido por ésta función creciente con la altura conduce a hacer subir la posición del máximo, con poca influencia sobre la anchura total de la función de peso. Hemos realizado cálculos para las frecuencias de AMSU-A para los ángulos de observación siguientes: 0, 20, 40, 60 grados. Se usó la atmósfera U.S Standard 1976 y el modelo de absorción de *Liebe et al* (1993) [53]. Para 50° de ángulo de observación, los cambios en la posición del pico de la función de peso son del orden de 2.5 a 3km, par anchuras a media altura típicas de 12-15km. Esto no tiene una influencia significativa sobre los objetivos científicos a alcanzar, sobre todo teniendo en cuenta que, si se impone éste tipo de observación, se podría modificar ligeramente la frecuencia central de los canales de sondeo para compensar ese efecto.

Influencia del ángulo de observación sobre la sensibilidad a los parámetros de superficie

Cuando a partir de medidas radiométricas se intenta determinar el perfil de temperatura en la atmósfera, la contribución de la superficie se debe considerar

como un ruido que debemos tratar de evitar. Ésta contribución es especialmente molesta cuando se trata de sondear regiones de la baja troposfera. Además, si bien la contribución atmosférica sobre la observación se modifica de forma relativamente simple en función del ángulo de observación θ (globalmente según $\sec(\theta)$), no sucede lo mismo con la contribución de la superficie, cuyo comportamiento en función del ángulo de observación depende de diferentes factores, entre ellos el viento en la superficie del mar que juega un papel esencial. En éste contexto puede resultar conveniente el tener que tratar un único ángulo de observación para evitar tener introducir en la restitución del perfil de temperatura un error dependiente del ángulo.

Para el proyecto *push-broom*, las funciones de peso de los canales de sondeo se sitúan todas bastante altas y, por tanto, poco o nada contaminadas por la emisión de la superficie. La influencia del ángulo de observación sobre la sensibilidad a los parámetros de la superficie no es por ello un factor determinante. Se elegirá preferentemente una recepción en polarización lineal, por razones de comodidad técnica. Para una polarización vertical y unos 53° de incidencia, la emisividad del mar es grande pero prácticamente independiente del viento. La emisividad en polarización H es más débil (el mar aparece como un fondo frío, lo que facilita el tratamiento de los datos atmosféricos) pero muestra una fuerte dependencia con el viento. Sobre los continentes y para cualquier polarización, la emisividad es más elevada. Se recomienda por tanto, sin importar cual sea el tipo de barrido (cónico o rectilíneo), el recibir en polarización lineal, H, V o una combinación de las dos.

Influencia del tipo de observación sobre la resolución horizontal

En el caso de barrido cónico, la deformación de los pixels, de uno a otro, es bastante menor que en el caso de un barrido perpendicular. Sin embargo, salvo configuración particular de la antena, los pixels son todos elípticos en el caso de un barrido cónico. Por otra parte, con éste tipo de observación, la representación de los pixels bajo forma de imagen tiene más sentido y, a menudo, muy útil para una aproximación más fácil a ciertos fenómenos atmosféricos. En el caso de ángulos de observación no constantes, no sólo los pixels hacia los extremos del barrido están muy deformados sino que, además, las informaciones de los diferentes pixels no se pueden comparar de forma inmediata, ya que corresponden a diferentes ángulos de incidencia sobre la superficie.

Lobes secondaires

Para un radiómetro microondas a bordo de un satélite, sin importar las condiciones de superficie y de atmósfera, la Tierra aparece como un cuerpo caliente respecto al fondo del cielo (2.7K). Con un ángulo de incidencia sobre el suelo del orden de 50° , la posible contribución de los lóbulos secundarios que podrían apuntar hacia el fondo del cielo constituye un problema. Ésta contaminación de los lóbulos secundarios por la temperatura del fondo del cielo es mucho menos importante cuando se observa hacia el nádir.

En resumen, las características previstas para el sistema son:

- 30 pixels adyacentes con anchura a media altura de 3.3° (3 dB), es decir, de 50 km de diámetro hacia el nádir².
- Una eficacia de haz de 95% al menos.
- Un barrido de 2300 km sobre la superficie para cada pasada del satélite. Para un sondeo en temperatura con el objetivo de introducir los datos en los modelos de predicción meteorológica, el elemento decisivo para decidir entre un barrido cónico o perpendicular es la cobertura geográfica.
- Polarización lineal, H, V o una combinación de las dos conocida con una precisión del 5% o mejor.

Los inconvenientes del barrido cónico son la dificultad, incluso la imposibilidad, de conseguir una cobertura total proyectada de 2300 km sobre la superficie, y la posibilidad de detectar la radiación del fondo cósmico en los lóbulos secundarios. Sin embargo, éste tipo de barrido tiene ventajas importantes, como son una cierta simplificación en la asimilación de los efectos de superficie a causa del tratamiento geométrico idéntico para todos los pixels.

Definición de los canales de sondeo

Los canales 3 a 14 de AMSU-A fueron seleccionados cuidadosamente para permitir un sondeo en temperatura de la atmósfera, desde la parte baja de la troposfera hasta unos 40 km aproximadamente (véase la figura 4.4). El instrumento *push-broom*

² 3.3° de apertura a 3 dB para un satélite a 870 km corresponde a una cobertura en la superficie terrestre (a 3 dB) de 50 km de diámetro. Si finalmente el satélite se emplaza a una altura diferente, habrá que hacer un esfuerzo para obtener el mismo diámetro de cobertura.

del CNES a 60GHz pretende reemplazar los canales 9 a 14 de AMSU-A por otros que presenten una capacidad de sondeo al menos equivalente a la de éste instrumento y, además, comprendiendo canales de sondeo de alta atmósfera como los números 16 a 21 previstos para una generación futura de AMSU-A.

Hemos elegido deliberadamente emplazar los canales de sondeo del *push-broom* en la mitad inferior de la banda de absorción del oxígeno, esto es, por debajo de 60 GHz. Hay dos razones principales para ello:

1) Los riesgos de contaminación por emisores artificiales parecen más preocupantes en la mitad de la banda (por encima de 60 GHz). En efecto, la banda 59-64 GHz está por el momento completamente atribuida a los servicios activos y, según parece, se podrían establecer comunicaciones entre satélites a esas frecuencias. Respecto a los riesgos de contaminación por emisores activos sobre tierra podemos decir que serían aún mayores y de peores consecuencias.

2) Conforme subimos en frecuencia, la sensibilidad al vapor de agua (emisión de continuo y también efectos del agua líquida y del hielo en las nubes) es más grande. En el marco de un sondeo en temperatura no tenemos ninguna ventaja al aumentar la sensibilidad a esos parámetros.

La elección de los canales para el instrumento *push-broom* se ha guiado por criterios de tipo técnico como limitar la anchura total de la banda de recepción a la entrada de los receptores. En efecto, antes de realizar cualquier mezcla de frecuencias, y justo entre la antena y los receptores, la señal debe ser amplificada por un preamplificador de bajo ruido. Así, cuanto menor sea la banda total de frecuencias, mejores resultados dará éste amplificador.

Para el sondeo de la troposfera y de la baja estratosfera

Para los canales de sondeo de la baja atmósfera (canales 9 a 14 de AMSU-A), no nos parece útil cambiar las frecuencias de sondeo, teniendo en cuenta que dan un buen reparto de las funciones de peso en altura. Las anchuras nominales de los canales pueden disminuirse si ello es necesario por razones técnicas: la incidencia sobre las funciones de peso del instrumento será muy pequeña. Si se presentan imposibilidades de tipo técnico con relación a ésta elección de las frecuencias de sondeo, se podrían proponer otras frecuencias de sondeo ya que la banda de absorción del oxígeno alrededor de 60GHz es rica en líneas, lo que permite pensar en combinaciones diferentes de canales.

Para el sondeo de la alta atmósfera

A frecuencias próximas de los centros de líneas de O₂, el cálculo exacto de la absorción debe tener en cuenta el efecto Zeeman. Los trabajos relacionados con éste fenómeno en el marco del proyecto *push-broom* fueron objeto de un informe técnico para el CNES en 1994. El observar a esas frecuencias es sin duda indispensable para el sondeo de la alta estratosfera.

La definición de los canales de sondeo de alta atmósfera para AMSU-A' no está completa y tal como nosotros la habíamos interpretado en un principio (considerando una recepción en polarización lineal, horizontal o vertical), no era coherente. Las funciones de peso obtenidas no se repartían de forma regular en la vertical y algunas de ellas eran redundantes (figure 4.4). Nosotros hemos retomado aquí los cálculos suponiendo que la recepción se realiza en polarización circular. Así, con las mismas frecuencias de sondeo, las funciones de peso se reparten adecuadamente en altura. A título comparativo, hemos recalculado igualmente las funciones de peso previstas para el instrumento SSM/IS, que deberá ser embarcado en un futuro a bordo de los satélites DMSP (figura 4.5). Éste instrumento trabaja en polarización lineal. Para el proyecto *push-broom* hemos tratado de obtener funciones de peso similares a las de estos dos instrumentos, para el sondeo de la alta atmósfera.

Con el objetivo de limitar la banda total de entrada al preamplificador, hemos intentado situar las frecuencias de sondeo "alta atmósfera" también por debajo de 60 GHz, próximas a los canales de sondeo de la baja atmósfera. Hemos retenido tres posibles soluciones (doble-banda):

1) En polarización lineal (H o V), los canales centrados alrededor de las líneas 7- (59.164207 GHz) y 9- (58.323877 GHz) y un canal centrado sobre las líneas 3+ (58.446590 GHz) y 11- (57.612484 GHz) en el centro de ellas.

2) De nuevo en polarización lineal H o V, con canales centrados alrededor de las resonancias 7- (59.164207 GHz) y 9- (58.323877 GHz) y canal centrado justo en el centro de las resonancias 13- (56.968206 GHz) y 15- (56.363389 GHz). La idea primero era la de obtener una función de peso centrada hacia unos 60 km, con un canal situado a 1 MHz de los centros de las líneas 7- y 9-. Esto no fue posible ya que la función de peso obtenida está degradada: presenta dos picos. Por tanto, se ha tenido que tomar un canal centrado sobre otras dos líneas de opacidad total más débil. SSM/IS tiene el mismo problema con el canal 19.

En la figura 4.8 se muestran las funciones peso para estas dos primeras posibili-

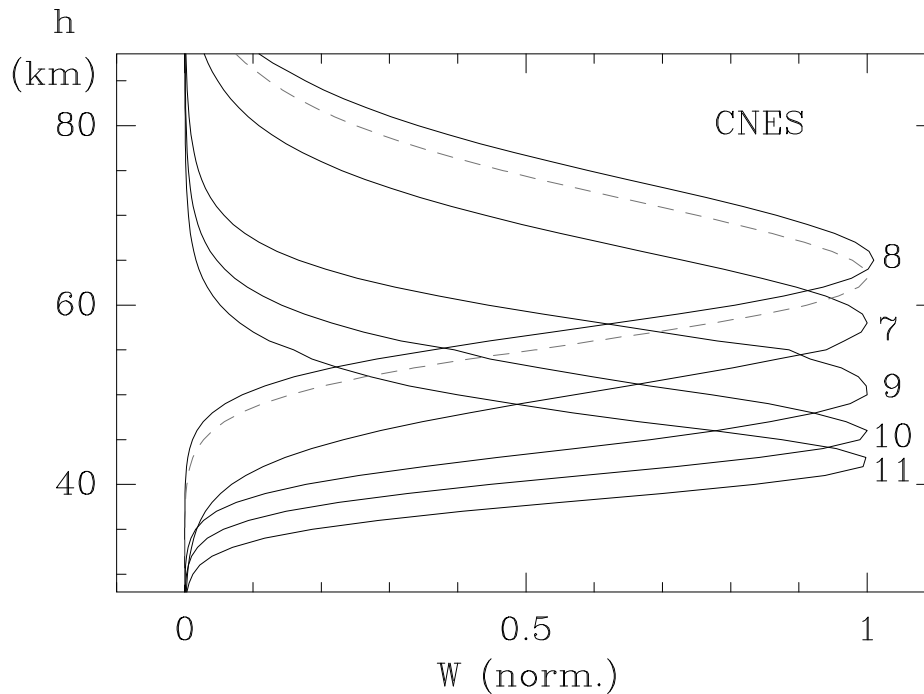


FIG. 4.8 - Funciones de peso (normalizadas) calculadas para los canales de alta atmósfera propuestos al CNES para su proyecto “*Push-Broom*” (canales 7 a 11 en la tabla 4.5, correspondientes a la segunda de las tres alternativas analizadas aquí). Se ha considerado, como en otros cálculos similares en éste capítulo, una polarización lineal horizontal y observación hacia el n adir sobre el punto [Lat.=40 N,Long=0 ]. En l nea discontinua vemos la funci n peso del canal 7 correspondiente a la primera alternativa descrita en el texto.

dades.

3) En polarizaci n circular, todos los canales situados alrededor de las l neas 7- (59.164207 GHz) y 9- (58.323877 GHz). Las funciones peso obtenidas en  ste caso son las mismas que las que se mostraron en la figura 4.4 abajo a la derecha.

Respecto a la soluci n 2, la soluci n 1 precisa de una anchura de banda menor a la entrada del preamplificador. Sin embargo, el reparto de las funciones de peso no es tan bueno y no nos ha sido posible mejorarlo utilizando esas resonancias (figura 4.8).

La soluci n 3 tiene el m rito de ser la m s compacta en frecuencias. Combinada con los canales de baja atm sfera, todo el sistema entra en 2 GHz de banda. Sin embargo, la recepci n en polarizaci n circular puede presentar inconvenientes tanto

Canal	Freq. (GHz)	1 ^{ere} FI (GHz)	2 ^{eme} FI (GHz)	largeur de bande (MHz)
1	57.290344	-	-	±165
2	57.290344	0.217	-	±39
3	57.290344	0.322	0.048	±18
4	57.290344	0.322	0.022	±8
5	57.290344	0.322	0.010	±4
6	57.290344	0.322	0.0045	±1.5
7	56.665797	0.30241	-	±0.4
8	58.744042	0.42020	-	±0.4
9	58.744042	0.41820	-	±0.4
10	58.744042	0.41720	-	±0.4
11	58.744042	0.41570	-	±0.4

TAB. 4.5 - Características de los canales de sondeo propuestos para el instrumento “Push-Broom” del CNES.

desde el punto de vista de los receptores del de la antena. Por ello ha sido descartada. Haría falta en ese caso una polarización circular a derechas para la banda superior y circular a izquierdas para la banda inferior, a causa de la no simetría de la opacidad respecto al centro de la línea en polarización circular. (véase la figura 4.6).

Nosotros aconsejamos la solución número 2, que da unas funciones peso totalmente satisfactorias y parece viable técnicamente. Respecto a los canales AMSU-A 16 a 21, proponemos un canal de menos para el sondeo de la alta atmósfera, en la medida en que el canal correspondiente al sondeo a la altitud más baja posible para (número 16) es redundante con el canal correspondiente al sondeo a la altura más alta posible con el actual AMSU-A.

En resumen, para el instrumento *push-broom* las características de los canales de sondeo propuestos en éste estudio se resumen en el cuadro 4.5³:

3. Como ya se precisó, se pueden contemplar otras combinaciones de canales (diferentes frecuencias centrales, modificaciones de las anchuras de banda) si surgen problemas técnicos en la concepción del instrumento.

4.2 Sondeo del vapor de agua troposférico desde satélite

La técnica de observación mediante satélites meteorológicos, que es el tema de éste capítulo, se aplica también en el dominio de las microondas a la medida de los perfiles troposféricos de humedad mediante, principalmente, canales de observación alrededor de la resonancia de H_2O a 183.31 GHz. A bordo de los mismos satélites de la DSMP donde está embarcado el sistema SSM/T1 se encuentra actualmente el sistema SSM/T2. Posee 5 canales y tres de ellos se sitúan en las alas de la resonancia del vapor de agua a 183.31 GHz, a menos de ± 8 GHz del centro. Estos tres canales son de doble banda, y poseen una frecuencia de oscilador local situada justo en la frecuencia de resonancia (183.31 GHz), con las frecuencias intermedias y anchuras de banda siguientes: IF=3 GHz, $\Delta\nu=\pm 250$ MHz (canal 1); IF=1 GHz, $\Delta\nu=\pm 125$ MHz (canal 2) et IF=7 GHz, $\Delta\nu=\pm 375$ MHz (canal 3). El barrido se realiza de forma perpendicular al movimiento del satélite con 28 pasos en el intervalo $\pm 40.5^\circ$. A la frecuencia de trabajo, la resolución horizontal para observación hacia el nádir es de 48 km.

Los satélites futuros DMSP y TIROS realizarán éste tipo de sondeos con canales que tendrán prácticamente las mismas características (se trata de una parte de SSM/IS y de AMSU-B respectivamente). Siguiendo con la idea de validar la transferencia radiativa en las frecuencias de interés, hemos comparado las medidas de SSM/T2 con simulaciones alimentadas por perfiles atmosféricos procedentes de radiosondeos en coincidencia espacial y temporal con esas medidas del satélite, de la misma manera que habíamos hecho para SSM/T1, La base de datos fue proporcionada por NOAA/NESDIS. En estos datos, la información sobre la razón de mezcla del vapor de agua sólo se da hasta el nivel 300 mb. Según los cálculos de las funciones peso (definidas a partir de la ecuación general 4.1, y que informan de las contribuciones relativas de las diferentes capas atmosféricas a la señal detectada por cada canal), ésta limitación no es un problema a la hora de realizar comparaciones entre los canales 1 y 3, pero una parte de la radiación detectada por el canal 2 (183.31 ± 1 GHz) debe provenir sin duda de más allá del nivel 300 mb según se ve en la misma figura. Esta contribución es más o menos intensa según sea la cantidad de agua presente y debe tener efectos relativamente importantes a la hora de la comparación. Pour paliar un poco éste efecto hemos hecho una extrapolación bastante simple que consistió en añadir un perfil con razón de mezcla del vapor de agua en decrecimiento

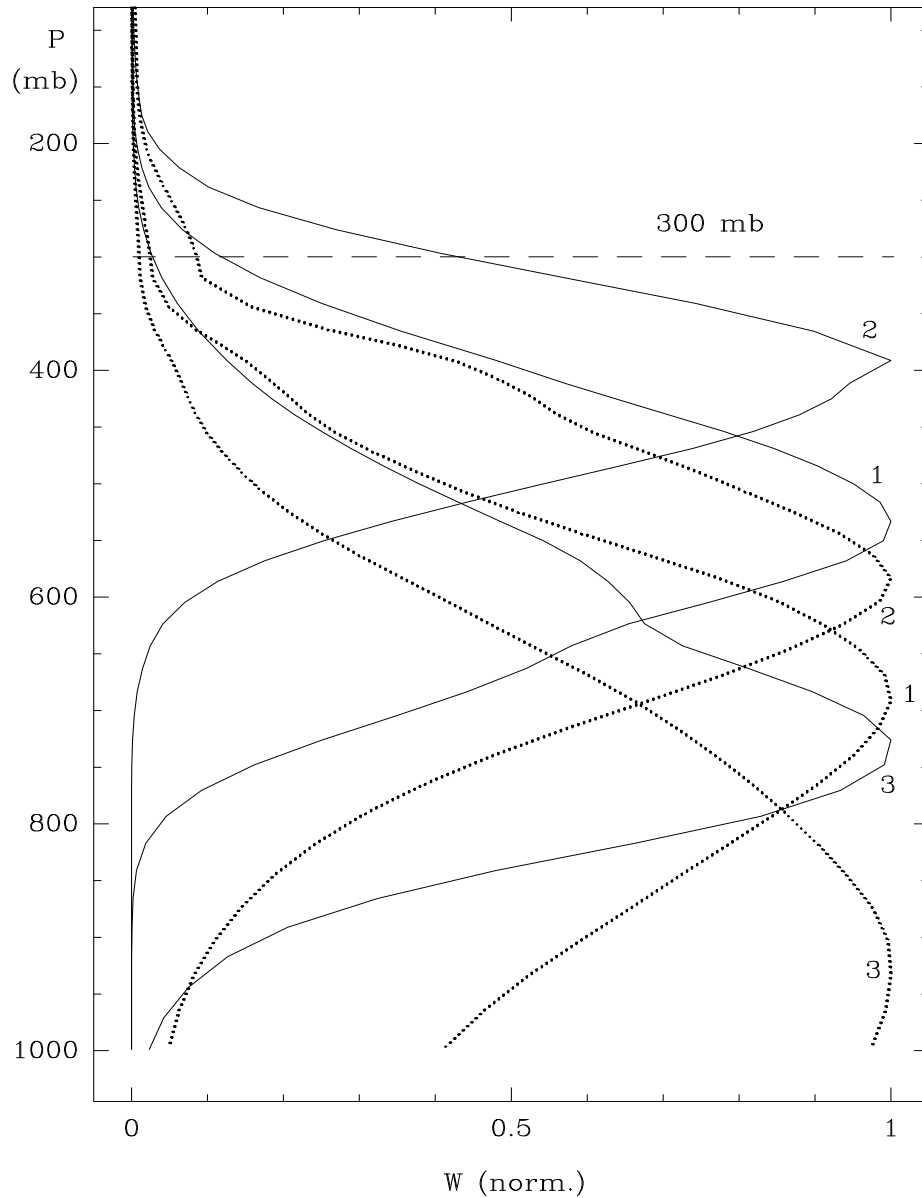


FIG. 4.9 - Funciones de peso (en temperatura) para los tres canales de SSM/T2 alrededor de 183.31 GHz correspondientes a una atmósfera estándar de tipo tropical (trazo continuo) y subpolar invierno (trazo discontinuo).

exponencial por encima de 300 mb ($A_0 e^{-z/z_0}$) para el cual la escala de alturas y la cantidad integrada por encima de 300 mb se determinan con los dos últimos niveles en los que existe información sobre el vapor de agua. Por otra parte, la contribución de la superficie en los canales 1 y 3 aumenta cuando las atmósfera tiene menos vapor de agua. En nuestro análisis hay que considerar una emisividad de superficie de 0.67 para los océanos y de 0.95 para los continentes (según la "etiqueta" correspondiente disponible en el juego de datos). El análisis ha sido limitado a condiciones de cielo claro.

