

Forschungszentrum Karlsruhe

Technik und Umwelt

Wissenschaftliche Berichte

FZKA 6411

Phasenkorrektur und Radiometrie gekühlter
Fourierspektrometer:
Charakterisierung des Instrumentes MIPAS-B2

Olaf Trieschmann

Institut für Meteorologie
und Klimaforschung

von der Fakultät für Physik der
Universität Karlsruhe (TH)
genehmigte Dissertation

Forschungszentrum Karlsruhe GmbH, Karlsruhe
2000

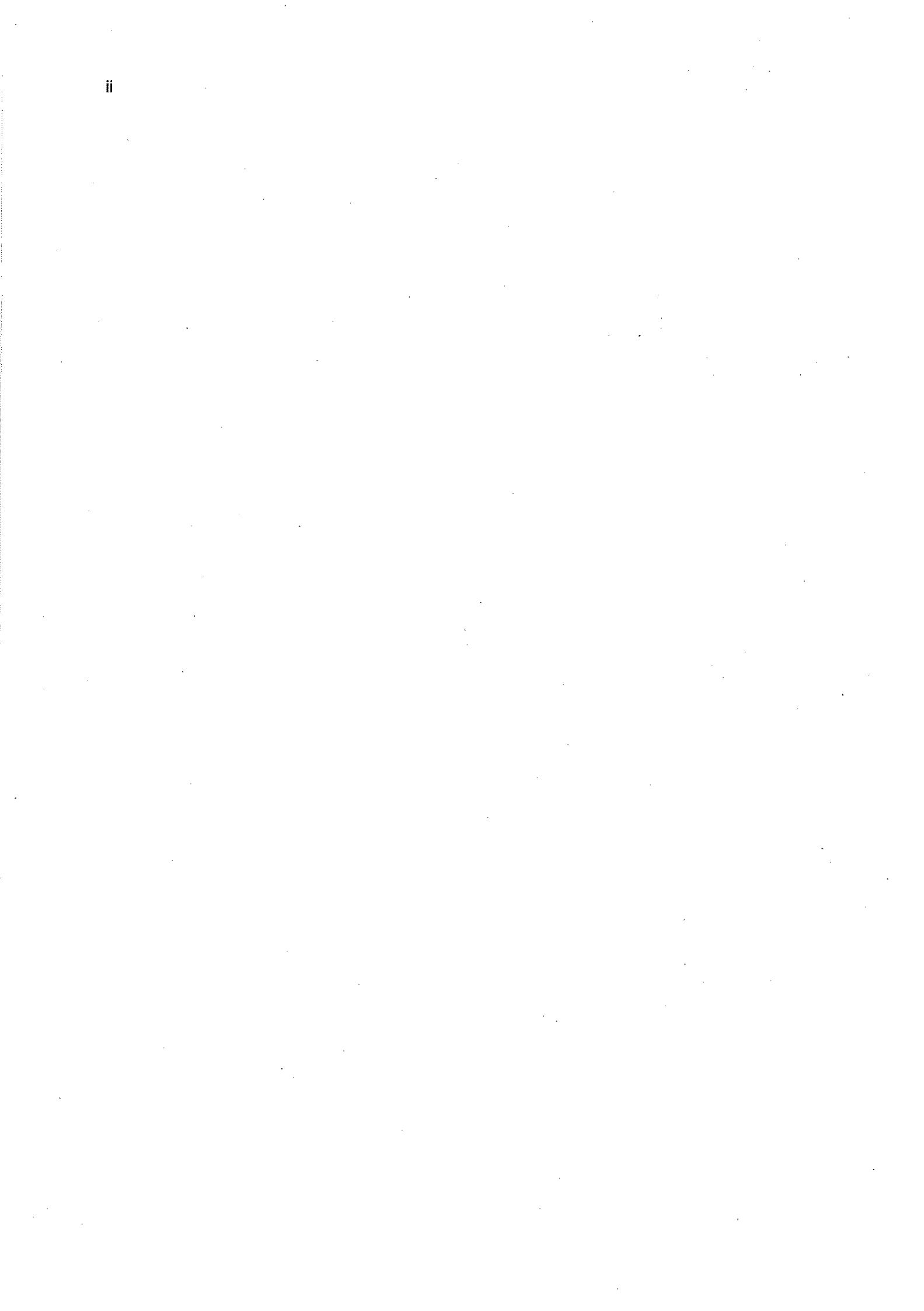
Zusammenfassung

Alle treibhausrelevanten und viele die Ozonchemie beeinflussenden Gase weisen im infraroten Spektralbereich Liniensignaturen auf. Daher bietet sich die Infrarotspektroskopie zur Bestimmung atmosphärischer Spurengase in der Stratosphäre an. Die Bestimmung der Spurengasprofile erfolgt mit kalibrierten Spektren, die eine ausreichende spektrale Auflösung zum Trennen der einzelnen Gase, einen breiten Spektralbereich zum Erfassen möglichst vieler Gase und einen hohen Rauschabstand zum Nachweis geringer Gaskonzentrationen aufweisen müssen. Diese Anforderungen können mit einem Fourier-Transformations-Spektrometer (FTS) erfüllt werden. Dabei werden hohe Genauigkeitsanforderungen an die Kalibrierung gestellt. Mit den hier vorgestellten Verfahren für eine präzise Phasenkorrektur und Kalibrierung lassen sich die Spektren aus den mit dem FTS gewonnenen Interferogrammen mit der geforderten Genauigkeit berechnen.

Für eine hohe Nachweisempfindlichkeit der von den Gasen emittierten Strahlung muß die Eigenemission des Instruments reduziert werden. Dazu wird das in dieser Arbeit beschriebene kryogene ballongetragene MIPAS-B2 Infrarot-FTS auf Trockeneistemperatur gekühlt. Die Eigenemission, die sich aus der Gerätehintergrundstrahlung und der Emission der strahlteilenden Schicht zusammensetzt, wird dadurch auf bzw. unter das Niveau der gemessenen Nutzstrahlung verringert und führt zu ausgeglichenen Strahlungsbeiträgen im Interferometer. Dabei erweist sich, daß die einzelnen Strahlungsbeiträge unterschiedliche Phasen im komplexen Spektrum besitzen. Insbesondere ist die Strahlung des Strahlteilers um 90° zur atmosphärischen Nutzstrahlung phasengedreht. Die Mechanismen der Strahlteileremission, die zu dieser Drehung führen, werden in dieser Arbeit aufgezeigt. Bei Anwendung von klassischen Verfahren zur Phasenkorrektur, die die Strahlteileremission nicht berücksichtigen, finden sich durch die Emission des Strahlteilers Linienstrukturen des gemessenen Spektrums im Phasenspektrum wieder, wenn keine dominierenden Strahlungsquellen vorliegen. Dies führt zu gravierenden Fehlern in den kalibrierten Spektren. Demzufolge wurde die Natur des Phasenverhaltens eines FTS eingehend studiert und eine statistische Phasenbestimmungsmethode entwickelt, die über eine Minimierung der Korrelation zwischen Imaginär- und Realteil und die Reduktion der Varianz im Imaginärteil die korrekte Phasenfunktion mit einer Phasengenauigkeit besser 1° findet.

Da die Nutzstrahlung nicht zwangsläufig über die Eigenemissionen dominiert, müssen bei der radiometrischen Kalibrierung die Strahlungsprozesse der Gase im Interferometer mit berücksichtigt werden. Hierzu ist ein radiometrisches Modell entwickelt worden, welches zu einer neuen Kalibrierungsmethode führt und mit dem die geräteinternen Strahlungsbeiträge quantifiziert werden können. Um das Rauschen der kalibrierten Spektren gering zu halten, müssen die Kalibrierungsspektren mit speziellen Behandlungsmethoden rauschreduziert werden. Mit den entwickelten Methoden ist es nun möglich, die Genauigkeit der Kalibrierung zu quantifizieren.

Zur abschließenden Charakterisierung der Spektren ist die Kenntnis des Apparateprofils notwendig, welches einerseits von der Länge des Interferogramms und anderseits von der Gesichtsfeldverteilung sowie von Justierungsfehlern des Instruments abhängt. Zur Bestimmung des Profils wurden ein Gesichtsfeldmodell entworfen und die Auswirkungen auf die Modulation des Interferogramms respektive auf das Apparateprofil des Spektrums untersucht. Das so gewonnene Apparateprofil ist von der spektralen Position abhängig. Um es für jede Position definieren zu können, wurde eine Parametrisierung des Apparateprofils entwickelt, die auch asymmetrische Apparatefunktionen beschreibt.



Abstract

Phase correction and radiometry of cooled Fourier spectrometers: Characterization of the instrument MIPAS-B2

All greenhouse relevant gases and many gases influencing ozone chemistry have line signatures in the infrared spectral range. Hence, infrared spectroscopy is particularly suited for identifying atmospheric trace gases in the stratosphere. The trace gas profiles are determined by means of calibrated spectra that must have a sufficient spectral resolution for the separation of the individual gases, a broad spectral range for recording as many gases as possible, and a high signal to noise ratio for detecting low gas concentrations. These requirements are met by a Fourier transformation spectrometer (FTS). Calibration has to fulfil high accuracy requirements. The precise phase correction and calibration methods presented here allow to calculate the spectra from interferograms recorded by the FTS with the accuracy required.

To obtain a high detection sensitivity of the radiation emitted by the trace gases, intrinsic emission of the instrument must be reduced. For this purpose, the cryogenic balloon-borne MIPAS-B2 infrared FTS described in the present thesis is cooled to dry ice temperature. Intrinsic emission which is made up of the background radiation of the instrument and the emission of the beam splitting layer is reduced to or below the level of the effective radiation measured and leads to balanced radiation contributions in the interferometer. However, the individual radiation contributions turn out to have different phases in the complex spectrum. In particular, radiation of the beam splitter is subjected to a phase angle rotation by 90° to atmospheric effective radiation. The mechanisms of the beam splitter emission leading to this rotation shall be presented. Classical methods of phase correction that do not take the beam splitter emission into account lead to line structures of the measured spectrum to be found in the phase spectrum, if no dominating radiation sources are available. This results in considerable errors in the calibrated spectra. For this reason, the nature of the phase behavior of an FTS was studied in detail and a statistical phase determination method has been developed. It allows to define the correct phase function by minimizing the correlation between the imaginary and the real part and by reducing the variance of the imaginary part. The method presented allows to achieve phase accuracies better than 1°.

As effective radiation does not necessarily dominate over intrinsic emissions, the radiation processes of the gases in the interferometer have to be considered when performing radiometric calibration. For this, a radiometric model has been developed. It results in a new calibration method and allows to quantify the instrument-inherent radiation contributions. To minimize the noise of the calibrated spectra, special treatments are required. The methods developed now allow to quantify the accuracy of calibration.

Final characterization of the spectra requires the knowledge of the instrument profile. It depends on the length of the interferogram, the distribution of the field of view as well as on adjustment errors of the instrument. To determine the profile, a field of view model has been designed. The consequences on the modulation of the interferogram and the instrument profile of the spectrum, respectively, have been studied. The thus obtained

instrument profile depends on the spectral position. To define it for each position, a parameterization which also describes asymmetric instrument functions has been developed.

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	1
2	Die Bestimmung von Spurengasprofilen in der Stratosphäre.....	3
3	Die IR-Fourierspektroskopie	7
3.1	Das Prinzip der Fourierspektroskopie	7
3.1.1	<i>Der balancierte Strahl – Atmosphärenport</i>	10
3.1.2	<i>Der unbalancierte Strahl – Detektorport</i>	11
3.1.3	<i>Strahlteileremission</i>	13
3.2	Die Digitalisierung und Begrenzung von Interferogrammen	19
3.3	Das spektrale Rauschen	22
3.4	Das Koaddieren von Interferogrammen und Spektren	25
4	Das MIPAS-B2-FTIR-Spektrometer	27
5	Das Phasenproblem.....	32
5.1	Die unterschiedlichen Phasenkomponenten.....	32
5.2	Die klassische Phasenbestimmung der Absorptionsspektroskopie	36
5.3	Die differentielle Phasenbestimmung	40
5.4	Die statistische Phasenbestimmung	42
5.5	Die Korrektur des instrumentellen Phasenfehlers	47
5.6	Der Prozeßablauf der Phasenbestimmung und Phasenkorrektur	49
5.7	Fehlerbetrachtung zur Phasenbestimmung	54
5.8	Bemerkungen zur Phasenbestimmung	56
6	Das radiometrische Verhalten von MIPAS-B2	58
6.1	Die Strahlungsquellen im Instrument.....	59
6.2	Das radiometrische Modell des Interferometers	62
6.3	Die Kalibrierungsgleichungen für die einzelnen Strahlungsquellen	68
6.4	Bemerkungen zum radiometrischen Modell	70
7	Die spektrale und radiometrische Kalibrierung atmosphärischer Spektren .	71
7.1	Das Bestimmen der Basislinien.....	71
7.2	Die Rauschreduktion bei Schwarzkörperspektren	77
7.3	Die spektrale Kalibrierung.....	78
7.4	Die Kalibrierungsergebnisse.....	80
7.5	Charakterisierung des Schwarzkörpers.....	84
7.6	Die radiometrischen Kalibrierungsfehler	86
7.7	Bemerkungen zur Kalibrierung	90

8 Die Apparatefunktion eines Fourierspektrometers.....	91
8.1 Die Apparatefunktion in Abhängigkeit von der Strahldivergenz und der Interferogrammlänge	92
8.2 Die Apparatefunktion des MIPAS-B2	98
8.3 Die Korrektur des Apparateprofils	103
8.4 Das Apodisieren von Spektren.....	103
8.5 Die Parametrisierung von Apparatefunktionen	105
8.6 Bemerkungen zum Modell des Apparateprofils	107
9 Schlußbemerkungen.....	27
10 Literaturverzeichnis.....	110
11 Anhang	110
11.1 Das Strahlteilerdiagramm.....	115
11.2 Das Bestimmen der Geradengleichung für die statistische Phasenbestimmung.....	116
11.2.1 <i>Das Nullsetzen der Korrelation</i>	116
11.2.2 <i>Minimierung der vierten Potenz κ.....</i>	117
11.2.3 <i>Konvergenzergebnisse der statistischen Phasenbestimmung.....</i>	120
11.3 Die Strahlungsübertragungsgleichung	122
11.4 Die Kummerfunktion.....	123
11.5 Spezielle Funktionen.....	125
11.6 Wichtige Zusammenhänge zur Fouriertransformation	126
11.7 Nomenklatur.....	128
11.8 Abbildungsverzeichnis.....	133
11.9 Tabellenverzeichnis	136

1 Einleitung

Vor knapp 20 Jahren wurden noch vermeintlich fehlerhafte Dobson-Spektrometer zur Messung des Ozon-Säulengehaltes von der Antarktis zur Reparatur nach Europa geschickt. Damals ahnte niemand, daß die Erscheinung der reduzierten Ozonkonzentration, die später 'Ozonloch' getauft wurde, die späte Bestätigung einer bereits 1974 von Molina und Rowland [Molina,Rowland,1974] geäußerten prinzipiellen Annahme einer globalen Ozonreduktion durch Chlorradikale sein sollte; auch wenn die chemischen Reaktionen, anders als damals von den genannten Autoren vermutet, über heterogene Prozesse stattfinden.

Wenige Jahre später war das Ozonloch weltweit bekannt und hatte Ausmaße über die gesamte Antarktis angenommen. Es herrschte jedoch noch Uneinigkeit, ob es naturbedingt oder anthropogenen Ursprungs sei. Um die physikalischen und chemischen Ursachen der Ozonzerstörung zu verstehen, wurden weltweit große Forschungsanstrengungen unternommen. Erst 1987 wurden im Rahmen des Montrealer Protokolls die Fluorchlorkohlenwasserstoffe als anthropogene Quellen der Ozonzerstörung politisch anerkannt.

Die Erklärungen von Molina und Rowland konnten die Stärke des Ozonabbaus, den Ort und die Höhe, in der er stattfindet, jedoch nicht begründen. Zum Verständnis aus heutiger Sicht sind nicht nur der Ozongehalt und dessen zeitlicher Verlauf wichtig, sondern auch insbesondere der Gehalt von Reaktionspartnern in der Atmosphäre, die mittelbar und unmittelbar durch homogene und heterogene Reaktionen die Ozonchemie beeinflussen. Dabei spielen gekoppelte dynamisch-chemische Modelle für die Stratosphäre eine zentrale Rolle, um die Prozesse in der Atmosphäre besser zu verstehen und um Prognosen des künftigen Ozongehalts in der Stratosphäre und des anthropogenen Einflusses unserer Gesellschaft auf das Klima abgeben zu können. Eine Grundlage, um diese Modelle parametrisieren, testen, validieren und verbessern zu können, bilden gleichzeitige, quantitative Messungen der für das Ozonloch relevanten Spurengase, wie

- der Radikale **NO, NO₂, Cl, ClO, OH, ...**,
- der Reservoirgase **HNO₃, N₂O₅, ClONO₂, HO₂NO₂, HCl, ...**,
- und der Quellgase **CH₄, N₂O, H₂O, FCKW, CCl₄, C₂H₆, ...**.

Die hervorgehobenen Moleküle können von dem in dieser Arbeit beschriebenen MIPAS-B2 Spektrometer gemessen werden.

Zur Bestimmung der Spurengaskonzentrationen als Profil über der Höhe kommen sowohl 'in-situ'-Meßmethoden als auch Fernerkundungsinstrumente zum Einsatz. Erstere liefern räumlich und zeitlich hochaufgelöste Ergebnisse, sind aber nicht für alle interessanten Gase anwendbar, da entweder die Konzentrationen unterhalb der Nachweigrenze des Meßprinzips liegt oder keine Wechselwirkung mit den jeweiligen Gasen erzielt werden kann bzw. die Gase nicht für eine spätere Untersuchung eingesammelt und konserviert werden können.