Los datos utilizados en la comparación que presentamos aquí corresponden al año 1995 y a una cobertura geográfica global como la de los datos SSM/T1 presentados anteriormente. Hasta ahora, hemos a comparado las medidas SSM/T2 a las simulaciones utilizando el modelo de absorción MPM-93 y los perfiles atmosféricos de radiosondeos en coincidencia espacial y temporal tal como ya se hizo con los datos a 60 GHz.

Las conclusiones principales obtenidas de estos cálculos son las siguientes:

a) En general la dispersión de los resultados es mayor que a 60 GHz. En principio podemos pensar que se debe a la variación espacial y temporal de la distribución vertical del vapor de agua, pero la variación de los campos de temperatura (que es el principal factor que juega sobre los resultados a 60 GHz) puede también afectar aquí. Pero hay que buscar otras razones. Parece más razonable pensar que gran parte de esa dispersión se deba a la incertidumbre que tienen los radiosondeos en el vapor de agua (más fuerte que en la temperatura). Además, las frecuencias cercanas a 183 GHz son más sensibles a la contaminación por señal procedente de nubes finas que no hubiesen sido señaladas en el juego de datos, que lo son las frecuencias cercanas a 60 GHz. Debido a esto, los resultados en general no presentan un coeficiente de correlación tan próximo a 1 como las comparaciones a 60 GHz (lo que permitía, en aquel caso, estimar un valor bastante preciso de la diferencia sistemática entre las medidas y las simulaciones).

b) En el canal 3 (el más alejado de la resonancia) el coeficiente de correlación entre medidas y simulaciones es muy bueno (0.95), mientras que para los otros dos éste es de 0.79 (canal 2) y 0.81 (canal 1). Sobre el canal 3 resulta que al eliminar los puntos correspondientes a la franja de latitudes 30° - 60° , la correlación es bastante peor. Esto no es difícil de entender: las atmósferas en la franja 60° - 90° son en general bastante secas y la contribución de la superficie, mal conocida a ± 7 GHz de la resonancia, es mucho más importante que en el caso de latitudes tropicales o intermedias. También queda la posibilidad de algunos defectos en el modelo de absorción.

c) Para el canal 2 constatamos la dispersión más fuerte. Según los cálculos teóricos y las características técnicas, éste canal debe medir unas temperaturas de brillo situadas en un intervalo más pequeño que los otros dos canales (véase la figura 4.10, abajo). Es previsible, por tanto, que sobre ese dominio más estrecho de temperaturas los errores aleatorios de las medidas (SSM/T2 y radiosondeos) introducen una dispersión mayor, sobre todo teniendo en cuenta que los errores aleatorios sobre

las medidas de los canales, a igualdad de tiempo de integración, son mayores en el canal 2 que en los otros dos a causa de su menor anchura de banda (recordemos que ese ruido tiene una dependencia del tipo $B^{-\frac{1}{2}}$, donde B es la anchura de banda). Además, éste canal es el único donde interviene la falta de información sobre la distribución del vapor de agua por encima de 300 mb. La dispersión para el canal 1 es peor que la del canal 3 y un poco mejor que la del canal 2, lo que concuerda con la interpretación que acabamos de hacer.

Para completar éste estudio nos proponemos participar en el análisis de medidas de un radiómetro de dos canales (casi equivalentes a SSM/T2 1 y 2) instalado sobre el radiotelescopio JCMT en Mauna Kea (Hawaii). Los primeros contactos se han establecido en Octubre de 1996.

◦

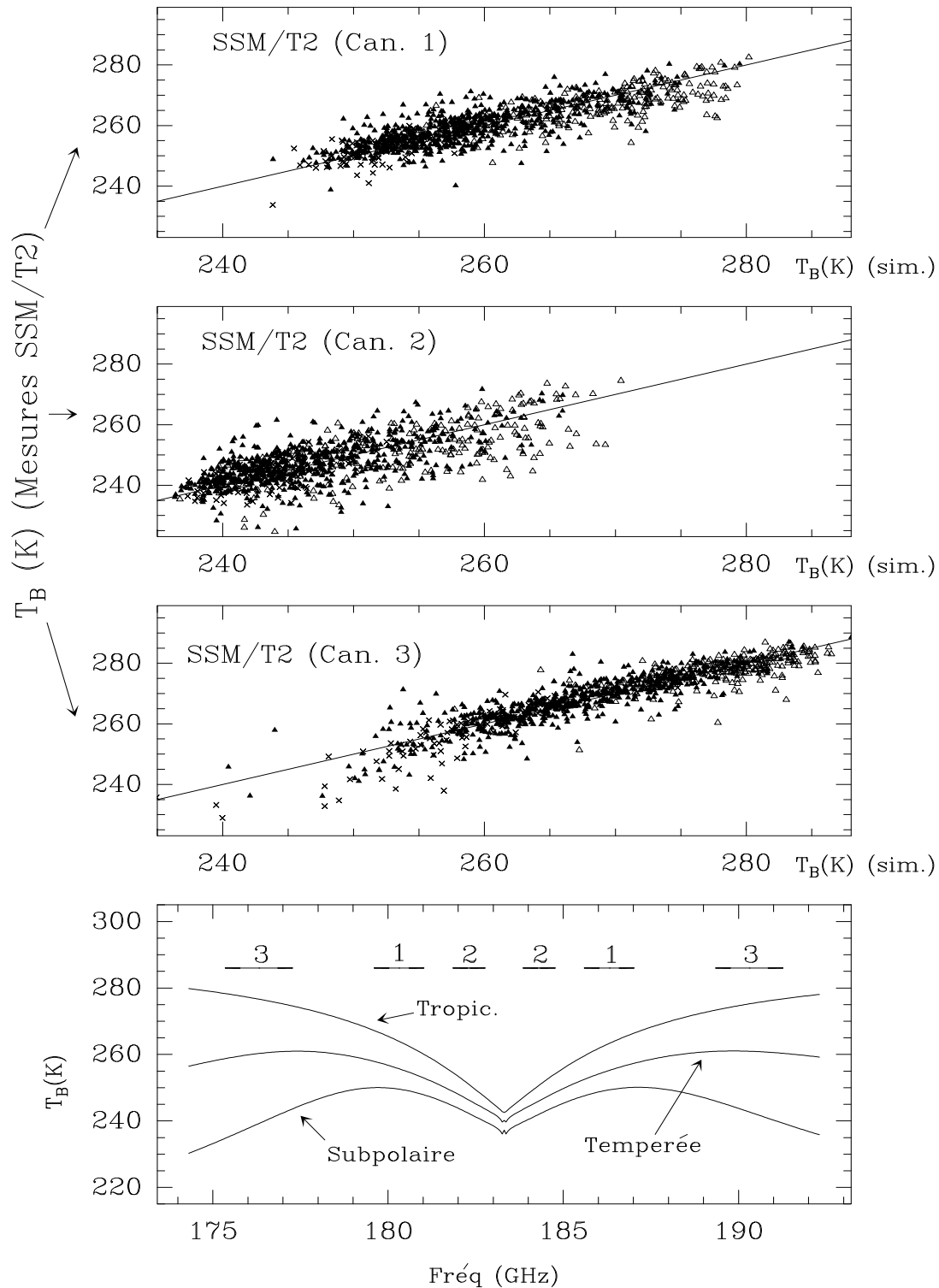


FIG. 4.10 - Comparación entre las medidas de los canales 1 a 3 de SSM/T2 y la transferencia radiativa a esas frecuencias utilizando los perfiles atmosféricos obtenidos de radiosondeos en coincidencia espacial y temporal. El modelo de absorción utilizado es MPM-93.

Capítulo 5

Técnicas de observación para evitar la absorción troposférica. Sondeo al limbo

5.1 Introducción

Cuando se pretende estudiar la distribución vertical de diferentes gases minoritarios mediante radiómetros situados en la superficie terrestre tenemos dos problemas principales: en la mayoría de los casos, la emisión es extremadamente débil debido a esta geometría de observación y la pequeña razón de mezcla de los gases minoritarios, además, la señal que llega al detector desde la estratosfera o la mesosfera se ve afectada por una importante absorción troposférica debida a O_2 y H_2O . Para evitar estos problemas y mejorar considerablemente la calidad de las observaciones es necesario llevar los sistemas de observación fuera de la troposfera. Ciertas experiencias de moderado costo utilizan un globo estratosférico que transporta los sistemas de observación fuera de la troposfera. Este principio se utiliza igualmente con objetivos astrofísicos, por ejemplo la observación de líneas de H_2O y O_2 en nubes moleculares Galácticas. Un satélite es un sistema más costoso pero tiene numerosas ventajas, entre ellas la posibilidad de trabajar en una geometría de observación bastante más interesante: el sondeo al limbo.

Las observaciones al limbo atmosférico permiten eliminar uno de los problemas fundamentales de las observaciones por satélite hacia la superficie terrestre. En efecto, la radiación de fondo que se tiene en una observación al limbo es el fondo

cósmico, que es mucho menos problemático a la hora de incluirlo en los cálculos que la contribución de la superficie terrestre, siempre muy difícil de estimar. Además, si dividimos la atmósfera en capas esféricas del mismo espesor, se ve la preponderancia de la capa que contiene el punto de tangencia. Esto se va a traducir en la posibilidad de obtener una gran resolución vertical justo alrededor del punto de tangencia, la cual se puede estimar a partir del cálculo de las funciones peso (o de sondeo) para éste tipo de observaciones.

Sondeos mediante instrumentos transportados a la estratosfera

El vapor de agua atmosférico se encuentra principalmente en la troposfera. Su abundancia es sumamente pequeña más allá de 12-15 km como se vió en el apartado 3.2. Sin embargo, a causa de su momento dipolar eléctrico relativamente grande, la intensidad de las líneas rotacionales es tan importante en los dominios milimétrico y submilimétrico que las observaciones astrofísicas de esas líneas son prácticamente imposibles desde la superficie terrestre. Lo mismo ocurre con las líneas de oxígeno molecular. Por sta razón esta última molécula aún no ha sido detectada en las nubes moleculares Galácticas. La línea del vapor de agua a 183.31 GHz se ha detectado recientemente por *Cernicharo* (voir section 3.2) en las envolturas de estrellas evolucionadas (líneas máser) y regiones de formación estelar. Otras líneas máser de H₂O se han observado en el submilimétrico, por ejemplo a 437, 439 y 471 GHz (*Melnick et al.*, 1993 [56]), y a frecuencias mayores como 658 GHz (*Menten et Young*, 1995 [57]).

Últimamente se están desarrollando toda una serie de medios de observación, y algunos ya son operativos. Estos sistemas deben transportar instruments de sondeo hasta 35-40 km de altura mediante globos estratosféricos. Por ejemplo, PRONAS y PIROG son dos experiencias submilimétricas con antenas de 2 y 0.6 m de diámetro respectivamente. Estos sistemas están diseñados para realizar observaciones durante vuelos de corta duración (algunas horas como máximo).

° La observación de la línea astrofísica es posible cuando está colocada suficientemente lejos en las alas de la línea atmosférica (desplazamiento de la frecuencia central en la fuente a causa de su movimiento respecto a la Tierra) para que la opacidad sea razonablemente pequeña. Para el dominio de velocidades radiales de las fuentes Galácticas (típicamente ± 60 km/s de diferencia máxima) esto es posible en un gran número de casos para una altitud de observación entre 35 y 40 km ya que la presión, que gobierna el ensanchamiento colisional de la línea atmosférica es sólo del orden de 4 mb (ver figura 5.3). Por ejemplo, en las condiciones correspondientes

a los cálculos que presentamos en esa figura, la atmósfera presenta, a la frecuencia central de la línea atmosférica del vapor de agua a 380.197 GHz, una transmisión de 19 %. Para una fuente a velocidad +60 km/s, la frecuencia central de la misma línea está 76 MHz del centro en el ala azul donde la transmisión atmosférica es superior al 99 %. En las mismas hipótesis pero para la línea fundamental del vapor de agua a 556.936 GHz resulta que la transmisión atmosférica a la frecuencia central es cero, siendo de 74 % a 556.825 GHz, que correspondería a una fuente con velocidad radial de +60 km/s.

5.1.1 Adaptación del algoritmo de inversión al análisis de observaciones astrofísicas.

Con el objetivo de calcular la absorción atmosférica que afecta a las observaciones astrofísicas de líneas del oxígeno o del vapor de agua en las líneas de línea atmosférica, hemos introducido en el programa de análisis de espectros CLASS (IRAM Grenoble) una sección que permite sustraer a la observación una línea de base "atmosférica". La opacidad atmosférica en cada canal es estimada y después el residuo que queda es corregido del efecto de dicha opacidad. Para estos cálculos se usa una atmósfera estándar que depende de la latitud y la estación, y se ajusta la presión y la temperatura (si tenemos una línea atmosférica de oxígeno) o la razón de mezcla del vapor de agua (si se trata de una línea de H₂O) en una capa de espesor entre 3 a 5 km situada justo encima del punto de observación (nominalmente 37 km para PRONAOS), siguiendo el mismo método el algoritmo general de inversión descrito en el apartado 2.4. Estas rutinas se han desarrollado para su utilización en el análisis de los datos de la experiencia SMH (líneas submilimétricas de O₂ y H₂O) sobre PRONAOS y pueden usarse para analizar medidas de otros instrumentos. La descripción de la utilización de estas rutinas en el contexto del programa CLASS se encuentra en el apéndice C.

La figura 5.2 presenta un espectro sintético atmosférico que corresponde a la línea de ¹⁶O₂ centrada a 424.76321 GHz, analizada directamente con CLASS.

La experiencia PIROG ya ha producido algunos datos de la línea rotacional fundamental de *ortho*-H₂O (557 GHz) en la atmósfera. Estas observaciones se han realizado en el último vuelo experimental (1996) y no están calibradas. Sólo se conocen de la observación los datos siguientes:

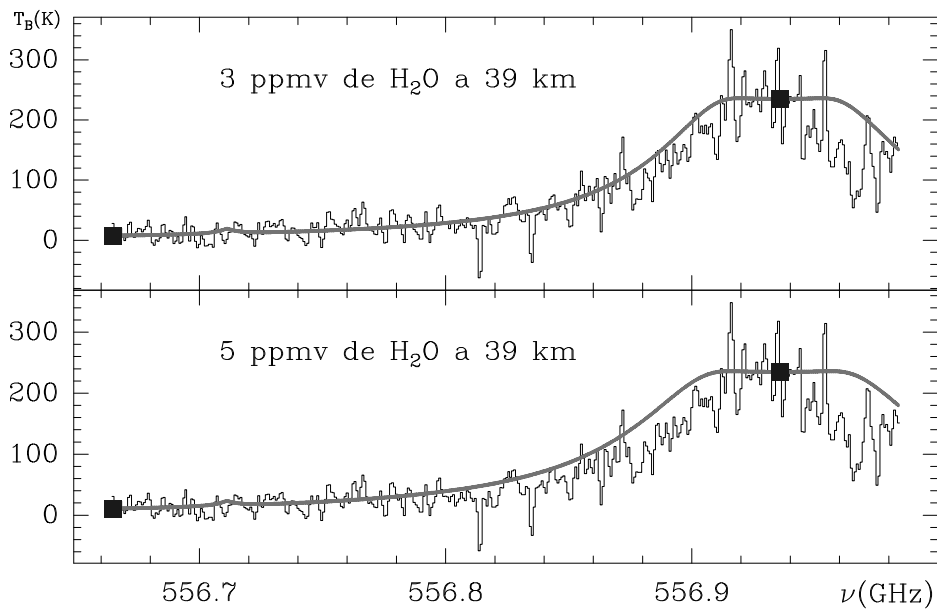


FIG. 5.1 - Observación no calibrada de la línea atmosférica de orto- H_2O a 556.936 GHz (transición rotacional fundamental) obtenida con el telescopio submilimétrico estratosférico PIROG. También mostramos una comparación con las simulaciones de ATM. Para ésta comparación hemos redefinido la escala vertical del espectro para hacer coincidir la simulación y la observación en dos puntos, señalados con cuadros negros.

Elevación: 38.26° (masa de aire=1.6192)

Espectrómetro: 400×0.8 MHz

Altitud del globo: 39 km

Frecuencia central del canal 400: 556984.0 MHz (línea fundamental de H_2O a 556936 MHz = canal 339).