Viele der wichtigen Spurengase emittieren und absorbieren elektromagnetische Strahlung. Aus den spektralen Signaturen dieser Spurengase ist eine Mengenbestimmung möglich. Die Gase lassen sich spektroskopisch vom Bereich des Ultravioletten bis hin zum Millimeterwellen-Bereich nachweisen. Die geringe Dichte der Spurengase in der Stratosphäre sowie der optische Wirkungsquerschnitt der Moleküle erlauben im allgemeinen keinen spektroskopischen 'in-situ'-Meßvorgang, denn es werden größere Gasmengen benötigt, um die Nachweigrenze zu überschreiten. Damit gewinnen Fernerkundungsmethoden an Bedeutung. Werden die Absorptionen bzw. Emissionen über lange optische Wege gemessen,

stehen häufig eine ausreichende Anzahl optisch aktiver Moleküle des jeweiligen Gases zur Verfügung, um nachgewiesen werden zu können.

Zum Gewinnen einer Höhenverteilung der gemessenen Parameter bieten sich mehrere Meßgeometrien an. Einmal mit der Sonne als Strahlungsquelle während der Sonnenauf- und -untergänge und einem Spektrometer in der Stratosphäre, wobei die Höhenvariation durch Änderung der Sichtlinie aufgrund der Höhe des Sonnenstandes erreicht wird. Zum anderen bei Messungen während des Ballonaufstiegs oder –absinkens, bei denen sich der Sichtstrahl ebenfalls kontinuierlich durch die Atmosphärenschichten bewegt. Hiermit können Gase detektiert werden, die vom ultravioletten (UV) bis zum infraroten (IR) Bereich Absorptionslinien aufweisen. Allerdings sind die Meßzeiten knapp bemessen, und während der Polarnacht stehen nur der Mond und die Sterne als sehr lichtschwache alternative Quellen zur Verfügung.

Einen Ausweg bietet hier die Messung der thermischen Emission von Spurengasen. Dies ist vom Bereich des IR bis in den Millimeter-Wellenlängenbereich hinein möglich. Um eine Höhenverteilung zu gewinnen, wird ein Horizontsondierungsverfahren eingesetzt, das die Atmosphäre tangential unter verschiedenen Blickwinkeln abtastet und dabei große Gasvolumina für eine ausreichende Strahlungsleistung beobachtet.

Diese Emissionsspektrometer müssen äußerst empfindlich sein und ein sehr geringes Eigenrauschen aufweisen, um die niedrigen Strahlungsintensitäten detektieren zu können. Echle et al. [Echle et al., 1994] haben im IR-Spektralbereich eine Großzahl wichtiger Moleküle identifiziert und ein hohes spektrales Auflösungsvermögen gefordert, um die einzelnen Moleküle spektroskopisch trennen zu können. Dieses kann am besten durch Fourier-Transformations-Spektrometer (**FTS**) erzielt werden, die eine hohe Auflösung und eine große spektrale Bandbreite in sich vereinen. Radiometer scheiden hier aufgrund der unzureichenden spektralen Auflösung von vornherein aus. Gitterspektrometer müßten sehr große Ausmaße annehmen und treten entsprechend den Untersuchungen von Jaquinot [Jquinot, 1954] und Felgett [Felgett, 1951] gegenüber den Fourierspektrometern zurück.

Vor diesem Hintergrund wurde und wird am Institut für Meteorologie und Klimaforschung (IMK) des Forschungszentrums Karlsruhe (FZK) und der Universität Karlsruhe eine Reihe von hochauflösenden Fourierspektrometern entwickelt und im Rahmen von nationalen Programmen (z.B. OFP) und europäischen Meßkampagnen (z.B. EASOE, SESAME und THESEO) betrieben. Ein besonderes Augenmerk wird in dieser Arbeit auf das derzeit weltweit einzige kryogene, ballongetragene IR-Fourierspektrometer, das Michelson Interferometer für Passive Atmosphärische Sondierung – Ballonversion (MIPAS-B2) gelegt, welches die in der Auflistung hervorgehobenen Spurengase zeitgleich messen kann [Fischer et al., 1983; Fischer, Oelhaf, 1996].

In dieser Arbeit werden insbesondere die mathematischen Methoden entwickelt, mit denen die Rohdaten des Interferometers zu kalibrierten Spektren hinreichender Genauigkeit transformiert werden können, um die Spektren daraufhin der weitergehenden Auswertung zu Spurengasprofilen unterziehen zu können. Bei den Transformationen wird darauf geachtet, sämtliche Größen aus den Daten des Instruments zu gewinnen, ohne auf atmosphärische Zustandsparameter zurückzugreifen.

Das Prinzip der Fourierspektroskopie wird eingehend dargestellt und ein radiometrisches Modell entwickelt, um darauf aufbauend die nötigen Prozesse wie Phasenkorrektur sowie radiometrische und spektroskopische Kalibrierung näher zu definieren. Dabei wird hinsichtlich der Gewinnung der Spektren der Unterschied zwischen dem gekühlten Emissionspektrometer MIPAS-B2 und kommerziellen, ungekühlten Interferometern, denen ein wesentlich einfacheres radiometrisches Modell zugrunde liegt, verdeutlicht.

2 Die Bestimmung von Spurengasprofilen in der Stratosphäre

Diese Arbeit befaßt sich mit der Messung und Kalibrierung der Spektren thermisch emittierender Spurengase in der Stratosphäre. Vorerst soll jedoch ein knapper Abriß der Bestimmung von vertikalen Spurengasprofilen aus den gewonnenen Spektren skizziert werden, um die Anforderungen an die radiometrische und spektrale Genauigkeit des MIPAS-B2 Spektrometers eingehender verstehen zu können.

Spurengaskonzentrationen lassen sich durch Vergleich und Anpassung von numerisch berechneten an kalibrierte gemessene Spektren erzielen. Als Ausgangspunkt der Rechnung dient ein homogenes Gasgemisch in einem definierten Volumen, welches durch seinen Zustand in Form von Druck, Temperatur, chemischer Zusammensetzung etc. bestimmt ist. Entlang des inhomogenen Weges des Sehstrahls durch die Atmosphäre reihen sich diese Luftvolumina hintereinander. Die numerisch gebildeten Spektren beruhen im wesentlichen auf Informationen aus Liniendatenbanken (z.B. HITRAN), in denen die einzelnen spektroskopischen Größen wie Liniенstärke, Liniенpositionen und die Parameter für Druck- und Temperaturverbreiterung enthalten sind. Mit geeigneten Annahmen für die Konzentrationen der in den hintereinander liegenden Luftvolumina enthaltenen Gase sowie den Temperatur- und Druckwerten kann für das Gasgemisch ein Spektrum berechnet werden. Dabei wird die Strahlungsübertragungsgleichung (Anhang 11.3) eingesetzt, die sowohl die Emission innerhalb des Luftvolumens berücksichtigt, als auch die Extinktion durch Absorption und Streuung von eingestrahlter und selbstemittierter Strahlung (Abb. 1). Streuung kann aufgrund des niedrigen Streuquerschnittes im IR unberücksichtigt bleiben, vorausgesetzt, daß nicht temporär durch stratosphärische Wolken oder durch einen Vulkanausbruch der Aerosolgehalt in der oberen Atmosphäre stark erhöht ist. Als Strahlungsübertragungsalgorithmen werden bei MIPAS-B2 die 'Linien-für-Linien'-Programme FASCOD-2 [Clough et al., 1986], welches um schwere Moleküle erweitert ist [Wetzel et al., 1995], und KOPRA [Höpfner et al., 1998] verwendet.

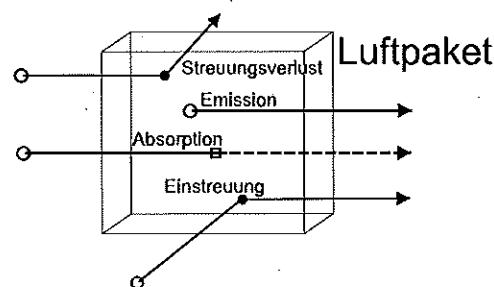


Abb. 1 Optische Prozesse innerhalb eines Luftvolumens.

Bei Streuprozessen wird im allgemeinen nur Einfachstreuung betrachtet; im IR-Spektralbereich kann aufgrund des geringen Streuquerschnittes sogar jegliche Streuung vernachlässigt werden.

MIPAS-B2 verwendet die Meßgeometrie der Horizontsondierung. Das Instrument schaut entsprechend Abb. 2 durch die Atmosphärenschichten in den kalten Weltraum. Die Strahlungsübertragung erfolgt entlang des gesamten Sehstrahls bis zum Experiment. Dabei liefert die Schicht oberhalb des Tangentenpunktes, des Punktes mit dem geringsten Abstand zur Erdoberfläche, den größten Beitrag zum Spektrum. Durch gezielte Variation der

Spurengaskonzentrationen des Modells für die jeweilige Tangentenschicht lassen sich die berechneten Spektren an die gemessenen Spektren angleichen.

Dies führt zu einem Algorithmus zur Bestimmung der Spurengaskonzentrationen, bei dem die Parameter der Atmosphärenschichten oberhalb der betrachteten Tangentenschicht aus bereits zuvor ausgewerteten Schichten stammen. D.h. als erstes wird die oberste Tangentenschicht z_0 zusammen mit der Atmosphäre oberhalb des Beobachters analysiert. Das Ergebnis wird bei der Analyse der nächsttieferen Schicht z_1 wieder verwendet, um die Strahlungsübertragung beim Durchgang durch die Schicht z_0 zu berücksichtigen. Dieses Verfahren setzt sich bis auf die unterste Tangentenschicht fort und wird als 'onion-peeling' bezeichnet. Zur Berechnung der Spurengasprofile wird das Programm RAT (Retrieval of Atmospheric Trace gas profiles, [v. Clarmann, 1994]) verwendet, welches mit einem nicht-linearen Verfahren zum Minimieren des Abweichungsquadrates die berechneten Spektren an die gemessenen Spektren anpaßt.

Zur Berechnung der numerischen Spektren werden die bereits erwähnten Druck- und Temperaturprofile über der Höhe benötigt, die aus – mit dem Flug zeitgleichen – Radiosondenaufstiegen und Daten des European Centre for Medium-Range Weather Forecasts (ECWMF) bzw. des United Kingdom Meteorological Office (UKMO) gewonnen werden. Daraus wird ein 'a priori' Temperaturprofil generiert, welches vor der Bestimmung der Spurengasprofile mittels geeigneter CO₂-Signaturen für die aktuelle Meßgeometrie korrigiert wird.

In Abb. 3 ist eine typische Sequenz von Spektren übereinander dargestellt, die aus unterschiedlichen Tangentenschichten durch entsprechend eingestellte Elevationswinkel gewonnen wurden. Zur Verdeutlichung ist der Bereich um den CIONO₂ v_4 Q-Zweig in der Abbildung vergrößert dargestellt. Die Linien wichtiger Gase im Spektralbereich des ersten Kanals sind markiert. Es ist deutlich erkennbar, wie die Linien mit wachsender Moleküldichte, primär aufgrund der Druckzunahme, zu niedrigeren Tangentenhöhen anwachsen. Um eine solche Sequenz messen zu können, wird das MIPAS-B2-Experiment von einem mit Wasserstoff gefüllten Ballon (auf Flugniveau 400 000 m³ Volumen) in die Stratosphäre auf 30 bis 40 km Höhe transportiert. Bei Erreichen der nominellen Flughöhe wird das reguläre Meßprogramm mit den Horizontsondierungssequenzen gestartet. Die Höhenauflösung der Horizontsondierung beträgt 2 bis 3 km im Meßbereich zwischen der Tropopause bis hin zur Flughöhe des Ballons. Soweit es die Flugdauer zuläßt, werden während eines Fluges mehrere Horizontsondierungssequenzen mit unterschiedlichen azimutalen Blickwinkeln aufgenommen. Um einzelne Linien individueller Gase spektroskopisch trennen zu können, weist MIPAS-B2 eine unapodisierte Auflösung von 0,035 cm⁻¹ auf. Dies entspricht einem Auflösungsverhältnis von 1:20 000 (bei 14 μm) bis 1:70 000 (bei 4 μm).

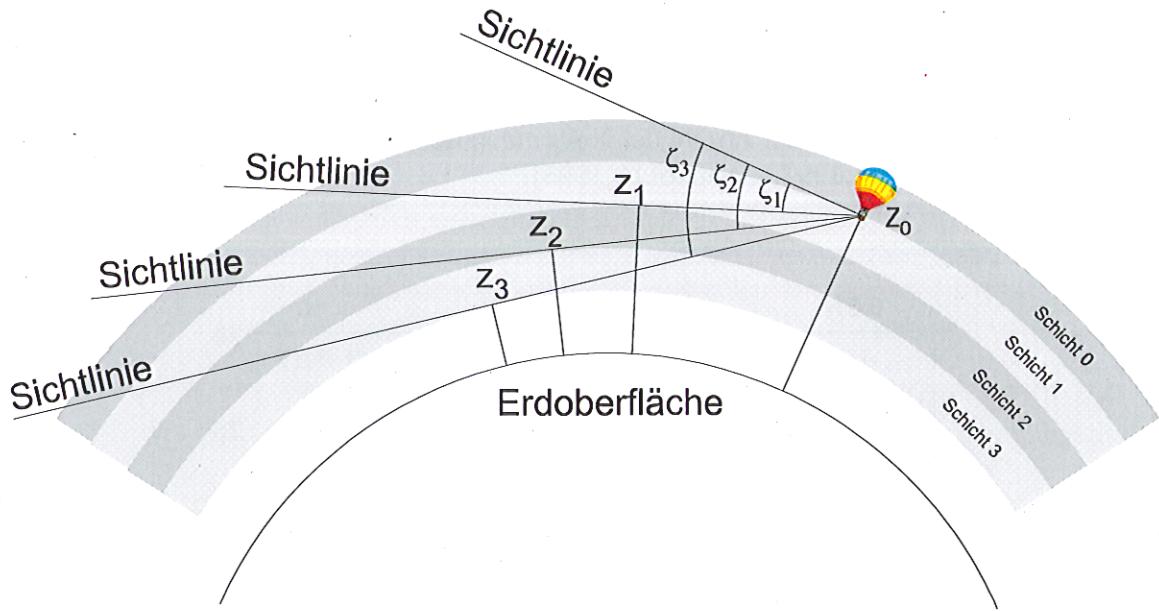


Abb. 2 Horizontsondierung-Meßgeometrie von MIPAS-B2, um eine gute Höhenauflösung zu erhalten und über eine ausreichende Zahl optisch aktiver Moleküle im Sehstrahl zu verfügen.
Der Tangentenpunkt des Sehstrahls mit der Höhe z variiert mit dem Elevationswinkel ζ .

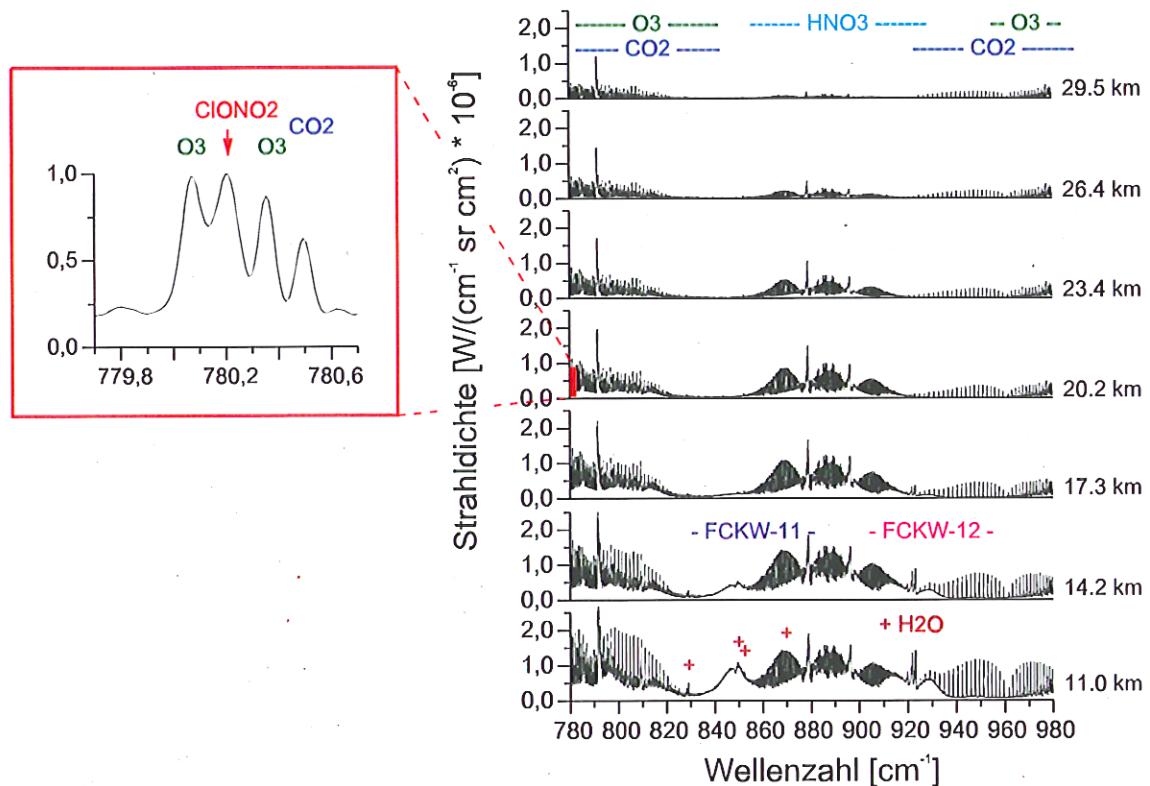


Abb. 3 Sequenz von Spektren des ersten Spektralkanals von MIPAS-B2 für unterschiedliche Tangentenhöhen, gewonnen am 24. März 1997 im Polarwirbel über Kiruna (68°N , Schweden).
Wichtige Spurengase für die Ozonchemie sind indiziert. Zur Darstellung der erzielten Auflösung ist ein Ausschnitt im Bereich der ClONO_2 v_4 -Bande vergrößert dargestellt. Dabei wird die Trennung der Spektrallinien verschiedener Moleküle deutlich.