Coefficiente de acoplo al cielo= 0.8?

$$\left(1 + \frac{G_T}{G_S}\right) \simeq 1$$

Hemos comparado los datos brutos con simulaciones de ATM con el objetivo de buscar un acuerdo cualitativo en lo que respecta a la forma de de la línea. Para estas simulaciones se ha adoptado un coeficiente de absorción según la formulación de *Liebe et al* (1993) [53] y la atmósfera U.S. Stnd Atm. 76, que da 3.3 mb, 247.5 K y 5 ppmv de H_2O a 39 km. Para la comparación hemos redefinido la escala vertical del espectro para hacer coincidir éste con la simulación en dos puntos: el primer canal, cuya frecuencia central es 556664.8 MHz, y el canal 339 (centrado a 556936.0 MHz). Se ha realizado también una segunda simulación con los mismos parámetros

de entrada pero disminuyendo en un 40% la cantidad de vapor de agua, para obtener 3 ppmv a 39 km. Los resultados de estas dos comparaciones se muestran en la figura 5.1. Dentro de la gran incertidumbre de estos datos, se ve una compatibilidad con las razones de mezcla del vapor de agua en esas mismas alturas que fueron encontradas a partir del análisis de los datos presentados en el apartado 3.2.

5.2 Sondeos al limbo atmosférico

Las ventajas principales de éste tipo de observaciones respecto a otras ya vistas en éste trabajo son la gran resolución vertical y la importante ganancia en sensibilidad. Estos dos efectos son consecuencia de la geometría de observación. En la figura 5.4 podemos ver como las líneas de los componentes minoritarios aparecen con un buen contraste gracias a dicha técnica. La resolución vertical que podemos alcanzar es del orden de varios kilómetros. Podemos encontrar discusiones detalladas sobre esto en la referencia de *Waters* (1993) [95].

Cuando hay que analizar medidas espectroscópicas para deducir la distribución vertical de un gas nos damos cuenta que la emisión al limbo depende mucho más de la razón de mezcla del gas que de la temperatura en la zona inmediatamente encima del punto de tangencia. Por ello no es necesario medir simultáneamente la temperatura de una forma precisa. Además, los datos espectroscópicos contienen en ellos mismos la información sobre la presión (calculada a partir de la anchura de línea) si el punto de tangencia está situado por debajo de ~ 60 km.

Las medidas al limbo no sufren los efectos de las nubes o de los aerosoles estratosféricos cuando el punto de tangencia sobrepasa los ~ 25 km.

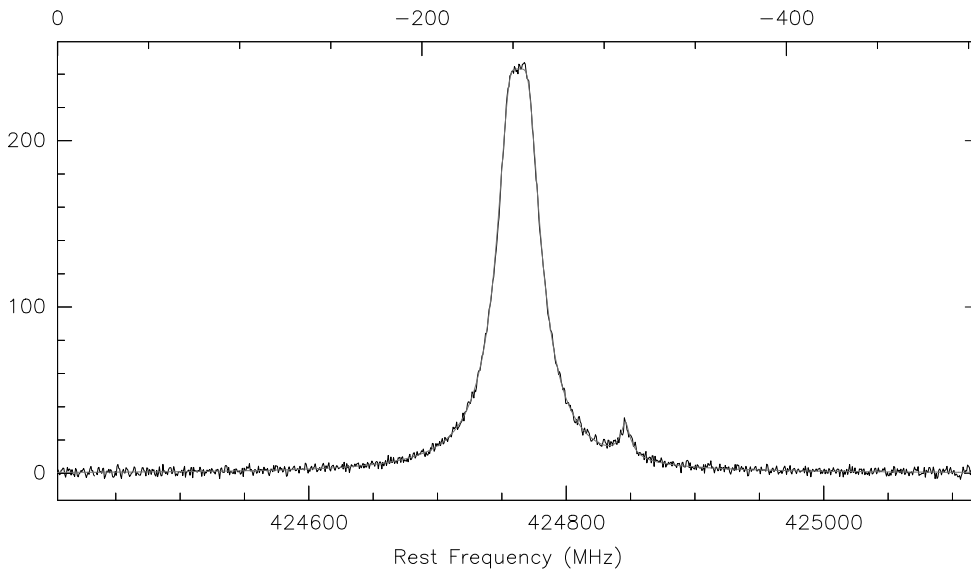
Para éste tipo de geometría, la solución de la ecuación de transferencia radiativa atmosférica en el dominio milimétrico es:

$$T_B(\nu, \gamma(h_T)) = T_{B,FCR}(\nu)e^{-\tau_\nu[\gamma(h_T)]} + \int_{\gamma(h_T)} T(s)e^{-\tau_\nu(s,\infty)}\kappa_\nu(s)ds \quad (5.1)$$

donde $T_{B,FCR}(\nu)$ representa el fondo cósmico de radiación, s es una coordenada curvilínea a lo largo del camino seguido por la radiación y h_T es la altura del punto de tangencia en la observación. On considère que le satellite se situe à l'infini. Esta ecuación no considera ningún parámetro instrumental como el diagrama de antena.

```

2; 3 GreG Data                                O: 27-AUG-2024 R: 17-OCT-199
I: 0.000000E+00 b: 0.000000E+00              Offs: 0.0      0.0
Unknown Tau: 0.0000E+00 Tsys: 1.000         Time: 0.0000E+00 El: 90.00
N: 1024 IO: 1.000                          V0: 0.0000E+00 Dv: -.4945  Unkn
FO: 424404.800 Df: .7000                   Fi: 440000.000
                                           Velocity (km/s)
    
```



```

2; 3 GreG Data                                O: 27-AUG-2024 R: 17-OCT-199
I: 0.000000E+00 b: 0.000000E+00              Offs: 0.0      0.0
Unknown Tau: 0.0000E+00 Tsys: 1.000         Time: 0.0000E+00 El: 90.00
N: 1024 IO: 1.000                          V0: 0.0000E+00 Dv: -.4945  Unkn
FO: 424404.800 Df: .7000                   Fi: 440000.000
                                           Velocity (km/s)
    
```

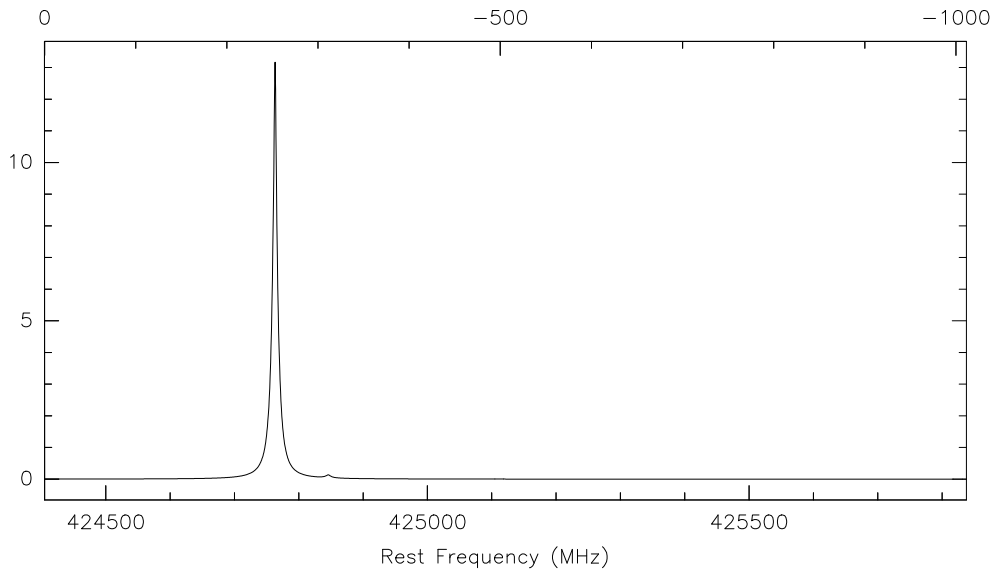


FIG. 5.2 - Ejemplo de uso de las nuevas rutinas atmosféricas de CLASS para el tratamiento de observaciones de PRONAOS. Arriba vemos un espectro sintético ajustado; abajo la opacidad atmosférica que se deriva de ese ajuste, la cual se usará para corregir las señales externas en el caso de una detección de una línea astrofísica.

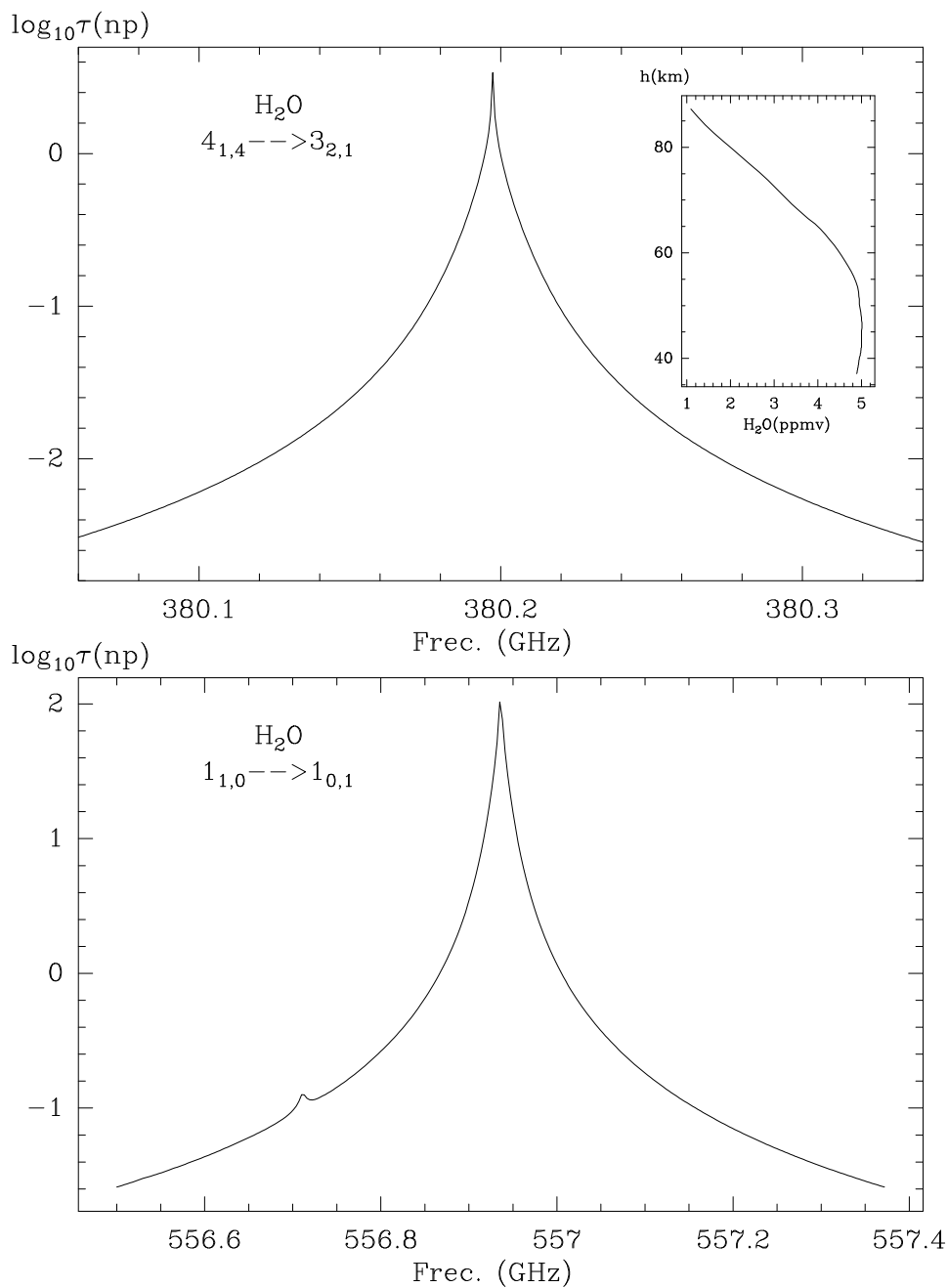


FIG. 5.3 - Simulación de la opacidad atmosférica en los alrededores de dos líneas submilimétricas de H_2O para una posición de observación a 37 km de altura y una masa de aire de 1.3 (éstas serían unas condiciones de observación típicas de instrumentos transportados por globo hacia la estratosfera). Se utilizó la atmósfera estándar *U.S. Std. Atm. 1976* cuyo perfil de H_2O se muestra arriba a la derecha.

5.2.1 Consideraciones técnicas

Para una frecuencia próxima a una resonancia de un gas atmosférico, el coeficiente de absorción $\kappa_\nu(z)$ está dominado normalmente por dicho gas a alturas superiores al punto de tangencia. La temperatura de brillo detectada servirá para determinar el perfil de abundancia de ese gas. Para los sondeos al limbo es entonces importante utilizar antenas lo más directivas posible para reducir contaminaciones a la señal procedentes de la superficie terrestre o de la troposfera. Esto no resulta fácil a veces ya que se trata de telescopios sobre satélites. Para conseguir un campo de 3 km de diámetro alrededor del punto de tangencia, el tamaño de la antena debe ser:

$$D_{3km}(m) = 4.0 \cdot 10^{-4} \lambda_{mm} \sqrt{(2R_\oplus + h_0)(h_0 - h_T)} \quad (5.2)$$

donde λ_{mm} es la longitud de onda en milímetros, y R_\oplus , h_0 et h_t son, respectivamente, el radio de la Tierra (supuesta esférica), la altura del satélite respecto a la superficie terrestre y la altitud del punto de tangencia, todas en km. Vemos que el diámetro de antena necesario para un campo constante de 3 km varía ligeramente con la altura del punto de tangencia y que la posición del satélite es la que juega el papel más importante para definir el tamaño de la antena.

Las frecuencias de las líneas a observar cambian por efecto Doppler debido al movimiento del satélite, a la rotación terrestre y al viento. El efecto del viento mesosférico es el menos importante y los otros efectos se pueden corregir sin dificultad una vez que conozcamos la órbita del satélite y el modo de observación.

Otro punto importante es la necesidad de obtener coberturas espaciales lo más amplias posible sobre nuestro planeta. Para esto podemos pensar en un satélite de órbita baja (hasta 1000 km de altura) que realiza sondeos en el plano vertical solamente. Trabajar sólo en el plano vertical es suficiente ya que el periodo de rotación de un satélite de éste tipo alrededor de la Tierra es muy inferior al de rotación de nuestro planeta, lo que permite hacer varias pasadas por día. Es interesante señalar que el desplazamiento angular de la antena se puede ajustar a la velocidad orbital de forma que podamos hacer que el punto de tangencia se quede siempre sobre la misma vertical geográfica, lo que permite obtener unos datos más fáciles de interpretar.

Finalmente, vamos a hablar de la sensibilidad. Sabemos que al aumentar el tamaño de la antena el lóbulo principal disminuye (en relación inverse de la “apertura efectiva”, A_e , de la antena con la frecuencia). Para una señal que llena completamente el diagrama de antena, como es la emisión natural atmosférica, la potencia

recibida es esencialmente independiente de la apertura efectiva y vale $\sim \frac{1}{2}\lambda^2 B_\nu(T)$, donde $B_\nu(T)$ es la función de Planck a la temperatura T y a la frecuencia ν). Para temperaturas atmosféricas típicas y hasta una frecuencia de 3 THz, esta cantidad es aproximadamente del orden de $\approx 3 \cdot 10^{-15}$ W/MHz y luego decrece fuertemente por encima de 10 THz). Para tener un orden de magnitud del umbral de detección debemos comparar éste valor de la potencia con el nivel de ruido típico de un receptor heterodino ($kT_{sys}/\sqrt{\Delta\nu\Delta t}$, donde k es la constante de Boltzmann y T_{sys} la temperatura ruido del sistema). Tomando $\Delta\nu \sim 25$ MHz, Δt de varios segundos, y T_{sys} entre 1000 y 3000 K, el nivel de ruido es del orden de 10^{-16} W. Éste ruido es mucho menor que el valor de $\frac{1}{2}\lambda^2 B_\nu(T)\Delta\nu$ para las mismas hipótesis y, por tanto, las líneas espectrales atmosféricas por debajo de 3 THz con una opacidad superior a 10^{-3} se pueden detectar mediante radiómetros heterodinios en tiempos de integración inferiores a un minuto.

5.2.2 La observación de los componentes atmosféricos minoritarios mediante sondeo al limbo

Las regiones milimétrica y submillimétrica del espectro electromagnético contienen gran número de líneas espectrales de gases atmosféricos minoritarios. La geometría de observación al limbo facilita la detección de líneas de gases atmosféricos con una razón de mezcla del orden de varias partes por millón en volumen, en tiempos de integración de varios segundos o, como máximo, algunas decenas de segundos con la tecnología actual (ver figura 5.4). Muchos gases interesantes en los ciclos más significativos de la química atmosférica se pueden estudiar entonces mediante ésta técnica. Podemos planear, por ejemplo, el observar la línea rotacional más intensa de ClO así como la línea fundamental de HCl, que no pueden observar desde Tierra; el estudio del ozono con un abanico más amplio de frecuencias, de sensibilidad, de resolución y de cobertura espaciales, etc...; y el estudio de otros gases como N_2O , CO , H_2O , NH_3 , SO_2 , NO_2 , etc..., con las mismas ventajas. En la figura 5.4 podemos ver el aspecto de la emisión atmosférica en el submilimétrico para observación al limbo.

El satélite ODIN, del que hablaremos en el apartado siguiente, está ideado para llevar a cabo observaciones espectroscópicas al limbo en el dominio submilimétrico para el estudio de diferentes gases minoritarios. Una adaptación del programa de inversión que se presentó en el transcurso de éste trabajo se prevee en éste contacto.

Como hay otros grupos que participan en éste proyecto, en el Observatoire de Bordeaux, la Universidad *CHALMERS* en Göteborg y *MISU* (Estocolmo), hemos preferido concentrar nuestro esfuerzo sobre la inversión de líneas del oxígeno molecular que serán observadas por ODIN para determinar los perfiles verticales de temperatura y de presión. Teniendo en cuenta la complejidad de la transferencia radiativa en el caso del oxígeno (comparado a los gases minoritarios que no poseen momento magnético), es evidente que el procedimiento que se describirá en la sección siguiente se puede adaptar a los gases minoritarios. No vamos a entrar en los detalles ahora, sobretodo teniendo en cuenta que una buena parte de la estrategia a seguir para la inversión de los datos de ODIN no se discutirá hasta al menos seis meses después de la presentación de éste trabajo (“*ODIN Aeronomy Workshop*” – verano de 1997).

La descripción de los comandos de ATM que permiten efectuar simulaciones de espectros al limbo atmosférico se encuentran en el anexo A.

5.2.3 L'étude du profil de température au moyen de cette technique. Le projet ODIN

La participación del DEMIRM al aspecto científico de la parte de aeronomía del proyecto ODIN¹ está orientada al desarrollo de un programa de inversión para recuperar el perfil vertical de temperatura y presión a partir de observaciones hacia el limbo de líneas del oxígeno atmosférico. Esto es posible gracias a la experiencia adquirida durante el desarrollo y la validación del modelo presentado en la sección 3.1 de éste trabajo. Ya habíamos señalado entonces que la emisión resonante en el milimétrico y le submilimétrico de ese gas en la atmósfera depende casi exclusivamente del perfil vertical de temperatura y de presión (gracias a que su razón de mezcla es mucho mejor conocida que la de otros gases). El sondeo al limbo atmosférico de líneas rotacionales del oxígeno es una muy buena técnica para medir la presión y la temperatura en una capa relativamente estrecha en torno al ° punto de tangencia. Éste tipo de observaciones es un complemento necesario para los sondeos al limbo de otros gases atmosféricos a la hora de establecer (o validar) la escala vertical con la presión. Observaciones de éste tipo han sido llevadas a cabo por el instrumento MLS,

1. ODIN es un satélite con participación mayoritaria de Suecia, con contribuciones de Francia, Canadá y Finlandia. Los objetivos científicos están divididos entre astrofísica y aeronomía. En el contexto de éste trabajo nos hemos interesado en el instrumento SMR que realizará observaciones espectroscópicas en el milimétrico y, sobre todo, en el submilimétrico.