Mit der Anpassung der modellierten Spektren an diesen Satz gemessener Spektren erhält man schließlich individuelle vertikale Spurengasprofile wie z.B. in Abb. 4 für die Stickstofffamilie NO_y . NO_y steht für die Summe der Spurengase (außer N_2O), in die Stickstoff eingebaut ist, gewichtet mit der Anzahl der N-Atome in dem jeweiligen Molekül [v. Clarman et al., 1997; Wetzel et al., 1997; Oelhaf et al., 1996].

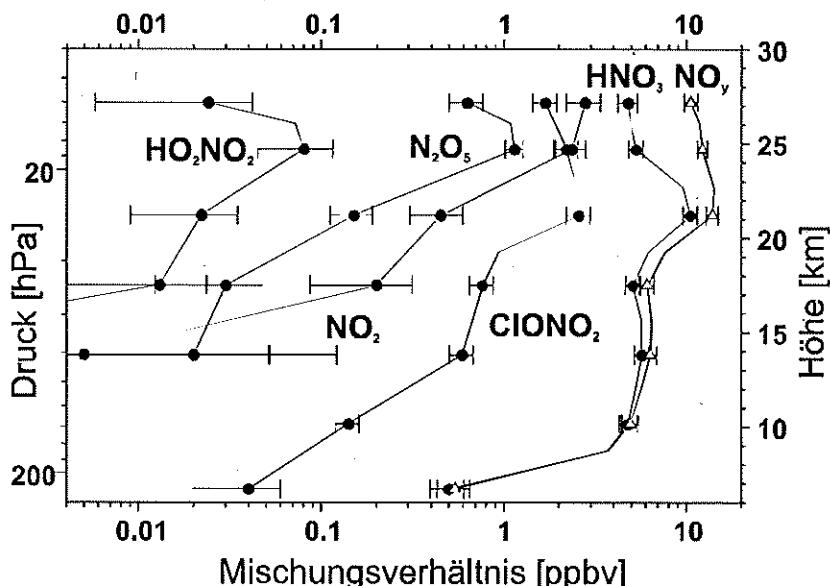


Abb. 4 Spurengas-Mischungsverhältnisse wichtiger Komponenten der NO_y -Familie als Profile über der Höhe bzw. dem Druck, gemessen von MIPAS-B2 in der Nacht am 11. Februar 1995 über Kiruna (68°N , Schweden).

Bei der Fehlerbetrachtung für die Spurengaskonzentrationen müssen folgende Punkte berücksichtigt werden:

- Fehler aufgrund nicht perfekter spektraler und radiometrischer Kalibrierung,
- spektrales Rauschen,
- Fehler des Druck- und Temperaturprofils,
- Fluktuationen und Unsicherheiten in der Tangentenhöhe,
- Korrelationen (Querbeeinflussung) der während des Anpassungsprozesses bestimmten Parameter,
- Fehlerfortpflanzung zu niedrigeren Schichten aufgrund des 'onion-peeling'- Effektes,
- Fehler in den Datenbanken der spektroskopischen Parameter.

Der typische Gesamtfehler für die unterschiedlichen Spurengase liegt zwischen 5 % und 15 % und ist sowohl vom individuellen Spurengasmolekül als auch von der Tangentenhöhe abhängig.

3 Die IR-Fourierspektroskopie

Ein Fourierspektrometer führt eine optische Fouriertransformation des Spektrums der einfallenden Strahlung durch. Das Prinzip des verwendeten Fourierspektrometers basiert auf einem Michelson-Interferometer [Michelson,1902]. Ein einfallender, ausreichend kollimierter und kohärenter Lichtstrahl wird mit einem Strahlteiler in zwei Teilstrahlen zerlegt und nach Durchlaufen der optischen Arme des Interferometers wieder in sich zusammengeführt. In Abhängigkeit von der Differenz der zurückgelegten Wege der Teilstrahlen führt dies zu einer Interferenzerscheinung, dem sogenannten Interferogramm (IFG), welches eine Funktion der optischen Wegdifferenz x ist. Mit Hilfe einer mathematischen Fouriertransformation kann die optische Fouriertransformation umgekehrt und eine Frequenzanalyse der eingefallenen Strahlung durchgeführt werden.

Dieses Kapitel wird die wichtigen Funktionalitäten und Größen der Fourierspektroskopie behandeln, die in dieser Arbeit weitere Anwendung finden. In den folgenden Kapiteln wird detaillierter auf das ballongetragene Fouriertransformations-Spektrometer (FTS) MIPAS-B2 eingegangen. Vorerst wird jedoch ein ideales Interferometer vorausgesetzt. Die gerätetypischen Eigenheiten werden bei der Beschreibung des Ballongerätes näher erläutert.

3.1 Das Prinzip der Fourierspektroskopie

Ein einfallender, kollimierter Lichtstrahl mit dem Intensitätspektrum $S(\sigma)$, ($\sigma = 1/\lambda$: Wellenzahl) wird, wie in Abb. 5 schematisch dargestellt, durch den Strahlteiler ST in zwei Teilstrahlen \mathcal{A}_1 und \mathcal{A}_2 zerlegt. Die Teilstrahlen treffen auf die Spiegel (Retroreflektoren) R_1 bzw. R_2 und werden von dort wieder in sich zurückreflektiert. Mit Hilfe der variablen Position des beweglichen Spiegels R_2 können zwischen den beiden Armen des Michelson-Interferometers unterschiedliche optische Weglängen für die beiden Teilstrahlen erzeugt werden. Dabei ist die optische Weglänge als die optische Strecke definiert, die ein Teilstrahl von einer fiktiven Ebene vor dem Strahlteiler bis zu einer weiteren fiktiven Ebene nach dem Strahlteiler auf Seite des IR-Detektors zurücklegt. Die Kompensationsplatte ist aus dem gleichen Material beschaffen wie das Strahlteilersonstrat und erhält die Symmetrie zwischen den beiden optischen Armen; ohne die Kompensationsplatte wäre aufgrund der dispersiven Eigenschaften des Strahlteilersonstrats bei einer festen mechanischen Weglängendifferenz die optische Weglängendifferenz für jede Wellenzahl verschieden.

Verschiebt man den Spiegel R_2 , so verschiebt sich die Phase zwischen den beiden Teilstrahlen, und es entstehen konstruktive und destruktive Interferenzen im Signal des IR-Detektors. Man erhält dabei das Interferogramm $IFG(x)$, dessen Intensität eine Funktion der Weglängendifferenz x ist.

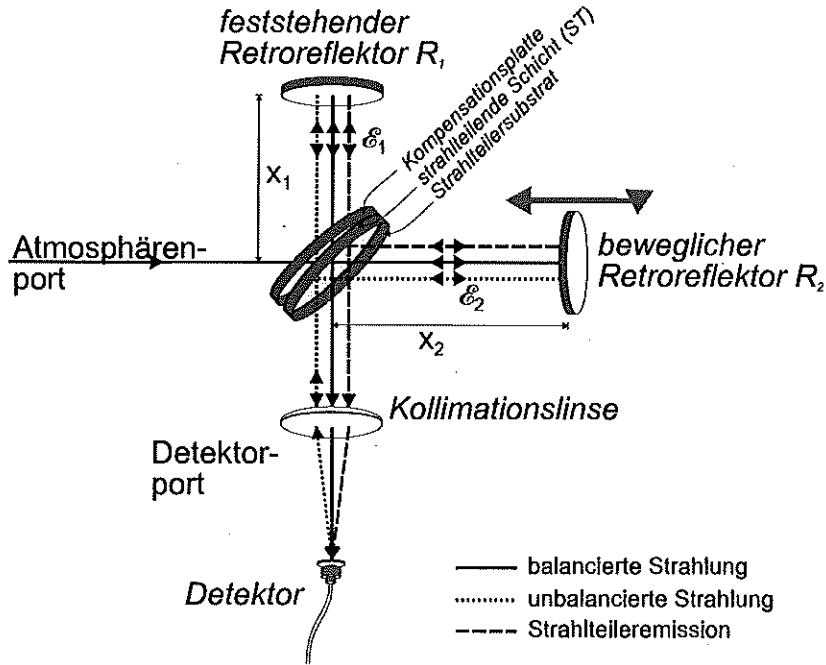


Abb. 5 Schematische Darstellung der einzelnen Strahlungsbeiträge im Michelson-Interferometer.
Die zurückgestrahlten Beiträge in den Atmosphärenport sind nicht gezeichnet, da sie nicht zum Signal im Detektor beitragen. Zu beachten ist die Verkippung der Kompensationsplatte gegenüber dem Strahlteiler, um parasitäre Interferenzen im Interferogramm zu vermeiden.

Ein Interferometer kann Strahlung aus zwei unterschiedlichen Richtungen modulieren. Diese Richtungen werden als 'Port' bezeichnet und im hiesigen Fall wird zwischen dem 'Atmosphärenport' und 'Detektorport' unterschieden, wobei der Name für die Richtung steht, aus der die Strahlung in das Interferometer gelangt (Abb. 5). Die Strahlung aus dem 'Atmosphärenport' moduliert das Interferometer 'balanciert' und die aus dem 'Detektorport' 'unbalanciert'. Der Unterschied zwischen den Begriffen 'balancierte' und 'unbalancierte' Strahlung röhrt vom Verhältnis der Anzahl der Reflexion in den beiden optischen Armen her. Ist die Anzahl der Reflexionen gleich, wird von einer 'balancierten' Strahlung gesprochen; ist sie ungleich, so lautet der Begriff 'unbalanciert'.

In einem realen Interferometer tragen Strahlungen verschiedenen Ursprungs zum Interferogramm bei: Strahlung aus der Atmosphäre entlang des Sehstrahls (balancierter Strahl), Strahlung von der Seite des Detektordewars (unbalancierter Strahl) und Strahlung, die vom Strahlteiler emittiert wird (Strahlteileremission) [Weddigen et al., 1993]. Jede dieser Strahlungsquellen erzeugt ein Interferogramm, welches jedoch eine unterschiedliche optische Phase aufweist. Die wellenzahlabhängigen komplexen Transmissions- (T) und Reflexionskoeffizienten (R) der strahlteilenden Schicht ergeben sich aus der Theorie der Vielstrahlinterferenz von planparallelen Grenzschichten, die als Grundlage die Fresnelschen Gleichungen beinhaltet. Zur Bestimmung der Koeffizienten muß zwischen der Strahlung unterschieden werden, die außerhalb (R_a , T_a) oder innerhalb des Strahlteilers (R_i , T_i) emittiert wird (Abb. 6). Der Strahlteiler wird bei den folgenden Betrachtungen als verlustfrei angenommen. Zudem müßten die Koeffizienten getrennt für die zur Einfallssebene senkrechte bzw. parallele Polarisationsrichtung betrachtet werden, worauf an dieser Stelle (zur Vereinfachung) verzichtet wird. In [Trieschmann, Weddigen, 1999] wird dieser Sachverhalt näher beschrieben. Im folgenden wird nur die zur Einfallssebene senkrechte Komponente betrachtet, um die Grundlage für ein späteres Verständnis der Phasenproblematik bei Fourierspektrometern zu liefern.

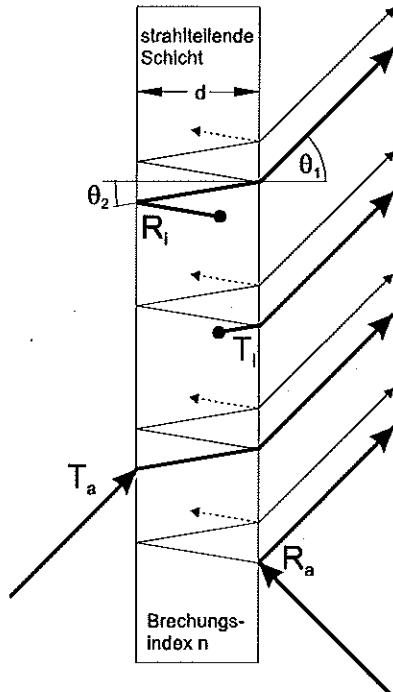


Abb. 6 Die Vielstrahlinterferenzen in der optischen Schicht bewirken den strahlteilenden Effekt. Die resultierenden Koeffizienten tragen ihre Bezeichnung nach der Wechselwirkung der zuerst getroffenen Grenzschicht, also Reflexions- (R) bzw. Transmissionskoeffizient (T). Hierbei sind die Reflexions- und Transmissionskoeffizienten für Strahlungsbeiträge, die außerhalb (Index a) und innerhalb (Index i) der strahlteilenden Schicht emittiert werden, zu unterscheiden. Die stark gezeichneten Strahlen nach der Reflexion bzw. Transmission durch die strahlteilende Schicht werden als Strahlen nullter Ordnung bezeichnet.

Die Reflexionen an den Grenzschichten bzw. die Transmissionen durch diese führen bei parallelen Grenzschichten zu Vielstrahlinterferenzen. Die Phase φ der resultierenden Strahlung aus der Summation der Reflexions- bzw. Transmissionsordnungen der Vielstrahlinterferenz drückt die Phase gegenüber der jeweiligen nullten Ordnung aus (Abb. 6). Die Phasen φ der Koeffizienten T_a , R_i und T_i sind dabei identisch

$$\varphi_{Ta} = \varphi_{Ri} = \varphi_{Ti} = \alpha \quad (1)$$

und werden durch den Phasenparameter α beschrieben¹. Für den Reflexionskoeffizienten R_a beträgt hingegen die Phase

$$\varphi_{Ra} = \alpha + \frac{1}{2}(\pi + 4\pi\sigma nd \cos \theta_2) = \alpha + \frac{1}{2}(\pi + \gamma), \quad (2)$$

wobei n den Brechungsindex des Strahleiters, d dessen Schichtdicke, θ_2 den Winkel der Strahlung gegen das Lot innerhalb der strahlteilenden Schicht und $\gamma = 4\pi\sigma nd \cos \theta_2$ die optische Phase zwischen zwei Durchgängen durch die strahlteilende Schicht beschreibt [Hecht, 1989]. Alle einzelnen Phasen der Koeffizienten und der Phasenparameter α sind eine

¹ Für Strahlung, die von außen auf die strahlteilende Schicht trifft, ist der Reflexionskoeffizient R_a und der Transmissionskoeffizient T_a für Vielstrahlinterferenzen

$R_a = \tilde{r}(1 - e^{i\gamma}) / (1 - \tilde{r}^2 e^{i\gamma})$, bzw. $T_a = (1 - \tilde{r}^2) / (1 - \tilde{r}^2 e^{i\gamma})$ [Hernandez, 1986]. Dabei beschreibt der

Reflexionskoeffizient \tilde{r} die Reflexion an einer Grenzschicht vom optisch dünneren zum optisch dickeren Medium und ist aufgrund des Phasensprungs negativ. Für Emissionen innerhalb der strahlteilenden Schicht gilt

$R_i = -\tilde{r}\tilde{t}_i / (1 - \tilde{r}^2 e^{i\gamma})$, bzw. $T_i = \tilde{t}_i / (1 - \tilde{r}^2 e^{i\gamma})$ mit \tilde{t}_i als Transmissionskoeffizient an der Grenzschicht vom optisch dickeren zum optisch dünneren Medium. Da der Nenner bei allen Koeffizienten identisch ist, drücken sich die Phasenbeziehungen allein durch ihre Zähler aus. Der Zähler der Transmissions- und Reflexionskoeffizienten T_a , T_i , R_i ist reell und positiv, so daß sich ein Phasenunterschied $\Delta\varphi$ zwischen ihnen und dem

Reflexionskoeffizienten R_a nach $\tan \Delta\varphi = \frac{-\sin \gamma}{1 - \cos \gamma}$ ergibt. Durch Umformen erhält man

$\Delta\varphi = \arctan \frac{\sin \gamma}{\cos \gamma - 1} = \arccos \left(-\sin \frac{\gamma}{2} \right)$ und schließlich $\Delta\varphi = \frac{\pi}{2} + \frac{\gamma}{2}$.

Funktion von γ . Der Phasenparameter α hebt sich später jeweils bei der Bildung der Intensitäten durch Multiplikation des elektrischen Feldes mit dem komplex konjugierten auf und muß von daher nicht quantifiziert werden.

3.1.1 Der balancierte Strahl – Atmosphärenport

Die balancierte Strahlung stammt sowohl von Molekülen, die im Blickwinkel des Sehstrahls emittieren, als auch von der Emission bzw. Streuung von Strahlung an den Spiegeln vor dem Strahlteiler. In Abb. 7 sind die optischen Wege ① und ② der **balancierten** Strahlung eingezeichnet. Auf die Darstellung der Vielstrahlinterferenzen wird zur Übersichtlichkeit in dieser und in den folgenden Abbildungen verzichtet und nur der direkte Strahl nullter Ordnung durch die strahlteilende Schicht gezeigt. Das Substrat, auf das die strahlteilende Schicht aufgedampft ist, und die Kompensationsplatte sind nicht dargestellt, da sie zur Beschreibung des Interferogramms nicht wesentlich beitragen. Mit Hilfe der optischen Wege lassen sich die Phasenbeziehungen und damit auch die Interferenzerscheinungen zwischen den beiden Armen herleiten.