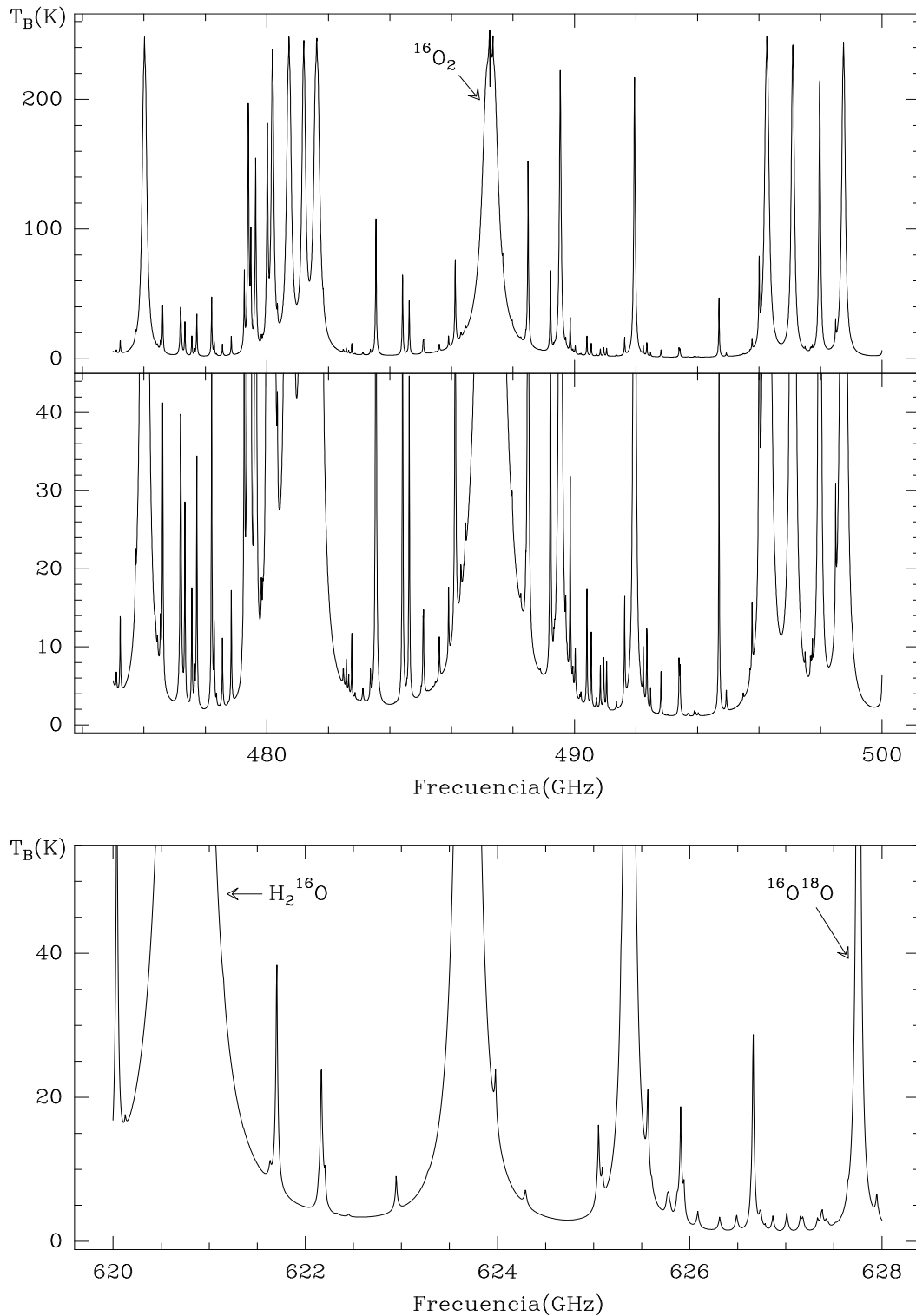


FIG. 5.4 - Espectros sintéticos al limbo atmosférico (punto de tangencia a 32 km) en diversas bandas submilimétricas. Vemos una gran cantidad de líneas que muestran unas temperaturas de brillo de hasta decenas de grados Kelvin o superiores (corregidas según la ecuación 2.14 a causa de la no aplicabilidad de la aproximación de Rayleigh-Jeans para las condiciones atmosféricas en el submilimétrico) y que pertenecen en gran parte al ozono, vapor de agua, oxígeno y especies isotópicas).

a bordo del satélite UARS (*Fishbein et al.* (1994) [26], véase el apartado siguiente).

Algoritmo propuesto para calcular la temperatura y presión

El algoritmo que se está desarrollando se orienta al cálculo del perfil de temperatura y de presión, con un tratamiento especial para alturas superiores a unos 50 kilómetros mediante observaciones espectroscópicas de líneas del oxígeno molecular hacia el limbo atmosférico. Para puntos de tangencia por debajo de la estratopausa, el papel del efecto Zeeman va dejando de ser importante. (véase la figura 5.8). En ésta zona, por tanto, un algoritmo de inversión basado en una ecuación escalar de transferencia radiativa puede ser suficiente. El objetivo de nuestro trabajo es el de mostrar que tipo de errores puede generar en la inversión una mala modelización de la transferencia radiativa directa; estudiar la importancia de esos errores en función de la altura; y, finalmente, verificar la convergencia del algoritmo de inversión, todo esto para diversos niveles de ruido en los espectros sintéticos y con diferentes perfiles T-p, más o menos alejados del perfil "verdadero", como punto de partida.

En lo que respecta a la anchura de las líneas atmosféricas de oxígeno molecular tenemos que decir que en las regiones atmosféricas donde el mecanismo de ensanchamiento colisional domina sobre el ensanchamiento térmico, y es la presión el parámetro físico determinante ya que su rango dinámico entre 0 y 60 km de altura es mucho mas grande que el de la temperatura. El nivel total de emisión y la forma de línea, sin embargo, están determinados casi exclusivamente por el perfil de temperatura ya que se trata de una emisión térmica donde la función fuente es la función de Planck a la temperatura física de la capa. El ensanchamiento térmico (de tipo gaussiano), es competitivo o dominante a alturas por encima de unos 60 km (ligeras variaciones según la molécula de la que se trate). A esas alturas el perfil de línea contendrá muy poca información sobre la presión por lo que dicho parámetro es muy difícil de derivar. Las alturas donde sucede esto coinciden prácticamente con aquellas donde el efecto Zeeman es importante. Por encima de ~ 60 km los errores relativos en la determinación de la presión comienzan a ser importantes respecto a los cometidos en la determinación de la temperatura. De hecho, la intensidad del campo magnético se convierte en un parámetro más fácil de determinar que la presión si las observaciones tienen una resolución espectral suficiente.

Para las simulaciones consideramos espectros sintéticos con puntos de tangencia por encima de 30 km. Para las líneas de oxígeno consideradas aquí, la emisión para

Cálculo del perfil de temperatura au mediante sondeos al limbo		
Instrumento	MLS (UARS)	SMR (ODIN)
líneas de O ₂ usadas	62.998 GHz 63.569 GHz	118.75 GHz 487.25 GHz? 566.90 GHz?
Receptor	Superheterodino (OL=63.285 GHz)	SIS
Espectrómetros	Banco de filtros de 15 canales · ~500 MHz de cobertura · resolución espectral más fina hacia el canal central	· 3 filtros x 40 MHz · autocorreladores de ~300 o ~130 kHz de resolución
Algoritmos de inv.	Estimación de Rodgers: · Matricial · Linealización del problema · No se trata la región $\nu_c \pm 10$ MHz	Ajuste gen.: · Mínimos cuadrados · problema no linealizado · tiene en cuenta el efecto Zeeman
Dominio de validez	h entre 25 y 55 km	h entre 30 y 95 km (→ 110 km?)
resolución	~5 km	~3 km

TAB. 5.1 - Éste cuadro muestra una comparación de las capacidades previstas de ODIN dans para la medida del perfil de temperatura en los dominios milimétrico y submilimétrico comparadas a las de MLS (Fishbein et al., 1996 [26]).

puntos de tangencia por debajo de esta altura es bastante ancha (más de 500 MHz) y saturada en una región de frecuencias grande alrededor de la resonancia, lo que hace muy difícil extraer información sobre los parámetros físicos.

Por el momento no ha sido necesario utilizar algoritmos de inversión del tipo que hemos presentado aquí ya que el único instrumento que ha realizado observaciones de líneas de O₂ en sondeo al limbo fue un radiómetro a 63 GHz del sistema MLS (a bordo del satélite UARS), descrito en *Fishbein et al.* (1996) [26]. Sus características principales se presentan en el cuadro 5.1. Éste sistema está destinado al estudio de los perfiles de temperatura entre 22 y 0.46 hPa (entre 25 y 53 km de altura aproximadamente).

El satélite ODIN puede utilizar tres líneas de oxígeno para éste tipo de estudios ya que entran en las bandas de frecuencia de los receptores disponibles. Estas líneas

son: $N_J=1_1 \rightarrow 1_0$ a 118.75 GHz $N_J=3_3 \rightarrow 1_2$ a 487.25 GHz y ($N_J=4_3 \rightarrow 2_3$ de $^{16}\text{O}^{18}\text{O}$ a 566.90 GHz. Hemos estudiado las posibilidades de utilización individual o conjunta de estas tres líneas para medir la temperatura y la presión hasta el nivel más alto posible.

De manera general, la emisión al limbo para una línea de O_2 medida por sistemas embarcados sobre satélite depende de los parámetros siguientes: temperatura, presión, razón de mezcla del oxígeno, proyección de la velocidad del satélite sobre la dirección de observación, y campo magnético. Además, la observación se ve afectada por parámetros instrumentales como el diagrama de antena, las ganancias relativas de las bandas del receptor, el ruido de sistema, etc... Una correcta estimación de la temperatura necesita, por tanto, de un buen conocimiento de los parámetros instrumentales, de la dirección de observación y la proyección sobre ella de la velocidad del satélite, del campo magnético local y de la razón de mezcla del oxígeno. Éste último parámetro se conoce bien hasta unos 80 km de altura (esencialmente constante). Por encima de éste nivel la razón de mezcla decrece debido a la fotodisociación por el UV solar, lo que se debe tener en cuenta en el proceso de inversión.

Como ya habíamos hecho en los apartados 3.2 y 3.3, la división en capas de la atmósfera y la elección de los niveles donde las variables físicas se consideraran parámetros libres en el proceso de inversión de los espectros (ajuste iterativo por mínimos cuadrados), se efectúan tras un estudio preliminar sobre la base de criterios siguiente: líneas observadas, cobertura y resolución espectral, distancia vertical entre los puntos de tangencia que corresponden a los espectros individuales, etc... Algunos trabajos de referencia para éste estudio preliminar son *Bevilacqua* (1988) [10] et *Rodgers* (1976) [75].

Estudio preliminar para el cálculo de temperatura y presión a partir de espectros sintéticos

Éste trabajo de preparación del método de inversión se centra sobre las líneas de O_2 a 118.75 GHz y a 487.249370 GHz. Ambas serán accesibles para ODIN. También hemos extendido el estudio a la línea centrada a 424.25 GHz, que es la transición submilimétrica más intensa de O_2 en la estratosfera.

El cálculo de las funciones de peso en temperatura correspondientes a frecuencias alejadas más de ~ 3 MHz del centro de la resonancia rotacional a 118.75 GHz muestra que, en el caso de sondeo al limbo, sus anchuras verticales son del orden de ~ 5 km.

Una visión general de como cambia la función de peso con la frecuencia para ésta línea de $^{16}\text{O}_2$, para un sondeo al limbo con punto de tangencia en la mesosfera, se muestra en la figura 5.5. En ella vemos que en la mesosfera, las alturas a las que se puede extraer información sobre la temperatura cambian significativamente con la polarización en una zona de varios MHz alrededor de la resonancia rotacional. Según la posición del punto de tangencia, ésta región central tiene una importancia más o menos grande en el perfil global de la línea. A 80 km, (figura 5.5) las diferencias son muy importantes dependiendo de la polarización y es imposible establecer una función de sondeo única. Las funciones de sondeo son la base de los métodos de inversión basados en una aproximación lineal (Rodgers, Backus-Gilbert, etc...). El papel jugado por la polarización hace que en el caso del oxígeno estos métodos lineales no pueden dar resultados completamente satisfactorios. Por eso proponemos un algoritmo general de ajuste no lineal de los espectros por mínimos cuadrados.

Tomemos, por ejemplo, un conjunto de espectros sintéticos a 118 GHz con puntos de tangencia entre 92 y 50 km con un paso vertical de 3 km. La situación geográfica es $\text{LAT}=0^\circ$ y $\text{LONG}=0-20^\circ$. Cuando no se toma en cuenta el efecto Zeeman, la emisión que corresponde al trayecto con punto de tangencia a 92 km debería presentar un pico aislado ya que la radiación se propaga entre el punto de tangencia y el satélite al atravesar capas donde la temperatura aumenta (la mesopausa se sitúa por debajo de 95 km). Entonces, la depresión central sólo se puede explicar mediante un efecto Zeeman que da lugar a dos picos que vemos a cada lado de la frecuencia central de resonancia rotacional. Para puntos de tangencia por debajo de la mesopausa (70 km por ejemplo), se predice una absorción central en la línea a causa del gradiente negativo de temperatura en la parte mesosférica por encima del punto de tangencia. El efecto Zeeman en éste caso hace variar la profundidad y anchura de ésta absorción central, lo que se ve claramente al comparar los perfiles de línea con y sin campo magnético (figura 5.8). Para puntos de tangencia situados en la estratosfera, la anchura de las líneas es del orden de algunos centenares de MHz. Entonces, la parte central (± 10 MHz) se puede eliminar de los cálculos casi sin afectar a la temperatura y presión calculadas.

La inversión en las simulaciones que presentamos aquí ha sido desarrollada de la forma siguiente: se parte del espectro correspondiente al punto de tangencia más alto (por ejemplo 95 km) y se calcula temperatura y presión en la capa 95-98 km por ajuste del espectro sintético (el perfil a priori de presión y temperatura es bastante diferente del perfil "verdadero"). Estos valores de temperatura y presión se incor-

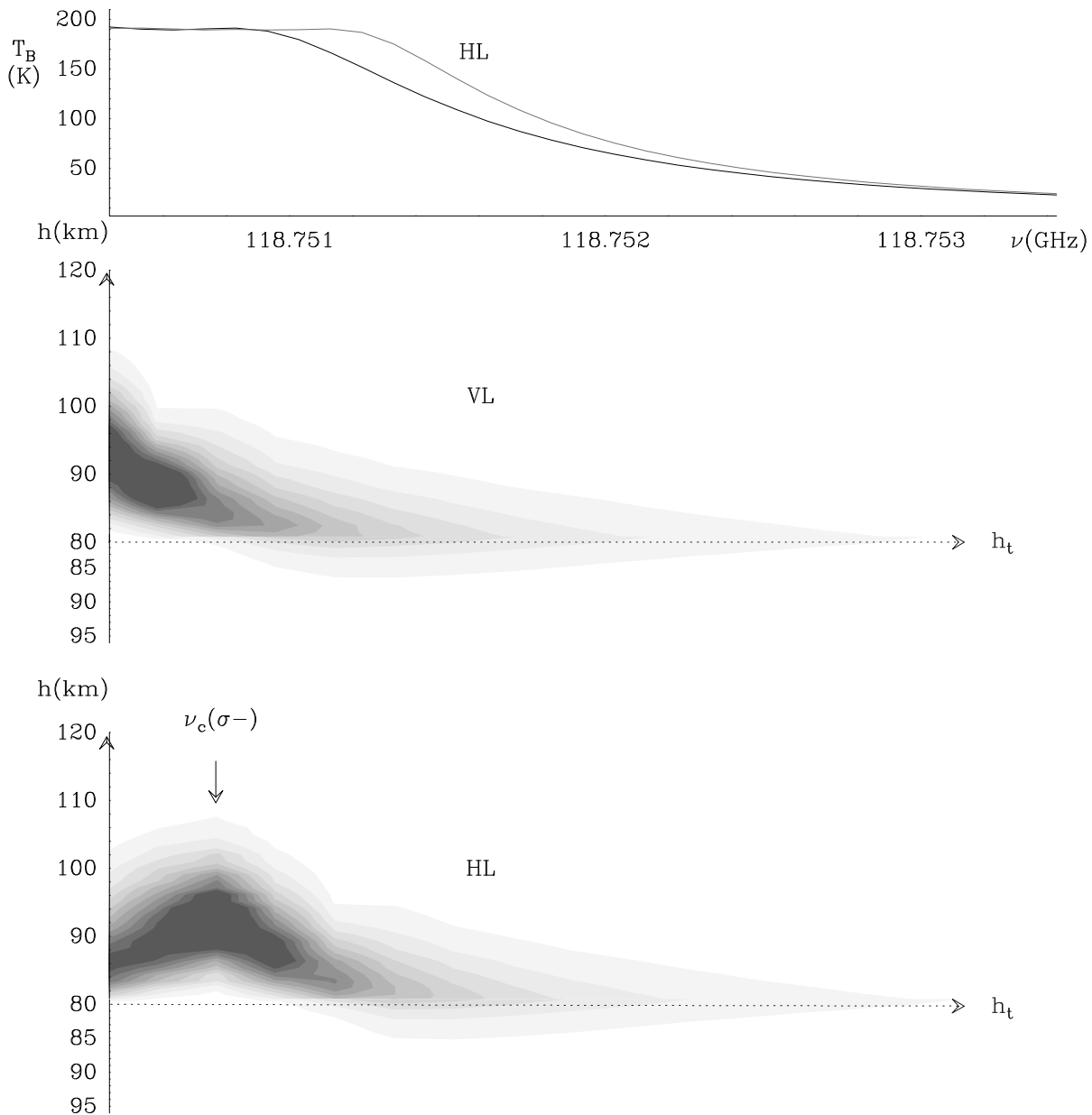


FIG. 5.5 - Variación espectral de la función de peso en temperatura (en la figura damos los elementos de matriz W_{11} y W_{B22} para la base [HL,VL] en el plano de fase) por la línea del oxígeno centrada a 118.75 GHz y un camino de propagación O-E sobre el ecuador con un punto de tangencia a 80 km. Hemos normalizado a 1 tonalidad de gris más intensa) el máximo de la matriz $W(h, \nu)$. El tono gris más claro corresponde a 0.1. Aprovechando el mismo eje de frecuencias hemos trazado los elementos T_{B11} y T_{B22} de la matriz de temperatura de brillo en la misma base (arriba).

poran a la información a priori para la inversión del espectro siguiente cuyo punto de tangencia está 3 km más abajo, salvo en el caso de que los valores calculados sean con evidencia falsos (a causa de un parámetro de entrada incorrecto). En ese caso se detienen los cálculos y se realiza un test para encontrar el problema. En caso contrario, el cálculo continúa hasta la llegada al punto de tangencia más bajo, calculando a cada paso la temperatura y la presión entre $h_{tang.}$ y $h_{tang.}+3$ km. Esta estrategia es simple y no la mejor posible. Existen dos problemas principales:

A) Es evidente que ésta manera de proceder tiene el inconveniente de acumular los errores al ir descendiendo. Éste problema es crítico al inicio de los cálculos y hasta una altura de unos 70 kilómetros ya que la parte $\nu_c \sim \pm 5$ MHz del espectro (donde las funciones de peso no están centradas sobre el punto de tangencia sino algunos kilómetros más abajo, ver figura 5.5) es suficientemente importante en el perfil de línea global. Hemos verificado, por ejemplo, que al considerar la temperatura entre 95 y 98 kilómetros como parámetro libre para ajustar el espectro correspondiente al punto de tangencia de 95 km, se puede crear un error importante (del orden del 15%) que tiene consecuencias importantes en capas hasta al menos 5 o 6 capas más abajo (para luego desaparecer. es muy estrecha y las capas hasta unos 110 km contribuyen de manera importante a la emisión).

B) Hasta aquí hemos dicho que tendríamos en cuenta el efecto Zeeman en los cálculos pero se suponía lque el campo magnético se conocía perfectamente, a partir de un modelo usado en las simulaciones. De hecho, siempre existe una incertidumbre en la dirección de observación. Esto induce errores tanto en la intensidad como en la dirección del campo magnético, que se deben añadir a las desviaciones entre el modelo de campo magnético y la realidad. Los errores en la dirección del campo inducen incertidumbres sobre la polarización de la emisión detectada y tendrán un efecto directo sobre la temperatura calculada que será muy difícil de identificar. Los errores en la intensidad del campo magnético actuarán sobre la posición de las componentes Zeeman y se podrían corregir usando la intensidad del campo como un parámetro libre adicional en el ajuste ya que éste va a estar muy poco o nada afectado por la temperatura (a determinar simultaneamente).

Por tanto, con el objetivo de mejorar la inversión hemos actuado así:

1) **Información a priori** del perfil atmosférico. Proviene de una atmósfera padrón U.S. Stnd. 76 para la estación y zona de latitud correspondiente. Para el campo magnético dicha información se deriva del modelo *Barraclough et al.* (1985) [5].

2) **Primer espectro** (95 km de punto de tangencia en el caso mostrado aquí): Se utiliza un parámetro libre que actúa sobre toda la curva de temperatura al menos 12 km por encima de 95 km.

3) **Otros espectros** (puntos de tangencia por debajo de 95 km en pasos de 3 km): La presión y la temperatura en una capa de tres kilómetros de espesor por debajo del punto de tangencia son parámetros libres en el ajuste de cada espectro.

4) **Todos los espectros con puntos de tangencia por debajo de 72 km**: Se toma la dirección del campo magnético del modelo correspondiente a la línea de observación considerada y se toma su intensidad como un parámetro libre a ajustar en la misma capa que la presión y la temperatura.

En las figuras 5.6, 5.7 presentamos como, a partir de las simulaciones, ésta estrategia mejora considerablemente la calidad de la inversión.

La figura 5.8 ilustra como la inversión puede dar errores importantes en la determinación de la temperatura si no se siguen las etapas propuestas en éste trabajo.

5.2.4 Sistemas de sondeo actuales y futuros

Los pioneros: MLS et MAS

La utilización del sondeo al limbo para estudiar de forma pasiva la atmósfera es muy reciente. De hecho, el primer sistema operativo es **MLS** ("Microwave Limb Sounder"), uno de los instrumentos del satélite UARS lanzado en 1991 por la NASA). MLS observa a 90° de la dirección del movimiento de UARS. Las bandas espectrales de trabajo de éste instrumento se han elegido principalmente para favorecer el estudio del perfil vertical de ozono entre 15 y 80 km, de ClO entre 15 y 45 km, H₂O entre 15 y 85 km, y también medir la temperatura y la presión entre 30 y 60 km y algunas otras moléculas atmosféricas que poseen líneas en esas bandas de frecuencia. Las frecuencias de trabajo se sitúan alrededor de 63, 183 y 205 GHz. La órbita del satélite permite medir entre 34° de latitud en un hemisferio y 80° en el otro con alternancia de hemisferios cada 36 días. El sistema posee una antena de 1.6 metros, equivalente a una resolución angular de $4.2'$ a 205 GHz. Un cuerpo negro de referencia y el fondo cósmico de radiación son la base para la calibración. La radiación recibida se puede encaminar hacia 3 radiómetros tipo Schottky a temperatura ambiente que trabajan alrededor de las frecuencias 63, 205 y 183 GHz. Posteriormente la señal se analiza con ayuda de seis bancos de filtros diferentes para obtener los espectros de O₂, ClO,

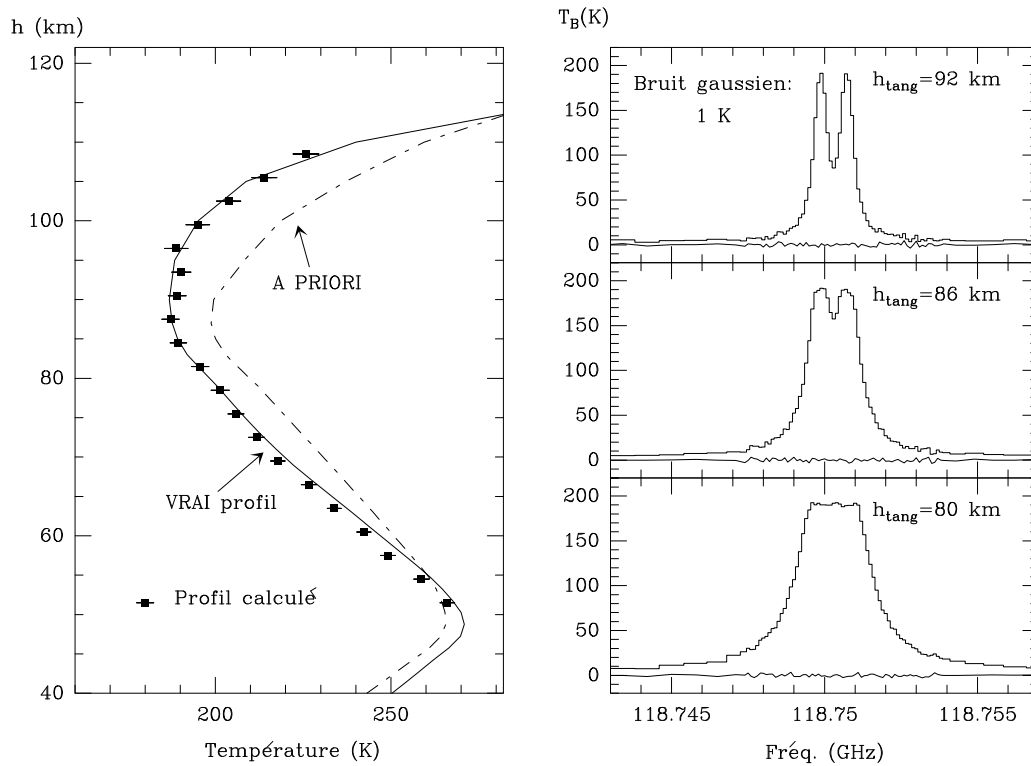


FIG. 5.6 - Ejemplo de perfil de temperatura calculado mediante el procedimiento presentado en éste apartado a partir de los espectros sintéticos a 119 GHz creados utilizando la atmósfera estándar U.S. Atm. 76, a los que se añade un ruido gaussiano de 1 K. En el texto se dan detalles sobre la zona del planeta que se está considerando. En la simulación se supone que el receptor trabaja en polarización lineal vertical (perpendicular, en el caso considerado, al campo magnético local). Entonces, los dos picos de emisión visibles claramente en los espectros sintéticos a 95 y 86 km de punto de tangencia son las componentes σ_{\pm} de la línea de O_2 a 118.75 GHz.

O_3 (a dos frecuencias para ésta molécula) y H_2O . Para los objetivos científicos de éste sistema se necesitan dos rangos de resoluciones espectrales: alrededor de 1 MHz para medir las abundancias moleculares por debajo de 50 km, allí donde las líneas atmosféricas tienen una anchura mayor que unos 2 MHz (véanse los apartados 2.3.4 y 4.3.3), y ~ 0.1 MHz para algunas especies que se pretenden observar por encima de unos 50 km, donde las anchuras de línea son más pequeñas que ~ 1 MHz. Los receptores funcionan en doble banda y las ganancias son prácticamente iguales en las bandas superior e inferior. El tiempo de integración para cada espectro al limbo es de 2 s. Un barrido completo entre 5 y 95 kilómetros se realiza en un minuto. Los primeros resultados de éste sistema ya se han publicado (véase, por ejemplo, Froide-

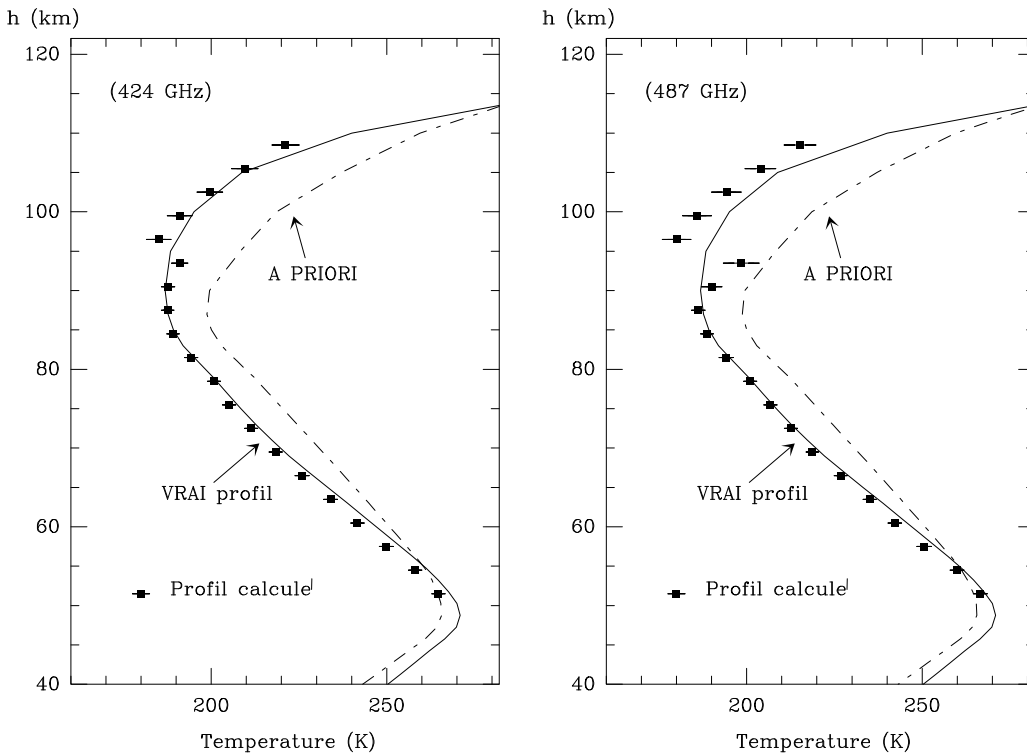


FIG. 5.7 - Ejemplo de perfil de temperatura calculada por el procedimiento de inversión presentado en ésta sección a partir de espectros sintéticos a 424 GHz y 487 GHz con un ruido gaussiano de 1 K y la misma geometría que en los espectros de la última figura a 118.75 GHz. Vemos que a un nivel de ruido de 1 K en los espectros, los resultados de la inversión son peores en esas dos líneas que a 118.75 GHz por encima de 85 km, lo cual se debe sin duda a la mayor complejidad de la estructura de éstas líneas.

vaux et al., 1996 [29], *Waters et al.*, 1996 [96], *Manney et al.*, 1995 [55], etc...). Hay que reseñar principalmente las medidas de la distribución geográfica de ozono y de ClO en diferentes niveles de presión, lo que ha permitido la realización de estudios globales del fenómeno del agujero de ozono durante la primavera local alrededor del Polo Sur et del papel de las fuertes concentraciones de ClO en la baja estratosfera et de los procesos químicos que tienen lugar en la parte alta de las “Nubes Polares Estratosféricas” sobre la formación del agujero de ozono.

Ya se señaló que MLS ha efectuado medidas del perfil atmosférico de presión y de temperatura mediante un radiómetro doble banda cuya frecuencia de oscilador local O se sitúa entre dos líneas de O₂ (62.998 et 63.569 GHz).

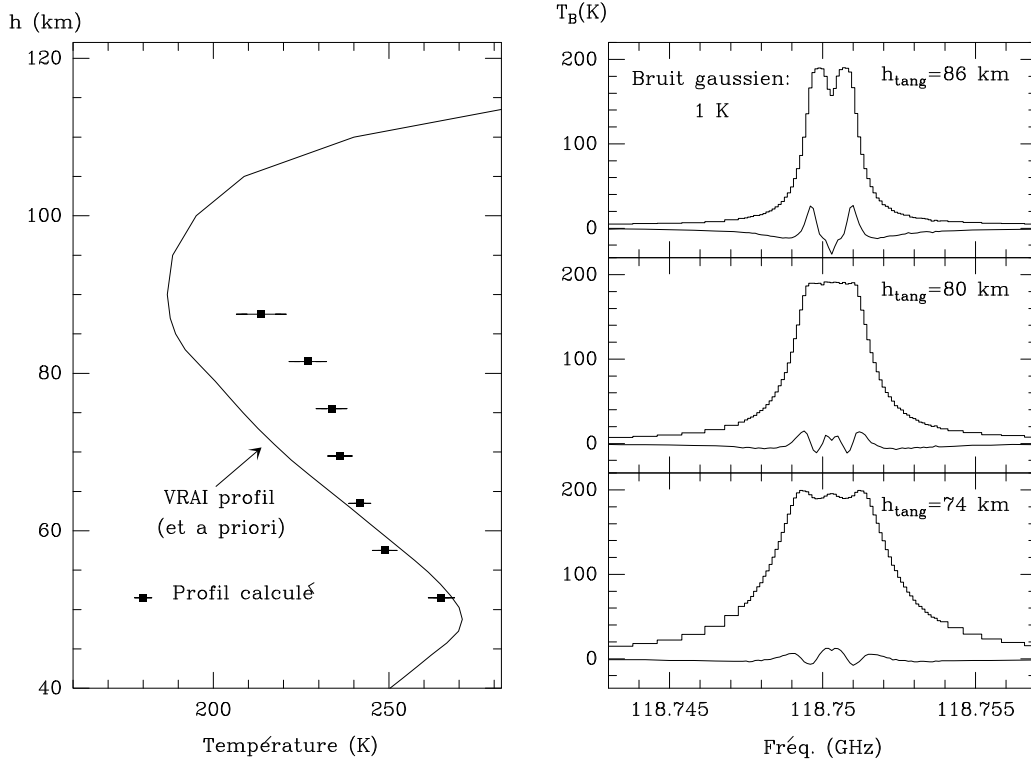


FIG. 5.8 - Aquí mostramos los errores en la determinación de la temperatura en diferentes alturas a partir de líneas del oxígeno observadas hacia el limbo atmosférico cuando el algoritmo de inversión desprecia el efecto Zeeman. En los cálculos se ha dado como información a priori el perfil verdadero de temperatura por encima de cada punto de tangencia. Vemos que en los resultados y en los ajustes de espectros sintéticos los errores comienzan a ser importantes por encima de unos 60 km. Más abajo no es necesario tener en cuenta éste efecto debido a la anchura de las líneas y también a causa de la despolarización que resulta del mayor número de colisiones.

Próximo sistema: el nuevo EOS-MLS

Para reemplazar a MLS, está previsto construir un nuevo instrumento que incorporará, respecto al antiguo, ciertas mejoras técnicas alcanzadas en los últimos tiempos en el dominio de la detección heterodina de ondas electromagnéticas milimétricas y submilimétricas. Se prevee primero una subida en frecuencia hasta el submilimétrico con radiómetros a unos 560 y 637 GHz. En el dominio milimétrico tendrá receptores a 118, 205 y 268 GHz (el vapor de agua se medirá usando su resonancia rotacional fundamental a 557 GHz, mientras que el oxígeno, de nuevo para medir el perfil de temperatura y de presión, se medirá a 118.75 GHz). Se preveen otras mejoras técnicas como el uso de amplificadores de banda ancha para la frecuencia intermedia (IF),

la disponibilidad de espectrómetros acusto-ópticos de dimensiones mucho menores, y mejoras significativas de los sistemas de refrigeración a bordo para los mezcladores de frecuencia y preamplificadores.

El radiómetro centrado a 637 GHz permite cubrir la línea rotacional de HCl a 626 GHz y una línea relativamente fuerte de ClO a 649 GHz. Por otro lado, el radiómetro a 560 GHz cubre una transición de ClO a 575 GHz. Además, existen otras moléculas atmosféricas que se pueden observar en la zona de 20 GHz aproximadamente que puede alcanzar cada radiómetro. Las frecuencias centrales de éstas observaciones de doble banda son cuidadosamente elegidas para evitar superposiciones de líneas de una banda sobre la otra. Por otro lado, el espectrómetro conectado al receptor de 205 GHz permite proseguir el programa de observación de dos líneas vecinas de O₃ y ClO, que ya comenzó con el actual MLS. Sin embargo, las medidas de ClO deben mejorar gracias al uso de radiómetros a 637/560 GHz pues se debe alcanzar una sensibilidad a ClO comparable a la que tenemos a 205 GHz pero en un tiempo de integración unas 50 veces menor. La posibilidad técnica de subir en frecuencia nos hace pensar en la realización de un radiómetro a 2514 GHz, para medir principalmente OH, que tiene transiciones rotacionales a 1.8, 2.5 y 3.5 THz y es químicamente activo en todas las regiones de la atmósfera terrestre. La frecuencia 1230 GHz es potencialmente interesante para HF.

Ésta misión futura debe permitir efectuar de bastantes gases que intervienen en los procesos químicos que afectan al ozono, ya sean especies que juegan un papel de reserva o especies que producen radicales. Está previsto igualmente medir la temperatura y la presión desde la troposfera hasta la alta mesosfera. Por otra parte, la medida de la emisión de especies excitadas de O₂ (¹Δ o ³Σ v=1) puede proporcionar informaciones importantes sobre la producción de ozono en la alta estratosfera y en la mesosfera.

Proyectos de la ESA: MASTER y SOPRANO

La Agencia Espacial Europea (ESA) tiene previsto a medio plazo (años 2000) dos instrumentos dedicados al estudio de la atmósfera mediante sondeos al limbo, que serán embarcados sobre una serie futura de satélites. Debido al perfil de densidad atmosférica, se ha pensado en dos instrumentos separados, uno para la observación de la troposfera y otro para la estratosfera y la mesosfera. Esto debe permitir adaptar las especificaciones técnicas de cada instrumento con el fin mejorar la calidad de la

<i>Bandas por debajo de 1 THz</i>		
Bande	MASTER	SOPRANO
A	199-207 GHz	498.5-503.5 GHz
B	296-306 GHz	624.5-626.8 GHz
C	318-326 GHz	635.5-637.5 GHz
D	324-348 GHz	951-955.5 GHz
<i>Bandas por encima de 1 THz</i>		
	MASTER	SOPRANO
	0.8-3.5 THz THz	0.1-10 THz (Astrofísica)

TAB. 5.2 - Bandas de frecuencia preseleccionadas para los instrumentos MASTER y SOPRANO.

información final.

La base de estos instrumentos es, como en MLS y ODIN por ejemplo, los receptores heterodinos sobre un satélite y el sondeo al limbo en usando distintos espectrómetros. El cuadro 5.2 da las bandas de frecuencia previstas para dichos instrumentos.