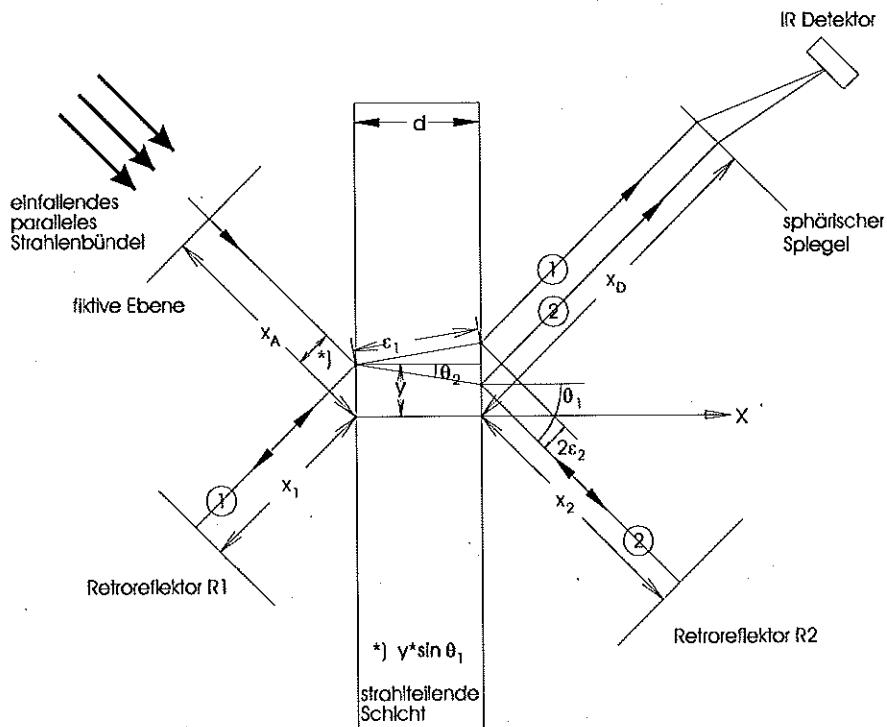


Abb. 7 Schematischer Strahlengang des balancierten Strahls in einem FTIR-Spektrometer.
Die strahlteilende Schicht ist überdimensional groß dargestellt. Die Kompensationsplatte, das Strahlteilersubstrat und die Vielfachreflexionen sind zur besseren Übersicht nicht gezeichnet. Die Notationen und Definitionen werden im Text erläutert.

Für den optischen Weg im linken Arm

$$OP_{b,1} = (x_A - y \sin \theta_1) + 2(x_1 + y \sin \theta_1) + n \epsilon_1 + (x_D - y \sin \theta_1 - \epsilon_2) \quad (3)$$

folgt mit der optischen Wegdifferenz zwischen zwei Teilstrahlen der Vielfachreflexion² von

² Für den geometrischen Weg ϵ_1 in der strahlteilenden Schicht ergibt sich $\epsilon_1 = d / \cos \theta_2$ und für den durch die Brechung im Strahlteiler verkürzten Weg ϵ_2 der Ausdruck $\epsilon_2 = d \tan \theta_2 \sin \theta_1$. Mit dem Brechungsgesetz

$$n\epsilon_1 - \epsilon_2 = nd \cos \theta_2 = \gamma / 4\pi\sigma \quad (4)$$

ein kompakterer Ausdruck

$$OP_{b,1} = 2x_1 + x_A + x_D + nd \cos \theta_2 . \quad (5)$$

Genauso läßt sich der optische Weg für den rechten Arm definieren:

$$\begin{aligned} OP_{b,2} &= (x_A - y \sin \theta_1) + n\epsilon_1 + 2(x_2 + y \sin \theta_1 - \epsilon_2) + (x_D - y \sin \theta_1 + \epsilon_2) \\ &= 2x_2 + x_A + x_D + nd \cos \theta_2 . \end{aligned} \quad (6)$$

Die Strahlungsleistung am Detektor ist proportional zum Betragsquadrat des resultierenden elektrischen Feldes, das nach Überlagerung der elektrischen Felder $\mathcal{E}_{b,1}$ (optischer Weg mit dem Index 1) und $\mathcal{E}_{b,2}$ (optischer Weg mit dem Index 2) der beiden Teilstrahlen entsteht.

$$|\mathcal{E}_{b,1} + \mathcal{E}_{b,2}| = |\mathcal{E}_{b,0}| |R_a T_a e^{2i\pi\sigma OP_{b,1}} + R_a T_a e^{2i\pi\sigma OP_{b,2}}| \quad (7)$$

Sowohl die Reflexion, als auch die Transmission werden über ihren Betrag $|R_a|$ bzw. $|T_a|$ und die zugehörigen Phase φ_R bzw. φ_T im komplexen Raum dargestellt. Die Phasen addieren sich gleichermaßen für beide Arme, so daß sie sich bei der Überlagerung der beiden Teilstrahlen kompensieren

$$\begin{aligned} |\mathcal{E}_{b,1} + \mathcal{E}_{b,2}|^2 &= |\mathcal{E}_{b,0}|^2 |R_a|^2 |T_a|^2 |e^{i(2\pi\sigma OP_{b,1} + \varphi_R + \varphi_T)} + e^{i(2\pi\sigma OP_{b,2} + \varphi_R + \varphi_T)}|^2 \\ &= 2|\mathcal{E}_{b,0}|^2 |R_a|^2 |T_a|^2 [1 + \cos(2\sigma\pi x)] \end{aligned} \quad , \quad (8)$$

wobei die geometrische Wegdifferenz beim Durchgang durch Luft der optischen Wegdifferenz

$$x = 2(x_1 - x_2) \quad (9)$$

entspricht.

Der Faktor $2|\mathcal{E}_{b,0}|^2 |R_a|^2 |T_a|^2$ wird zu $S_{b,1,\sigma}$ für den unmodulierten und zu $S_{b,2,\sigma}$ für den modulierten Anteil zusammengefaßt. Die Anteile $S_{b,1,\sigma}$ und $S_{b,2,\sigma}$ sind hier identisch, werden jedoch getrennt benannt, um eine Analogie zu den anderen Strahlungstypen zu erhalten.

$$IFG_{b,\sigma}(x) \propto S_{b,1,\sigma} + S_{b,2,\sigma} \cos(2\pi\sigma x) \quad (10)$$

Für den balancierten Strahl wird also am Detektor ein konstanter Strahlungsbeitrag $S_{b,1,\sigma}$ und ein - aufgrund der Interferenzen - mit der Wellenzahl variierender Beitrag $S_{b,2,\sigma} \cos(2\pi\sigma x)$ beobachtet. Der balancierte Strahl kann ein Maximum an Modulationstiefe ($S_{b,2,\sigma} / S_{b,1,\sigma}$) von eins erreichen, da $S_{b,1,\sigma}$ und $S_{b,2,\sigma}$ gleich sind. Der Begriff 'balancierte' Strahlung drückt sich auch in der Identität von $S_{b,1,\sigma}$ und $S_{b,2,\sigma}$ aus.

3.1.2 Der unbalancierte Strahl – Detektorport

Der unbalancierte Strahl wird hauptsächlich durch Reflexionen und Eigenemission des Dwarfensters verursacht sowie durch die thermische Emissionen der Spiegeloberflächen (deren Reflexionsvermögen nicht exakt eins ist) zwischen IR-Detektor und Strahlteiler. Wie für den balancierten Strahl lassen sich die optischen Wege auch für den unbalancierten Strahl angeben (Abb. 8):

$\sin \theta_1 = n \sin \theta_2$ ergibt sich nun für die optischen Wegdifferenz zwischen zwei Strahlen bei Vielfachreflexion $n\epsilon_1 - \epsilon_2 = nd \cos \theta_2$.

$$\begin{aligned}
 OP_{u,1} &= (x_D - y \sin \theta_1 - \varepsilon_2) + 2n\varepsilon_i + 2(x_1 + y \sin \theta_1) + (x_D - y \sin \theta_1 - \varepsilon_2) \\
 &= 2x_1 + 2x_D + 2nd \cos \theta_2 \\
 OP_{u,2} &= (x_D - y \sin \theta_1 - \varepsilon_2) + 2(x_2 + y \sin \theta_1 + \varepsilon_2) + (x_D - y \sin \theta_1 - \varepsilon_2) \\
 &= 2x_2 + 2x_D
 \end{aligned} \tag{11}$$

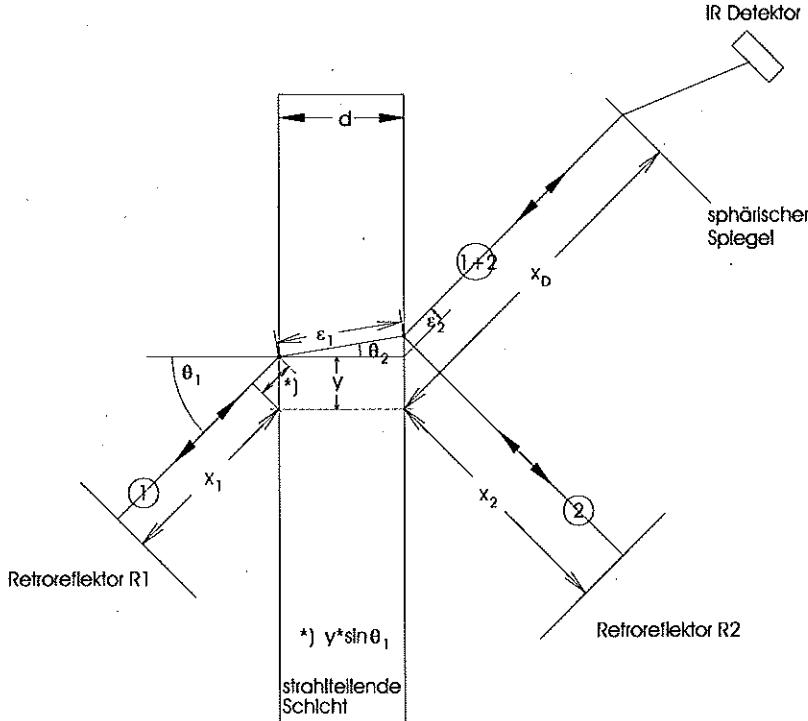


Abb. 8 Schematischer Strahlengang des unbalancierten Strahls in einem FTIR-Spektrometer.
Die Strahlungsquelle des Detektorports und die Vielfachreflexionen sind zur besseren Übersichtlichkeit nicht gezeichnet.