El dominio de alturas (punto de tangencia) considerado para MASTER es 5 a 20 km. La órbita prevista del satélite es similar a la de muchos otros satélites meteorológicos de órbita sincronizada al Sol (a unos 800 km de altura aproximadamente). Las bandas de frecuencia se preseleccionaron (cuadro 5.2) para los siguientes objetivos científicos:

Banda A) H_2^{18}O (203.41 GHz), N_2O (200.97 GHz), SO_2 (varias líneas entre 200 y 206 GHz), ^{35}ClO (204.35 GHz). Ésta banda coincide en gran parte con la del proyecto EMCOR (apartado 3.4). Éste proyecto puede ayudar a la preparación de MASTER.

Bande B) $^{16}\text{O}^{18}\text{O}$ (298.47 GHz) y $^{16}\text{O}_3$ a 300.68, 301.68 y 303.16 GHz.

Bande C) H_2O a 325.15 GHz.

Bande D) CO a 345.77 GHz y HNO_3 entre 344 y 345 GHz.

El barrido en elevación será entre 0 y 20 km en pasos de 1 km con una duración por ciclo de 21×0.3 s. En el dominio de altitudes de MASTER, la radiación emitida

por la atmósfera se puede considerar no polarizada.

La misión SOPRANO está consagrada principalmente a moléculas relacionadas con el cloro con el objetivo de profundizar en el conocimiento de la química de éste elemento en la estratosfera. SOPRANO sólo considera canales submilimétricos. El dominio de alturas será 10 a 50 km en pasos de 1 km (duración total de un barrido: 41×0.3 s). Los objetivos científicos se pueden dividir en dos partes. Por un lado, las moléculas prioritarias que deben ser detectables para el instrumento: ClO, HCl, O₃, NO y O₂. Por otro lado hay una serie de moléculas cuya detección se presume difícil: BrO, HOCl, CH₃Cl, HO₂ y HNO₃. Además, H₂O y N₂O están clasificadas como no prioritarias ya que éstas moléculas se estudiarán mejor en la estratosfera mediante otros sistemas.

Capítulo 6

Conclusiones y perspectivas

Presento aquí los objetivos alcanzados en éste trabajo así como un recorrido de las orientaciones futuras de mi actividad investigadora:

A) Programa de transferencia radiativa atmosférica ATM.

La versión actual de éste programa tiene las siguientes características generales:

a) Funciona entre 1 y 1000 GHz y permite simular la transferencia radiativa atmosférica en geometría plano-paralela (observación desde el suelo o desde un satélite) o esférica (para el sondeo al limbo).

b) Tiene 5 descripciones diferentes de la absorción por H_2O y O_2 . Los gases minoritarios O_3 , N_2O , CO , y otros con transiciones más débiles, están incluidos así como los isótopos y los estados vibracionalmente excitados de H_2O , O_2 y O_3 cuya emisión se puede considerar importante.

c) El programa ha sido adaptado para el análisis de datos de MSU, SSM/T1 y SSM/T2 en coincidencia espacial y temporal con radiosondeos (capítulo 4).

d) Permite simular la transferencia radiativa anisótropa y dependiente de la polarización en las proximidades de las resonancias del oxígeno molecular.

e) Permite calcular las funciones peso y las funciones de sondeo para ayudar a la deconvolución de las observaciones espectroscópicas en el dominio de frecuencias de éste trabajo.

f) Contiene un modelo simple de emisividad de superficie para los océanos.

Éste programa se ha instalado en diversos laboratorios durante el tiempo de desarrollo del trabajo para diferentes fines. Por ejemplo:

- *Centro de Meteorología Espacial, Lannion (Francia)*. Programa de referencia con el objetivo de preparar el algoritmo de inversión rápida para los sistemas AMSU-A y B. En éste marco se ha previsto una convención entre el CMS y el DEMIRM para 1997.

- *Observatorio de Burdeos*. Intercomparaciones.

- *Grupo de Astrofísica submilimétrica de CALTECH, Pasadena (USA)*. Análisis de las medidas de la trasmisión atmosférica en Mauna Kea entre 200 y 1000 GHz tomadas con un espectrómetro de transformada de Fourier en el telescopio CSO.

- *Telescopio Submilimétrico JCMT, Mauna Kea (Hawaii)*. Analisis de los datos de un radiómetro de tres canales alrededor de 183.31 GHz (véase la parte final del capítulo 4).

- *DEMIRM/Observatorio de París (Francia) y Observatorio Astronómico Nacional (Españ)*. Programa de transferencia radiativa atmosférica de referencia.

- *INPE (Brasil)*. Preparación para la investigación en aeronomía y meteorología por satélite en el dominio de las microondas.

B) Programa de inversión.

Éste programa se desarrolló durante la realización de éste trabajo de tesis sobre la base del modelo directo ATM, y se ha utilizado para analizar medidas desde tierra de la línea del vapor de agua a 183 GHz y de diversas líneas del ozono entre 142 y 359 GHz. También se ha adaptado al análisis de observaciones al limbo; se han ilustrado principalmente en éste trabajo las capacidades del programa para calcular el perfil de temperatura por encima de 50 km de altura a partir de espectros sintéticos del oxígeno. Hay que continuar con ésta parte del trabajo para adaptar el programa a las especificaciones de los instrumentos EMCOR y ODIN para poder analizar las observaciones de estos.

C) Modélisation et validation du transfert radiatif des raies de l'oxygène dans la mésosphère.

Se han completado diversos modelos previos del efecto Zeeman en las líneas $\Delta N=0$ del oxígeno y se han extendido a las líneas $\Delta N=\pm 2$ y a las líneas de las especies isotópicas. Se ha demostrado que la detección de la subestructura Zeeman es posible desde tierra usando las líneas de las especies isotópicas. Para ello, se realiza-

ron observaciones de una línea de $^{16}\text{O}^{18}\text{O}$ a 234 GHz que han permitido comprobarr la validez del modelo. La mayor parte del trabajo experimental en éste sentido se llevó a cabo con el telescopio POM-2 en Plateau de Bure pero también disponemos de datos del telescopio de 30 metros del IRAM en Pico Veleta. Se han propuesto nuevas observaciones de otra línea de $^{16}\text{O}^{18}\text{O}$ a 401 GHz a realizar con el telescopio submilimétrico CSO en Mauna Kea (Hawaii) así como otras observaciones más detalladas a 234 GHz con el telescopio JCMT, situado también sobre Mauna Kea, y que dispone de un sistema de rotación de la polarización a la entrada del receptor.

Éste trabajo nos ha permitido adquirir la experiencia necesaria para la puesta a punto del algoritmo de inversión en temperatura citado en el párrafo (B); y también se aprovechó para el estudio de definición de los canales para un proyecto de instrumento “Push-Broom” del CNES (capítulo 4).

D) Detección de la emisión del vapor de agua estrato-mesosférico desde tierra a 183 GHz.

Aprovechando unas condiciones troposféricas extremadamente secas (0.2 a 0.3 mm de columna de vapor de agua por encima del telescopio), se obtuvieron unos espectros donde la señal de ésta molécula procedente de la estratosfera y mesosfera es detectable. Se usó el algoritmo de inversión para deconvolucionar esas observaciones obteniendo así unos valores de la razón de mezcla de éste gas entre 30 y 65 km en buen acuerdo con las medidas más habituales a 22 GHz. Las medidas a 183 Ghz tienen una enorme ventaja respecto a las realizadas a 22 GHz: el tiempo de integración mucho más corto (unas 100 a 200 veces menor) para una misma relación señal sobre ruido. Se ha comenzado una colaboración para el análisis de los datos de dos radiómetros de tres canales alrededor de esa misma resonancia del vapor de agua, situados en los telescopios CSO y JCMT en Mauna Kea (Hawaii).

E) Medidas de líneas del ozono.

En el transcurso de éste trabajo hemos realizado medidas de gran calidad de diferentes líneas de ozono entre 142 y 359 GHz. Dichas medidas se han analizado con el programa de inversión, lo que ha permitido estimar le razón de mezcla del ozono en diferentes épocas en dos lugares diferentes (Pico Veleta y Plateau de Bure) entre ~ 25 y 72 km de altura con una resolución vertical entre 10 y 16 km. Ciertas líneas fueron medidas por vez primera usando ésta técnica. Los valores de la razón de mezcla obtenidos simultaneamente a partir de las medidas de dos líneas diferentes de ozono muestran una buena coherencia, dentro de las barras de error.

F) Comparación de datos de MSU, SSM/T1 y SSM/T2 con los resultados de la transferencia radiativa sobre los perfiles atmosféricos obtenidos de radiosondeos en coincidencia espacial y temporal.

Éste trabajo se inscribe en el marco de la preparación de los nuevos sistemas AMSU-A/B de la NOAA. Se trata de validar la transferencia radiativa alrededor de 60 y 183 GHz para tratar los datos que proporcionarán esos nuevos sistemas. Éste trabajo todavía no está terminado pero los primeros resultados nos conducen a elegir un modelo del tipo MPM-93 [53], tras corregir ciertas diferencias sistemáticas pequeñas y dependencias en latitud que todavía se tienen que precisar. En éste contexto, se ha señalado en ésta memoria de tesis la necesidad de proteger ciertas bandas de frecuencia para el estudio pasivo de la atmósfera y se han efectuado cálculos para apoyar los informes de Francia sobre éste tema (colaboración con el CNES en Toulouse y el CMS en Lannion, que debe continuar en 1997).

Apéndice A

Descripción de los comandos de ATM

En los diferentes capítulos de esta tesis hemos presentado las posibilidades del programa de transferencia radiativa atmosférica ATM, que actualmente está adaptado a las longitudes de onda milimétricas y submilimétricas, y hemos visto algunas aplicaciones. Aquí presentamos una descripción del lenguaje de ATM con el fin de ayudar a los futuros utilizadores.

El programa fue escrito en lenguaje FORTRAN 77 estándar y puede funcionar indistintamente sobre ordenadores de sistema VMS o UNIX.

El programa es interactivo. Ciertos parámetros y opciones están fijados por defecto, como veremos en el apartado siguiente. El formato de los comandos para ATM es un grupo de 4 letras, todas mayúsculas o todas minúsculas, que puede ser seguido de un número en ciertos casos. Los comandos de la versión actual de ATM los describimos aquí agrupados según la función para la que sirven:

Elegir el tipo de atmósfera:

Por defecto el programa utiliza una atmósfera patrón *U.S. Standard 1962 (invierno)* [91]. Para cambiar a otro tipo:

- ▷ **WINT** para elegir *U.S. Std. 1962* invierno.
- ▷ **SUMM** para elegir *U.S. Std. 1962* verano.
- ▷ **SPRI** para elegir *U.S. Std. 1962* primavera.

▷**FALL** para elegir *U.S. Std. 1962* otoño.

▷**ST76** para elegir *U.S. Std. 1976* (modelo estándar).

▷**TYPE** (valor de **1 a 6**) que permite, una vez elegida *U.S. Std. 1976* [92], seleccionar una de las seis atmósferas diferentes que existen en el mismo catálogo y que representan diferentes zonas de latitud y/o diferentes estaciones.

▷**USER** permite leer, y convertir a las unidades usadas en ATM, algunos perfiles atmosféricos de campañas experimentales que puede tratar ATM (ver cuadro 2.15), lo que ha sido realizado a lo largo de éste trabajo de tesis ¹.

° ▷**ST62** permite volver a la atmósfera considerada al principio por defecto.

Elegir la parametrización del coeficiente de absorción de H_2O y O_2 :

Nos referiremos aquí a diferentes modelos que tratan el continuo y las líneas de O_2 y H_2O y que están disponibles en ATM². Por defecto, se considera para $\kappa_\nu(H_2O+O_2)$ la parametrización descrita por Liebe en su versión de 1993 [53] (MPM-93). He aquí la forma de llamar a las otras posibilidades:

▷**LIEB** permite anular el modelo de Liebe si éste estaba considerado en ese momento del trabajo, o incluirlo si no lo estaba. Un mensaje en la pantalla nos dirá que es lo que se ha hecho.

▷**YEAR** (valor) permite elegir la versión de los modelos de Liebe que se va a utilizar (1993 [53], 1989 [51] o 1985 [50], MPM-93, 89 o 85) .

El programa contiene también modelos antiguos (anteriores a 1985, fecha de creación de la versión que ha sido utilizada en el radiotelescopio de 30 m del IRAM), que pueden usarse como comparación. Para llamarlos:

▷**V1** activa una versión que utiliza un perfil de línea Van Vleck-Weisskopf para el agua más un continuo empírico, y dos modelos diferentes para el O_2 , el primero de Rosenkranz [76] (por defecto) y el segundo de Reber, que se pueden elegir, respectivamente, con los siguientes comandos:

▷**ROSE**

1. Un comando muy específico se introdujo para tal fin: ▷**RAOB**, que permite abrir un nuevo fichero con atmósferas procedentes de radiosondeos (para los análisis presentados en las secciones 4.1 y 4.2 de ésta tesis).

2. Para los componentes minoritarios la modelización en ATM se basa en el trabajo presentado en el capítulo 2.

▷REBE

▷**V2** activa una versión que es equivalente a Liebe 85, pero que mediante el comando:

▷**REDU**, permite elegir la utilización sólo de un número reducido de líneas: para el agua aquellas que se encuentran a 22, 183 y 325 GHz, y para el O₂, la banda a 60 GHz y la transición aislada a 119 GHz. No se recomienda el uso ya que obviar la contribución de las alas de las líneas submilimétricas de H₂O y O₂ puede dar errores importantes sobre el continuo en la región milimétrica.

Eliminar o incluir los componentes minoritarios en los cálculos:

Nada más lanzar el programa todos están incluidos. Se puede ver cuales son los gases instalados en el programa utilizando el comando:

▷**READ** que lee los catalogos, nos dice cuales son las moléculas que existen en ellos, y ordena las transiciones según frecuencias crecientes. A éste comando puede seguirle:

▷**LINE** que nos muestra todas las líneas, con sus parámetros, existentes en el intervalo de frecuencias elegido. De esta forma **ATM** permite el acceso directo al catálogo de transiciones en él contenido.

Los comandos siguientes introducen o suprimen el componente menor considerado según su presencia o no en los cálculos. He aquí la lista de estos comandos:

▷**WISO** para las especies isotópicas del agua: H₂¹⁷O, H₂¹⁸O y HDO.

▷**O2IS** para las especies isotópicas del oxígeno molecular: ¹⁶O¹⁷O et ¹⁶O¹⁸O.

▷**O3** para el ozono (isótopo principal).

▷**O3IS** para las especies isotópicas del ozono: ¹⁶O¹⁶O¹⁷O, ¹⁶O¹⁶O¹⁸O, ¹⁶O¹⁷O¹⁶O et ¹⁶O¹⁸O¹⁶O.

▷**O2VB** para las líneas del primer estado vibracional excitado del oxígeno molecular.

▷**O3VB** para las líneas de los tres primeros estados vibracionalmente excitados del ozono (que poseen un nivel de energía comparable).

▷**MINO** para el resto de componentes minoritarios.

las atmósferas *U.S. Std. 62* no contienen información sobre la distribución vertical de ningún gas minoritario ni de H₂O. Los comandos que acabamos de describir

introducen por defecto unos perfiles experimentales obtenidos de [100] excepto para H₂O. Para éste se introduce un perfil en forma de decrecimiento exponencial hasta 15 km (ver ecuaciones A.1 y A.2), caracterizado por una escala de alturas (H₀) y un contenido integrado en columna de vapor de agua hasta 15 km de altura (W, expresado en mm); y, por encima de 15 km, se considera que la razón de mezcla en volumen es constante (r, expresada en partes por millón en volumen). ° Este tipo de perfil permite relacionar de forma simple los parámetros que lo describen. La cantidad de vapor de agua precipitable en mm que hay por encima de un lugar la obtendremos multiplicando la densidad de vapor de agua en gr/m³ en ese lugar por la escala de alturas en kilómetros. Así a nivel del mar:

$$W_0(mm) = \rho_0(gr/m^3) \cdot H_0(km) \quad (A.1)$$

y a una cierta altitud H, según éste modelo:

$$W(mm) = W_0(mm) \cdot exp(-H/H_0) \quad (A.2)$$

Los valores considerados por defecto para H₀, W y r son: 2 km, 1 mm et 2 ppm respectivamente. Estos valores se pueden cambiar con los comandos:

▷ **WLEN (nuevo valor)** (escala de alturas en km).

▷ **WH2O (nuevo valor)** (contenido integrado de vapor de agua en mm por encima de la altura elegida). Se puede calcular éste contenido integrado a partir de valores de la temperatura, presión y humedad relativa en las hipótesis sobre el perfil citadas anteriormente. Para introducir estos parámetros:

▷ **HUMR (valor en porcentaje)**

▷ **TEMP (°C)**

▷ **PRES (mb)**

▷ **PPMW (nuevo valor)** (razón de mezcla del vapor de agua por encima de 15 km, en ppmv).

°

Las atmósferas del catálogo *U.S. Std. 76* [92] contienen perfiles de H₂O que no serán realmente usados salvo que hagamos WH2O=0, que elimina la formulación descrita anteriormente. ° En general, muchas atmósferas que el usuario querrá entrar mediante el comando USER no tienen información sobre los componentes minoritarios, por ello todos son automáticamente eliminados de los cálculos cuando se

selecciona esta opción, y un mensaje en la pantalla nos informa de ello.

Fijar ciertos parámetros para la integración

En esta sección vamos a describir la manera de seleccionar y modificar algunos parámetros importantes para los cálculos:

▷ **AIRM (valor ≥ 1)** factor geométrico equivalente a $(1/\cos(\theta))$, donde θ es el ángulo zenital. Sirve para calcular la opacidad correcta a partir de la opacidad hacia el zénit en la aproximación plano-paralela (valor por defecto: 1).

▷ **FREQ (valor en GHz)** frecuencia en la banda señal para los cálculos orientados a los usuarios de radiotelescopios (ver apartado siguiente). El valor por defecto es 100 GHz.

▷ **RVIF (valor en GHz)**. Los cálculos monocromáticos en ATM se realizan a dos frecuencias realmente: la que se eligió con ▷ **FREQ**, y otra (llamada frecuencia imagen) determinada utilizando el comando RVIF. Según el caso (posición de la banda imagen respecto a la banda señal), ésta segunda frecuencia será: $FREQ+RVIF$ o $FREQ-RVIF$ (ver los dos comandos siguientes). Es útil, por ejemplo, para tener información sobre la señal esperada en un receptor de doble banda. El valor por defecto es 3.932 GHz, es decir, la frecuencia intermedia típica del radiotelescopio de 30 m del Instituto de Radioastronomía Milimétrica.

▷ **LSB** significa que la frecuencia elegida con **FREQ** pertenece a la banda inferior (en el caso de doble banda). Caso de haber entrado una frecuencia intermedia no nula con RVIF, la otra frecuencia será, entonces, $FREQ+RVIF$.

▷ **USB** significa, del mismo modo, que la frecuencia **FREQ** está sobre la banda superior mientras que el centro de la otra banda será $FREQ-RVIF$.

▷ **FRE1 (valor en GHz)** frecuencia inferior del intervalo para los cálculos espectros atmosféricos. El valor por defecto es 1 GHz.

▷ **FRE2 (valor en GHz)** frecuencia superior para los cálculos espectrales (defecto 300 GHz).

▷ **STMA (valor en GHz)** paso máximo en frecuencia para los cálculos del espectro atmosférico (defecto 1 GHz).

▷ **STMI (valor en GHz)** paso mínimo en frecuencia para los cálculos del espectro atmosférico. ATM utiliza un paso de integración variable en frecuencia entre los valores determinados con los dos últimos comandos según el comportamiento

de la derivada de la opacidad total respecto a la frecuencia. (pasos más pequeños cerca de las resonancias). El valor por defecto es $0.001\text{GHz}=1\text{MHz}$).

▷**TOFR (valor en GHz)** es la distancia máxima en frecuencia a la que consideraremos las líneas de los diferentes gases minoritarios para el cálculo del coeficiente de absorción a la frecuencia de trabajo, con el fin de no pasar cada vez por todas las líneas del catálogo. El valor por defecto es 10 GHz.

▷**ALTI (valor en km)** es la altitud para la que se quiere hacer el cálculo de T_B para observaciones desde tierra, o la altura del terreno en el caso de observaciones desde el espacio hacia la superficie. Se debe truncar la atmósfera de entrada a esta altitud (valor por defecto 2.9 km, altura a la que está situado el telescopio de 30 m del IRAM).

▷**HORI** selecciona un modo en que el cálculo de la opacidad se realiza para un trayecto horizontal de 1 km (P, T y las abundancias de los diferentes gases serán las correspondientes a la altura elegida con ALTI). Esto permite hacer cálculos de la opacidad por unidad de longitud a una cierta frecuencia para presión, temperatura y abundancia de los diferentes gases atmosféricos fijas.

Lanzar los cálculos

El programa puede hacer dos tipos de cálculos: monocromáticos (a una frecuencia dada) o espectrales ° (entre dos frecuencias). Las informaciones de salida del modelo son: temperatura de brillo, opacidad (total e individual para cada uno de los gases), transmisión atmosférica, etc... Para ver el estado de las opciones elegidas para los cálculos usamos:

▷**DEFA**

Para lanzar el primer tipo de cálculos (monocromáticos):

▷**COMP**

y para el segundo (espectro):

▷**SPEC**.

Los resultados salen directamente por pantalla, pero también se escriben en un fichero llamado **SKY.SPE**, que contiene un encabezamiento con los parámetros usados en el cálculo.³

3. El comando SPEC tiene un uso particular que permite analizar de forma automática los datos de radiosondeos para efectuar comparaciones con las medidas de sistemas sobre satélite como MSU,

Simulaciones de observaciones desde satélite

En el caso de radiación electromagnética que se propaga desde el espacio (donde la temperatura de brillo se puede suponer igual a la del fondo cósmico, si no se apunta a ninguna fuente específica) la transferencia radiativa a realizar es relativamente sencilla. Sin embargo, nuestro programa también pretende hacer cálculos de la temperatura de brillo recibida por un satélite que observa hacia la superficie terrestre, en cuyo caso la reflexión y absorción en ella debe ser tenida en cuenta. Para ángulos no muy elevados respecto al nódido, la aproximación plano-paralela es aceptable, aunque un tratamiento más general con capas esféricas va a ser necesario para otros casos (observación también desde satélite pero hacia el limbo atmosférico). Para trabajar en "modo satélite" que observa hacia la superficie terrestre, se debe entrar el comando siguiente:

▷**SATE** indica que se desea calcular T_B para el caso de propagación ascendente (satélite).

Los cálculos en esta opción tienen en cuenta la radiación que se propaga hacia el suelo y que, una vez reflejada por éste, sale de la atmósfera, así como la contribución de la parte emitida por la superficie misma (ver ecuación 4.1, desarrollada en el capítulo 4). Los valores de la emisividad de superficie (e_s), y por tanto del coeficiente de reflexión ($1-e_s$) cambian mucho según el tipo de superficie. Normalmente sobre los continentes estos parámetros son muy difíciles de conocer. Para la superficie de los océanos hay algunos modelos más o menos precisos. Como en el caso de toda superficie reflectora, los coeficientes de reflexión dependen realmente del estado de polarización (nosotros denominaremos polarización lineal H a aquella que es perpendicular al plano que contiene la trayectoria del rayo, y V la que es

SSM/T1 y SSM/T2 (véanse las secciones 4.1 y 4.2). Esto es una adaptación de ATM a un uso muy específico y, por tanto, no lo incluyo como parte de la descripción general del programa. ATM guarda las características de los canales MSU, SSM/T1 y SSM/T2 de forma que si seleccionamos las opciones: ▷**MSU**, ▷**SMT1** o ▷**SMT2** los cálculos, cada vez que hagamos ▷ **SPEC**, se harán para el intervalo de frecuencias (y para todas las bandas) de cada canal (sucesivamente) del instrumento elegido. Unos ficheros de resultados especiales (MSU.DAT, SSMT1.DAT et SSMT2.DAT) serán creados donde se escribirá la temperatura de brillo media correspondiente a cada canal para cada radiosondeo (será necesario trabajar en modo SATE, véase el párrafo siguiente). Además, si previamente hemos seleccionado la opción ▷**FASC**, se creará un fichero con el radiosondeo y los canales del instrumento bajo el formato de entrada para el programa FASCOD, que permitirá realizar rápidamente intercomparaciones con dicho programa. Esto es la base de los análisis presentados en el capítulo 4.

perpendicular a H y a la dirección de propagación). En ATM se puede elegir un tratamiento escalar (superficie lambertziana), para el que es suficiente entrar una emisividad y una temperatura de superficie con los comandos:

▷**SFEM** ($0 \leq \text{valor} \leq 1$) es la emisividad (escalar) de la superficie de la Tierra. Este valor se necesita para calcular la parte reflejada y emitida por dicha superficie.

▷**TSFC** (valor en grados K) es la temperatura física de la superficie de la Tierra, necesaria igualmente para determinar la parte emitida.

Existe, la posibilidad de utilizar, en el caso de superficie marina, el modelo desarrollado en el Departamento de Radioastronomía Milimétrica (DEMIRM) del observatorio de París (*Guillou et al.*, 1996 [35]). Para activarlo hay que hacer:

▷**MSEA**

Dicho modelo utiliza como parámetros la velocidad del viento en superficie y la temperatura de la superficie marina, que pueden introducirse con la ayuda de los siguientes comandos:

▷**WIND** (valor en m/s)

▷**TSEA** (valor en K)

Los cálculos utilizando el modelo DEMIRM de emisividad de la superficie marina solamente son posibles en modo COMP y nos dan las temperaturas de brillo en polarización H y V para el punto de vista de un satélite.

Se debe sustituir la geometría plano-paralela por la geometría esférica, para observaciones desde satélite al limbo atmosférico (véase el capítulo 5, dedicado a sondeos hacia el limbo atmosférico). De forma general, para elegir esta opción, hay que hacer:

▷**LIMB** que puede seguirse o ser precedido de:

▷**SATH** (valor en km) para fijar la altitud a la que se encuentra el satélite.

▷**NADR** (valor en grados) para el ángulo de observación respecto al nádir.

° En el caso de sondeo al limbo el programa nos muestra en la pantalla el valor del punto de tangencia (en primera aproximación la Tierra se supone esférica). Si los parámetros de entrada dan como resultado un punto de tangencia realista (altura positiva), el programa pasa a hacer los cálculos. En esta opción ATM trabaja con atmósferas del catálogo *U.S. Std. 1976* [92].

Cálculo de funciones de peso y de sondeo

Una observación a una determinada frecuencia da como resultado una temperatura de antena que, una vez conocidos los parámetros técnicos del sistema de observación utilizado, puede ser convertida a temperatura de brillo. Esta información puede ser usada para la estimación de parámetros físicos en la región en la que la radiación detectada se ha formado. Cuando la frecuencia de observación está próxima a una resonancia de oxígeno molecular, esta información puede usarse para el cálculo de la temperatura física. Cuando se observa en las proximidades de una línea de H_2O , O_3 u otro gas atmosférico minoritario, la temperatura de brillo medida puede usarse para calcular la concentración del gas en diferentes capas. La información sobre el parámetro físico que se busca está contenida en la temperatura de brillo pero convolucionada con lo que genéricamente se conoce como **función de peso**. Esta función nos da idea de la zona de la atmósfera de la que se está obteniendo información para cada frecuencia de observación. En el programa ATM hemos incorporado el cálculo de estas funciones peso como ayuda a la hora del análisis de datos reales. Por un lado distinguimos las funciones peso en temperatura ligadas a la observación desde satélite de resonancias de O_2 (capítulos 4 y 5); y por otro las funciones peso sobre las abundancias de gases minoritarios (capítulo 3). °

Cálculo de las funciones de peso en temperatura

Aquí vamos a dar la información correspondiente a la utilización de ATM para calcular las funciones de peso en temperatura. Los cálculos a efectuar deben corresponder al "modo satélite" (comando **SATE**). Una vez hecho esto:

▷ **WMON**, permite activar un fichero de salida (**WEIG_MON.DAT**) que nos dará una función de peso monocromática al realizar un cálculo con **COMP** a la frecuencia que se eligió con ▷ **FREQ**.

▷ **WEIG**, activa el fichero de salida: (**WEIGHT.DAT**) que da la función peso en temperatura de un canal de observación. Las características de dicho canal se fijan mediante los siguientes comandos:

▷ **FREQ** (valor en **GHz**) comando ya descrito el cual, bajo la opción **WEIG**, fija la frecuencia central del canal.

▷ **RVIF** (**GHz**) frecuencia intermedia del canal, el cual tiene dos bandas centradas en $\text{FREQ} + \text{RVIF}$ y $\text{FREQ} - \text{RVIF}$.

▷ **RV12 (GHz)** una segunda frecuencia intermedia para el canal. Si esta se fija a un valor distinto de cero, dicho canal tendrá cuatro bandas a las frecuencias centrales siguientes: $FREQ+RVIF+RV12$, $FREQ+RVIF-RV12$, $FREQ-RVIF+RV12$, $FREQ-RVIF-RV12$.

▷ **WIDT (GHz)** es la semianchura de cada una de las bandas que componen el canal (1, 2 o 4 según el caso).

Las frecuencias seleccionadas por **FREQ** para los cálculos de las funciones de peso en temperatura sólo pueden encontrarse en un intervalo que cubre la banda de O_2 en torno a 60 GHz y otro para la línea aislada de la misma molécula a 119 GHz. En caso contrario, tendremos un mensaje en pantalla.

Cálculos de funciones de sondeo

Esto es muy útil para ayudar al análisis de las observaciones espectroscópicas de vapor de agua o gases minoritarios (programa de inversión). Los detalles se encuentran en los apartados 2.4.1, 3.2 y 3.3 de esta tesis.

▷ **KERN (valor entero)** indica que queremos calcular una función de sondeo. El valor entrado indica el número de frecuencias individuales, en la banda del espectrómetro, que vamos a utilizar en el cálculo.

▷ **MOLE (valor entero)** se usa para indicar la molécula cuya abundancia vertical se quiere sondear (1: H_2O , 2: O_3 ,...).

▷ **AVKE (valor entero)** para indicar el número de funciones de sondeo que queremos calcular. Una función de sondeo queda caracterizada por las funciones de peso individuales de donde ella se deriva, pero también por la altura donde pretendemos centrarla y por un multiplicador de Lagrange descrito más abajo. Los dos comandos siguientes se deben utilizar tantas veces como se haya indicado con AVKE (parámetros necesarios para el cálculo de cada función de sondeo).

▷ **SCAN (altura en kilómetros)** para indicar la altura a la que se quiere centrar la función de sondeo.

▷ **TRAD (valor del orden de la inversa de la densidad típica del gas bajo estudio (en m^3) a la altitud de sondeo)** es un multiplicador de Lagrange que va ponderar la resolución vertical y el error asociado al ruido de los espectros (ver tablas 3.3 y 3.6).

Una vez fijados todos estos parámetros hay que seleccionar con **FREQ** unas frecuencias entre $\nu_c + \delta\nu$ y $\nu_c - \delta\nu$ ($\delta\nu$: resolución espectral, $\Delta\nu$: semianchura del espectrómetro si la línea observada está centrada) y se hace un cálculo con **COMP**. A cada iteración se calcula la función peso monocromática que corresponde a la frecuencia elegida. Esta se escribe en un fichero **WEIG_MON.DAT**. Se repite lo mismo para n frecuencias bien distribuidas sobre la banda total (siendo n el valor entero entrado con **KERN**). El programa toma entonces el conjunto de funciones de peso monocromáticas para calcular la función de sondeo correspondiente (véanse ejemplos en las figuras 3.14 et 3.17). El resultado se escribe en un fichero (**AVKER.DAT**) con una estimación del error asociado al r.m.s. de los espectros.

Simulaciones del efecto Zeeman sobre el oxígeno

Para trabajar con ésta parte del programa:

° ▷**MAGN** para introducir el efecto Zeeman en los cálculos. Si no se activa primero éste comando, los que siguen no son reconocidos.

▷**MAGH** (**valor en km**) altitud del origen del rayo que se propaga hasta su salida de la atmósfera o hasta su llegada al suelo (en los dos casos los cálculos se paran).

▷**LATI** (**valor en grados**) latitud de la vertical del punto de origen del rayo descrito anteriormente.

▷**LONG** (**valor en grados**) longitud de la vertical del punto de origen del rayo.

▷**AZIM** (**valor en grados**) azimut de la dirección de propagación del rayo (0=Norte).

▷**ELEV** (**valor en grados**) elevación de la dirección de propagación del rayo en su punto de origen, respecto al horizonte local (90°=zénit).

▷**NNUM** (**valor entero**) número cuántico característico de la resonancia alrededor de la cual vamos a hacer los cálculos. Las líneas del espectro de spín-rotación se identifican por su momento angular orbital total N que no cambia para las líneas de la banda alrededor de 60 GHz y la línea aislada a 119 GHz, y por un signo + o - que indica si el numero rotacional J pasa a J+1 o a J-1 en la transición correspondiente (considerada en emisión). Para seleccionar, por ejemplo, la línea 5+ debemos hacer:

"NNUM 5", y para 7-: "NNUM -7".

▷**SNUM (valor)** es un comando similar al que se acaba de describir pero para las líneas submilimétricas y las especies isotópicas de oxígeno molecular (la lista de posibilidades se da directamente en pantalla haciendo ▷**SNUM 0**).

▷**DEVF (valor en MHz)**. Diferencia en frecuencia respecto al centro de la línea elegida para los cálculos.

▷**STEM (valor en MHz)** paso de integración en frecuencias para calcular el espectro.

▷**REMB** elimina el campo geomagnético de los cálculos (o lo incluye si había sido eliminado).

▷**WRIW** apertura de un fichero (**WEIG_MAG.DAT**) donde se escribirá la matriz de función peso monocromática correspondiente a la frecuencia de cálculo (definición en la ecuación 3.19).

▷**CIRC** cambia la base de polarizaciones en la que se escribirán las matrices T_B y las funciones peso de (LH=lineal horizontal, LV=lineal vertical) a (CD=circular a derechas, CI=circular a izquierdas).

▷**DEFM** nos permite ver cual es el estado actual de los parámetros en la simulación del efecto Zeeman.

▷**PPG1** lanza los cálculos monocromáticos a la frecuencia central de la línea elegida con NNUM más la desviación introducida mediante DEVF.

▷**PPGF** lanza los cálculos del espectro en un intervalo (-DEVF,+DEVF) alrededor del centro de la línea NNUM con un paso STEM. Las matrices T_B se escriben en un fichero llamado (**TB_MAG.DAT**) en la base de polarizaciones elegida.

▷**BEFO** después de un cálculo con PPG1 o PPGF, nos permite recuperar todos los parámetros con los valores que tenían antes del último cálculo.

Como uno de los objetivos del trabajo futuro está previsto simular directamente el efecto Zeeman en los cálculos con **SPEC** sin que ATM se vea obligado a hacer esto separadamente como acabamos de ver. La idea sería escribir en **SKY.SPE** tan sólo los elementos (1,1) de T_B y la opacidad para la base de polarizaciones elegida.

Otros comandos

▷**HELP** aporta ayuda directa sobre el uso de los comandos (reducida por el

momento).

▷**ATMO** activa un fichero de salida (**ATMO_USED.DAT**) en el que se escribirá el perfil atmosférico utilizado en los cálculos (cada vez que se lanza ▷**COMP**).

▷**NSKY** permite suprimir la creación del fichero de resultados **SKY.SPE** para los cálculos con **SPEC**.

▷**PRTB** crea un fichero llamado **PROFIL-TB.DAT** en el que se escribirá la temperatura de brillo obtenida en la transferencia radiativa al final de cada una de las capas utilizadas, como resultado de la transferencia radiativa. También da la opacidad en cada capa y la opacidad acumulada hasta el final de cada capa. Funciona en modo **COMP** y **SPEC**).

° ▷**NPDB** cambia las unidades de la opacidad de neper a dB, o viceversa según la que está siendo utilizada.

▷**INFO** activa la salida de informaciones en pantalla sobre el desarrollo de los cálculos.

▷**REIN** Para reinicializar ATM.

▷**EXIT** para salir de ATM.

Ficheros de comandos

Para facilitar la utilización del programa, existe la posibilidad de lanzar los cálculos con ayuda de ficheros de comandos. Tenemos dos posibilidades:

▷**@** lee y ejecuta el fichero de comandos por defecto, denominado **input.atm**, que debe existir en un directorio especial (a ver en el momento de la instalación de ATM).

▷**@@** pide primero un nombre de fichero de comandos a ejecutar. Esto permite utilizar rápidamente diferentes ficheros existentes en el directorio especial sin tener que renombrarlos a **input.atm**.

Bucles

En algunas ocasiones se desean realizar cálculos en los que se hace un uso repetitivo de ciertos comandos. Para facilitar el trabajo, ATM permite crear bucles de instrucciones de la siguiente forma:

▷**LOOP** (**valor entero**) para comenzar el bucle, el cual se realizará el número de veces indicado.

...**commandes ATM**...

▷**ENDL** para cerrar el bucle.

Apéndice B

Utilización del programa de inversión

Los comandos del programa de inversión tienen el mismo formato que los de ATM.

Los que siguen hacen referencia a parámetros que figuran en la ecuación (2.4):

▷**ETAV** (valor entre 0 y 1) fija el parámetro η_f .

▷**TSPI** (valor en K) fija T_{env} .

▷**GSIG** (valor entre 0 et 1) fija G_S y $G_I=1-G_S$.

Information a priori

Los perfiles atmosféricos que se pueden introducir como a priori para la inversión son, por el momento, los del catálogo U.S. Atm. 76 (véase el cuadro 2.15), salvo para el vapor de agua cuyo perfil se introduce mediante tres parámetros como se hacía con ATM mediante los comandos ▷**WH2O**, ▷**WLEN** y ▷**AH2O**. Para elegir el tipo de atmósfera:

▷**ATMO** (número entre 1 y 6)

Geometría

En lo que toca al sondeo al limbo, conservamos, respecto a ATM, los comandos ▷**LIMB**, ▷**NADR** y ▷**SATH**. Para las observaciones desde tierra, tenemos ▷**AIRM** y ▷**ALTI**. Algunas informaciones más detalladas, como la latitud, lon-

gitud y azimut de la observación se introducen también como en ATM: ▷**LATI**, ▷**LONG** y ▷**AZIM** (la elevación de la observación se calcula a partir del valor entrado con ▷**NADR**)

◦

Comandos muy específicos

▷**BFRE** indica al programa de inversión que en el caso de líneas de O₂ a ±4 GHz de la resonancia, la intensidad del campo magnético en el conjunto de capas elegidas será controlado por un parámetro libre para mejorar el ajuste (véase la discusión dada en la sección 5.2.3).

▷**RFRE** (valor en MHz) sirve para indicar la resolución espectral de los datos. Se aconseja utilizar éste comando ya por diferentes motivos los datos no están siempre uniformemente separados en frecuencia (muchas veces a causa de los formatos)

▷**RESU**. En el caso de una inversión de datos como la descrita en la sección 5.2.3, éste comando sirve para pedir al programa la creación de un fichero de resultados (véase más abajo) una vez que el ajuste de los datos siguientes ha terminado.

▷**ADD_** (valor en km) sirve para añadir una capa del espesor indicado para el ajuste del espectro siguiente (en el método de las capas de cebolla).

▷**UNIQ** indica al programa que se pretende utilizar un único parámetro multiplicativo para cada variable en cada una de las capas libres.

▷**WIND** hace que el programa lea un fichero (**WINDOWS.DAT**) donde se encuentran unos números de canal que indican las ventanas que no se deben considerar en el ajuste.

▷**CIRC** indica que la base de polarizaciones es [circular a derechas, circular a izquierdas] para los espectros del oxígeno en caso que sea necesario tener en cuenta el efecto Zeeman. Si no se indica nada, la base es [lineal horizontal, lineal vertical].

▷**POLR** (1 o 2) indica cual es la polarización observada (1: lineal horizontal o circular a derechas, 2: lineal vertical o circular a izquierdas)

▷**INVE** para lanzar los cálculos. Tras éste comando el programa pregunta el nombre de un fichero de datos. Éste fichero se debe estructurar en columnas. La primera debe contener las frecuencias (en la banda señal), y la segunda las temperaturas de antena medidas. Pueden existir otras columnas pero no se leerán.

▷**SHEL** se usa para leer la división en capas de la atmósfera y las capas donde las abundancias del gas correspondiente serán ajustadas. Dichas capas se introducirán mediante un fichero llamado **SHELLS.DAT** con dos columnas: la extensión vertical de la capa en km y un código para indicar si los parámetros (T, P o abundancia de un gas) serán o no libres de variar para esa capa durante el proceso de inversión del espectro. Para colocar esas capas se considera que la altura inicial es la fijada por el comando **ALTI** en el caso de observaciones desde Tierra, desde un avión o desde un globo, hacia el espacio; o bien la posición calculada del punto de tangencia si se trata de sondeos al limbo desde un satélite.

Si los cálculos convergen (siempre puede haber problemas a causa de un mal parámetro de entrada, de una mala elección de capas, de un espectro con demasiado ruido, etc...) se crearán dos ficheros de salida:

- **PERFIL.INV** que contiene los parámetros calculados en las capas elegidas.
- **AJUSTE.INV** que contiene el espectro observado y el ajuste realizado por el algoritmo de inversión.

Apéndice C

Rutinas atmosféricas para CLASS

Ésta parte es fácil de usar y muy útil ya que generalmente los usuarios de CLASS no están familiarizados con la transferencia radiativa atmosférica. Los comandos de base son:

```
(lenguaje ANALYSE) TELLURIC [/NOPLOT] [/DETAIL] [/SSB] [/WINDOW]
[/NEW] [/ZEEMAN]
```

TELLURIC identifica las líneas atmosféricas que se encuentran en la banda de frecuencias del espectro e intenta hacer un ajuste de éste. Por supuesto, no se consideran en éste ajuste los intervalos de frecuencia indicados con ayuda de SET MASK o SET WINDOW (consultar el manual de CLASS sobre éste punto). Todas las opciones, con excepción de /NEW, se pueden modificar con ayuda de SET TELLURIC.

/NOPLOT : TELLURIC hará un dibujo del ajuste obtenido salvo si utilizamos ésta opción.

/DETAIL : permite obtener informaciones sobre los cálculos intermedios realizados con ATM durante el ajuste.

/SSB: Si el espectro a ajustar ya fue corregido para tener en cuenta una temperatura de sistema en simple banda, debemos usar ésta opción.

/WINDOW : utiliza las zonas definidas por SET WINDOW en lugar de las definidas por SET MASK en el momento de eliminar una parte del espectro en el ajuste.

/NEW : TELLURIC intenta no recalcular ciertos parámetros que no cambian de un ajuste para el otro. Se debe utilizar ésta opción para indicar recalcular todo

después de, por ejemplo, eliminar una línea mediante SET MASK o SET WINDOW, o al haber hecho otros cambios importantes.

/ZEEMAN: Está previsto tener en cuenta el efecto Zeeman para el ajuste de líneas atmosféricas de O₂. Ésta opción todavía no está preparada.

Una vez que el ajuste se realizó, la opción RESIDUAL/TELLURIC permite de sustraer el ajuste de la contribución atmosférica a la observación. Las opacidades atmosféricas calculadas se guardan en un vector, lo que permite corregir la señal de la fuente astrofísica al utilizar:

(Lenguaje LAS) CALIBRATE/TELLURIC [TAU] [SSB|DSB] [RF|IM] [ITR|RTI]
CALIBRATE/TELLURIC sin opciones multiplica el espectro por:

$$e^{\tau_i} \cdot \frac{1}{\eta_l} \cdot \left(1 + \frac{G_I}{G_S}\right) \quad (\text{C.1})$$

La opacidad atmosférica es aquella calculada por ATM en cada canal (cálculo realizado anteriormente con TELLURIC). Se hace una división por η_l para corregir el efecto del acoplo al cielo, y se multiplica por $(1 + \frac{G_I}{G_S})$ con el objetivo de expresar el resultado como si se tratase de un sistema simple banda (el factor vale 1 si $G_I=0$).

Options:

SSB|DSB: si se selecciona SSB (opción por defecto), se usará el factor $(1 + \frac{G_I}{G_S})$. En caso contrario se sustituye por 1.

RF|IM: utiliza τ_i (banda señal) o τ_i (banda imagen) para la calibración.

ITR|RTI: "Image-To-RF and RF-To-Image". Multiplica el espectro por

$$\exp(\tau_i(A) - \tau_i(B)) \quad (\text{C.2})$$

donde A y B representan la banda señal o la imagen. Esto permite calibrar las líneas presentes en cada banda sin tener que analizar el espectro una segunda vez. Por tanto, ésta opción es incompatible con el resto.

(Lenguaje ANALYSE)TAU GET|PUT

(lenguaje ANALYSE)TAU PLOT|SPEC [RF|IM]

TAU GET|PUT permite escribir $\tau(\nu)$ bajo el formato de un fichero CLASS (una gran parte de las informaciones de la cabecera de ese fichero no se deben tener en cuenta, otras son significativas como la frecuencia, la velocidad y las opacidades

para cada canal. Las opacidades en la banda señal se escriben en la primera mitad del vector, mientras que las de la banda imagen pasan a la segunda mitad del mismo vector (véase la figura 5.2). Para transferir ese vector de opacidades a la memoria R, hay que utilizar la opción PUT; para recuperarlo desde R usaremos GET. Esta transferencia no es necesaria para visualizar $\tau(\nu)$: es suficiente con usar TAU PLOT y TAU SPEC con las opciones RF o IM (usar las unidades de velocidad sobre el eje X).

Bibliografía

- [1] Aerojet ElectroSystems Company "AMSU-A Design Study", Rapport 7049, Julio 1980.
- [2] Andreev A. *et al*, *J. Mol. Spectrosc.* 62, 125-148 (1976).
- [3] Askne, J.I.H. y B. Göran Skoog, *IEEE Trans. on Geoscience and Remote Sensing*, GE-21, N. 3, 320-323, (1983).
- [4] Backus, G. y F. Gilbert, *Philos. Trans. R. Soc. London*, 266, 123-192 (1970).
- [5] Barraclough, D.R., "International Geomagnetic Reference Field revision 1985", *Pure and Appl. Geophys.*, 123, 641-645 (1985).
- [6] Bauer, A. *et al*, *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer*, Vol. 37, N. 6, pp. 531-539 (1987).
- [7] Bauer, A. *et al*, *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer*, Vol. 41, N. 1, pp. 49-54 (1989).
- [8] Bauer, A. *et al*, *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer*, Vol. 50, N. 5, pp. 463-475 (1993).
- [9] Bergman, P., *School of electrical and computer engineering, Chalmers Univ. of Tech. (Göteborg, Suecia)* Informe Interno Num. 227, (1992).
- [10] Bevilacqua, R.M. y J.J. Olivero, *J. Geoph. Res.*, 93, N. D8, pp. 9463-9475 (1988).
- [11] Bevilacqua R.M. *et al*, *J. Geophys. Res.*, 95, 883-893, (1990).
- [12] Bommarito, J., *SPIE proc. "Microwave instrumentation for remote sensing of the Earth"*, Vol. 1935, 231-239 (Florida, Abril 1993).

- [13] Born, M., y E. Wolf, *“Principles of Optics”, 2ème edition, Pergamon Press, Londres, (1964).*
- [14] Bouazza, S. *et al, J. Mol. Spectrosc.* 157, 271-289 (1993)
- [15] Brillet, J., *J. Geophys. Res. (D)*, 94, 12833-12850 (1989).
- [16] Castets, A. *et al, Astron. and Astroph.*, 194, 340 (1988).
- [17] Cernicharo, J., *Informe interno del IRAM*, (1985).
- [18] Cernicharo, J., *Tesis de doctorado de estado, Universidad de París VII*, (1988).
- [19] Cernicharo, J. *et al, Astron. Astrophys.*, 231, L15-L18, (1990).
- [20] Clough S.A. *et al, Atmospheric Research*, 23, 229-241, (1989) .
- [21] Connor, B.J. *et al, J. Mol. Spectrosc.* 117, 15-29, (1986).
- [22] Connor, B.J. *et al, J. Geophys. Res.* 92, 13221-13230, (1987).
- [23] Crutzen, P.J. y P.H. Zimmermann, *Tellus*, 43AB, 136-151, (1991).
- [24] Depannemaecker J.C. y J. Bellet, *J. Mol. Spectrosc.*, 66, 106-120, (1977).
- [25] English S.J. *et al*, “Observations of water vapor absorption using airborne microwave radiometers at 23.8, 50.3, 89 and 157 GHz” *IGARSS’95*, (1995)
- [26] Fishbein E.F. *et al, J. Geophys. Res. (D)*, 101, D6, 9983-10016, (1996).
- [27] Flaud J.M. *et al, J. Mol. Spectrosc.* 124, 209-217, (1987).
- [28] Fleming H.R. *et al, IEEE Transaction on Geoscience and Remote Sensing*, 29, N. 4, 571-583, (1991).
- [29] Froidevaux, L. *et al, J. Geophys. Res. (D)*, (1996).
- [30] Gamache, R.R. *et al, J. Mol. Spectrosc.* 128, 283-299 et 360-369 (1985).
- [31] Gamache, R.R. *et al, J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer*, Vol. 52, N. 3/4, 481-499, (1994).
- [32] Gautier, D. y A. Robert, *Ann. Geophys* 20, 480, (1964).
- [33] Godon, M. *et al, J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer*, Vol. 47, 275 (1992).

- [34] Gordy, W. y R.L. Cook, "Microwave Molecular Spectra", Jhon Wiley and Sons (ed.), (1984).
- [35] Guillou, C. et al, *J. Geophys. Res. (C)*, 101, 3775-3788, (1996).
- [36] Hartmann, G.K. et al, "Zeeman splitting in the 61 GHz (9+) O₂ line in the mesosphere". Aceptado en *J. Geophys. Res.*, (1996).
- [37] Helminger, P.A. et al, *J. Mol. Spectrosc.* 111, 66-72, (1985).
- [38] Hollinger, J.P., "Special Sensor Microwave/Imager user's guide", Naval Research Laboratory, USA, (1987).
- [39] Herzberg, G., "Spectra of Diatomic Molecules", Van Nostrand Reinhold Company, (1950).
- [40] 1992 HITRAN Data Base. *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer.*, Vol. 48, 469-507 (1992).
- [41] Houghton, J.T. "The physics of the atmospheres", Cambridge University Press. (1986).
- [42] Kaplan, L.D., *J. Opt. Soc. Am.*, 49, 1004, (1959).
- [43] Karcher, F., "Détermination des profils atmosphériques de référence pour la mesure de constituants par spectrométrie d'absorption". Nota interna del CNRM-Météo-France. (Enero 1990).
- [44] Kawabata, K. et al, Informe técnico interno de la Universidad de Nagoya. (1995).
- [45] Lane, W.C. et al, *J. Mol. Spectrosc.*, 111, 320-326, (1985).
- [46] Lean, J.L. et al, *J. Geophys. Res.*, 87, 4973-4980, (1982).
- [47] Lefèvre, F. Modelo REPROBUS, Météo-France (Toulouse), comunicación personal, (1995).
- [48] Lenoir, W.B., *J. App. Phys.*, Vol. 38, N. 13, 5283-5290, (1967).
- [49] Lenoir, W.B., *J. Geophys. Res.*, 73, 361-376, (1968).
- [50] Liebe, H.J., *Radio Sci.*, 20, 1069, (1985).

- [51] Liebe, H.J., *Int. Journal of Infrared and Millimeter waves.*, Vol. 10, 631-650, (1989).
- [52] Liebe, H.J. *et al*, *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer*, 48, N5/6, 629-642, (1992).
- [53] Liebe, H.J. *et al*, *AGARD 52nd Meeting (Palma de Mallorca, España)*, (1993).
- [54] Lobsiger, E. *et al*, *J. Atmos. Terr. Phys.*, 48, 1153-1158, (1986).
- [55] Manney, G.L. *et al*, *J. Geophys. Res (D)*, 100, 2953-2972, (1995).
- [56] Melnick, G.J. *et al*, *Astrophys. Journal*, 416, L37, (1993).
- [57] Menten, K.M. *et al*, *Astrophys. Journal*, 450, L67, (1995).
- [58] Millet, J.C., *Tesis de doctorado, Univ. París VII*, (1984).
- [59] Mizushima, M. *et al*, *J. Mol. Spectrosc.*, 100, 303-315, (1983).
- [60] Monnanteuil, N. *et al*, *J. Mol. Spectrosc.*, 71, 399-413, (1978).
- [61] Monnanteuil, N. *et al*, *J. Mol. Spectrosc.*, 134, 176-182, (1989).
- [62] Nicolet, M., "*Etude des réactions chimiques de l'ozone dans la stratosphere*", *COVOS*, (1977).
- [63] Olivero, J.J., *et al*, *Geoph. Res. Lett.*, 13, N. 3, 197-200, (1986).
- [64] Pardo, J.R. *et al*, "Evidence of the Zeeman Splitting in the $2_1 \rightarrow 0_1$ Rotational Transition of the atmospheric $^{16}\text{O}^{18}\text{O}$ Molecule from Ground-Based Measurements", *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer*, 54, N6, 931, (1995).
- [65] Pardo, J.R. *et al*, "Ground-Based Measurements of Middle Atmospheric Water Vapor at 183 GHz", aceptado en el *Journal of Geophysical Research (D)*, (1996).
- [66] Pardo, J.R. *et al*, "Inversion of Ground-Based Microwave Spectroscopic Observations of Minor Atmospheric Gases: Application to 7 Strong Ozone Rotational Resonances from 142 to 359 GHz", remitido a *Annales Geophysicae*, (1996).
- [67] Pardo, J.R. *et al*, "Comparison of direct radiative transfer models in the 60 GHz O_2 band with SSM/T-1 and MSU observations ", *Conferencia TOVS en Nueva Zelanda*, (1995).

- [68] Peter, R., y K. Künzi, *Geoph. Res. Lett.*, 15, N. 11, 1173-1176, (1988).
- [69] Prather, M.J., "Journal of Geophysical Research, Vol 86, N. C6, 5325-5338, (1981).
- [70] Read, W. G. *et al*, *Geophys Res. Lett.*, 20, 1299, (1993).
- [71] Ricaud, P. *et al*, *Journal of Geophysical Research*, Vol. 96, N. D10, 18, 617-629, (1991).
- [72] Ricaud, P. *et al*, *Annales Geophysicae*, 12, 664-673, (1994).
- [73] Ricaud, P. *et al*, *Aceptado en el Journal of Geophysical Research-Atmospheres*, (1996).
- [74] Rinsland, C.P. *et al*, *J. Mol. Spectrosc.*, 149, 474-480, (1991).
- [75] Rodgers, C.D., *Reviews of Geophysics and Space Physics*, 14, N. 4, 609-624, (1976).
- [76] Rosenkranz, P.W., *IEEE Trans. Antenna Propagation*, 23, 498-506, (1975).
- [77] Rosenkranz, P.W., *J. Quant. Spect. Radiat. Transfer*, 39, N. 4, 287-297, (1988).
- [78] Rosenkranz P.W., *Capítulo 2 en "Atmospheric Remote Sensing By Microwave Radiometry"*, M.A. Janssen, (ed.), *Wiley-Interscience, N.Y.*, (1993).
- [79] P.W. Rosenkranz y D.H. Stealin, *Radio Sci.*, 23, N. 5, 721-729, (1988).
- [80] Russell, J.M., *Adv. Space Res.*, 7, N. 9, 5-18, (1987).
- [81] Schaerer, G., y T. T. Wilheit, *Radio Sci.*, 14, 371, (1979).
- [82] Schnapf, A. (ed.), "The TIROS Meteorological Satellites, twenty five years: 1960-1985, in Monitoring Earth's Ocean, Land and Atmosphere from Space - Sensors, Systems and Applications", *Progress in Astronautics and Aeronautics*, 97, 51-70, (1985).
- [83] Solomon, S. *et al*, *Nature (London)*, 321, 755-758, (1986).
- [84] Tabart, C., *Tesis de doctorado, Univ. París VI*, (1991).
- [85] Le Texier, H. *et al*, *Q. J. R. Meteorol. Soc.*, 114, 281-295, (1988).

- [86] Tinkham, M. y W.P. Strandberg, *Phys. Rev.*, Vol. 97, N. 4, 937-951, (1955).
- [87] Tinkham, M. y W.P. Strandberg, *Phys. Rev.*, Vol 97, N. 4, 951-966, (1955).
- [88] Tsou, J.J. *et al*, *J. Geoph. Res.*, 93, D5, 5255-5266, (1988).
- [89] Tsou, J.J., *et al*, *J. Geophys. Res. (D)*, 100, 3005-1016, (1995).
- [90] Ulaby, F.T., Moore, R.K., y A.K. Fung, "*Microwave Remote Sensing*" Vols. I, III, *Artech House inc.*, (1986).
- [91] "*U.S. Standar Atmosphere*", *U.S. Printing Office, Washington, D.C.*, (1962).
- [92] "*U.S. Committee On Extension to the Stnd. Atm.*", *U.S. Printing Office, Washington, D.C.*, (1976).
- [93] Vaughan, G., *Q. J. R. Meteorol. Soc.*, 110, 239-260, (1984).
- [94] Waters, J.W. *Tesis de doctorado, MIT*, (1970).
- [95] Waters, J.W. "*Limb Sounding*" en "*Atmospheric Remote Sensing By Microwave Radiometry*" (M.A. Janssen, ed.), *Wiley-Interscience, N.Y.*, (1993).
- [96] Waters, J.W. *et al*, *J. Geophys. Res. (D)*, 1996.
- [97] Watson, J.K.G., *J. Chem. Phys.*, Vol. 46, N. 5, 1935-1949, (1967).
- [98] Werbowetzki, A. (ed.), "*Atmospheric Sounding User's Guide*", *NOAA, U.S. Dept. of Commerce, Washington D.C.*, (1981).
- [99] Zommerfelds, W.C. *et al*, "*J. Geophys. Res.*", 94, 12819-12832, (1989).
- [100] Zuev, V.E. y V.S Komarov, "*Statistical Models of the Temperature and Gaseous Components of the Atmosphere*", *D. Reidel Publishing Comp.*, (1987).