Im Fall der unbalancierten Strahlung durchtritt in einem Arm die Strahlung zweifach die strahlteilende Schicht, während die Teilstrahlung des anderen Armes zweifach reflektiert wird. Dadurch ergeben sich für die beiden Arme auch unterschiedliche Gesamtphasen. Analog zu Gl. (7) und Gl. (8) folgt für die Strahlungsintensität am Detektor

$$\begin{aligned}
 |\mathcal{E}_{u,1} + \mathcal{E}_{u,2}|^2 &= |\mathcal{E}_{u,0}|^2 \left| |T_a|^2 e^{i(2\pi\sigma OP_{u,1} + 2\varphi_{Ra})} + |R_a|^2 e^{i(2\pi\sigma OP_{u,2} + 2\varphi_{Ra})} \right|^2 \\
 &= |\mathcal{E}_{u,0}|^2 \left[|R_a|^4 + |T_a|^4 + 2|R_a|^2 |T_a|^2 [\cos(2\pi\sigma x + 2\varphi_{Ra} + \gamma - 2\varphi_{Ra})] \right]
 \end{aligned} \tag{12}$$

Mit den Phasenbeziehungen aus Gl. (2) und (4) folgt für den unbalancierten Strahl eine Phasenverschiebung des modulierten Signals von $2\varphi_{Ra} + \gamma - 2\varphi_{Ra} = \pi$, welches die Interferenzerscheinung gegenüber der balancierten Strahlung invertiert:

$$|\mathcal{E}_{u,1} + \mathcal{E}_{u,2}|^2 = |\mathcal{E}_{u,0}|^2 \left[|R_a|^4 + |T_a|^4 - 2|R_a|^2 |T_a|^2 \cos(2\pi\sigma x) \right]. \tag{13}$$

Auch hier erfolgt die Zusammenfassung des Faktors $|\mathcal{E}_{u,0}|^2 [|R_a|^4 + |T_a|^4]$ zu $S_{u,1,\sigma}$ für den konstanten Anteil und $2|\mathcal{E}_{u,0}|^2 |R_a|^2 |T_a|^2$ zu $S_{u,2,\sigma}$ für den sich mit der optischen Weglängendifferenz ändernden Anteil, so daß sich die Intensität am Detektor wie

$$IFG_{u,\sigma}(x) \propto S_{u,1,\sigma} - S_{u,2,\sigma} \cos(2\pi\sigma x) \tag{14}$$

darstellt. Da $S_{u,i,\sigma}$ und $S_{u,2,\sigma}$ unterschiedlich sind, kann nicht die maximale Modulationstiefe von eins erreicht werden, d.h. die somit 'unbalancierte' Strahlung trägt nicht so effizient wie die 'balancierte' Strahlung zum modulierten Interferogramm bei.

3.1.3 Strahlteileremission

Die strahlteilende Schicht des Strahlteilers selbst emittiert entsprechend ihrer Temperatur und ihres Emissionsvermögens. Diese thermische IR-Emission kann als Dipolstrahlung beschrieben werden. Es wird sich zeigen, daß das modulierte Signal im IR-Detektor nicht wie in Gl. (10) und (14) durch einen Kosinus-Term, sondern durch einen Sinus-Term beschrieben wird. Dies soll im folgenden näher untersucht werden.

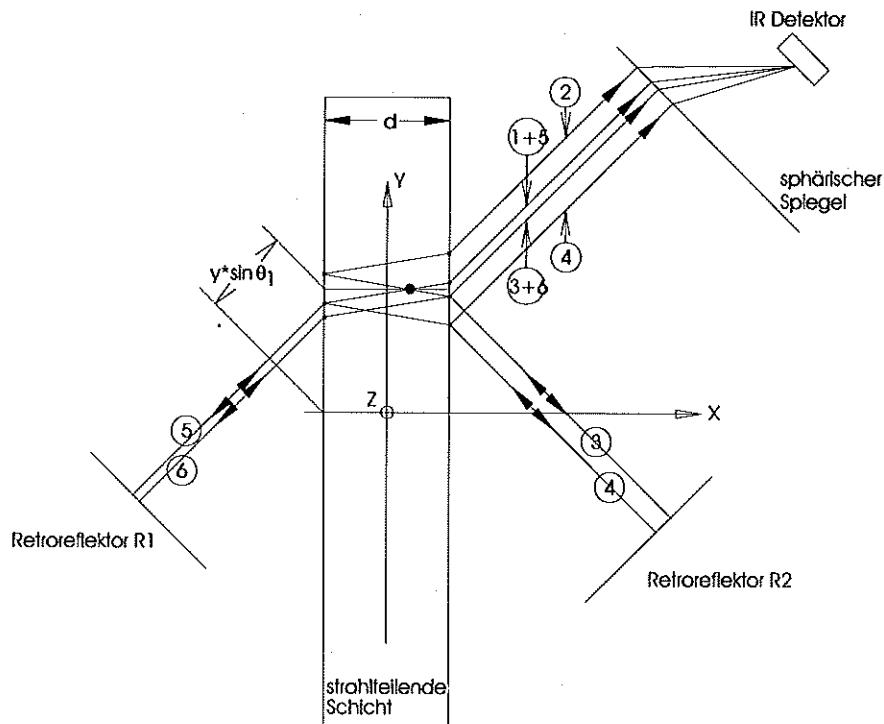


Abb. 9 Schematischer Strahlengang der Strahlteileremission in einem FTIR-Spektrometer. Die interferierenden Strahlengänge sind mit den Zeichen ① bis ⑥ indiziert. Die Vielfachreflexionen sind zur besseren Übersichtlichkeit nicht gezeichnet. Die Z-Achse steht senkrecht auf der Zeichenebene.

Für die Eigenemission in jedem Volumenelement des Strahlteilers müssen die elektrischen Felder der in Abb. 9 gezeigten Strahlengänge kohärent überlagert und die Absolutquadrate der Strahlungsintensitäten inkohärent sowohl über alle Polarisationsrichtungen addiert als auch über das vom IR-Detektor sichtbare Strahlteilervolumen integriert werden. Die Überlagerungen mit den Teilstrahlen ① und ② tragen nach Integration über y nicht mehr signifikant zum Ergebnis bei und werden daher auch nicht weiter betrachtet. Diese aufwendigen Kalkulationen [Trieschmann, Weddigen, 1999] werden an dieser Stelle nicht im Detail vollzogen, jedoch wird für die auf der Einfallsebene senkrecht stehenden elektrischen Feldvektoren das Ergebnis grob skizziert. Aufgrund der Emission der Volumenelemente werden deren Strahlungsbeiträge mit dem Index 'v' indiziert.

Die korrespondierenden, sich kohärent überlagernden Teilstrahlen ③ bis ⑥ lassen sich mit

$$\begin{aligned}
 OP_{v,3} &= 2x_2 + x_D + y \sin \theta_i + (n\epsilon_1 - \epsilon_2) \left(\frac{1}{2} - \frac{x_p}{d} \right) \\
 OP_{v,4} &= 2x_2 + x_D + y \sin \theta_i + (n\epsilon_1 - \epsilon_2) \left(\frac{1}{2} + \frac{x_p}{d} + 1 \right) \\
 OP_{v,5} &= 2x_1 + x_D + y \sin \theta_i + (n\epsilon_1 - \epsilon_2) \left(\frac{1}{2} + \frac{x_p}{d} + 1 \right) \\
 OP_{v,6} &= 2x_1 + x_D + y \sin \theta_i + (n\epsilon_1 - \epsilon_2) \left(\frac{1}{2} - \frac{x_p}{d} + 2 \right)
 \end{aligned} \tag{15}$$

beschreiben³. Der Emissionsort wird durch seine Koordinaten x_p , y_p , z_p beschrieben. Der Faktor $\frac{x_p}{d}$ gibt die relative x-Position bezüglich der Dicke der strahlteilenden Schicht an. Diese Punktquellen (Dipolstrahler) emittieren in alle Raumrichtungen. Die gesamte Strahldichte erhält man durch Integration über den vom Interferometer erfaßbaren Raumwinkelbereich (bei MIPAS-B2 beträgt dieser $1,2 \cdot 10^{-4}$ sr). Da der Raumwinkelbereich jedoch klein ist, kann die Intensität in diesem Bereich als unabhängig vom Raumwinkel angenommen werden. Zur Bestimmung der Phasenlage wird daher nur die Gesamtstrahldichte proportionale Größe für ein Raumwinkelement $d\omega$ angegeben. Die Amplituden von $\mathcal{E}_{v,3}$ bis $\mathcal{E}_{v,6}$ hängen direkt von der Richtung des Dipols ab. Wie bereits erwähnt (Abschnitt 3.1) wird hier das elektrische Feld als senkrecht zur Einfallsebene betrachtet. Es kann jedoch gezeigt werden, daß ein Integral über alle Ausrichtungen des Dipols zum strukturell gleichen Ergebnis führt.

$$\begin{aligned}
 &\frac{\partial}{\partial \omega} |\mathcal{E}_{v,3} + \mathcal{E}_{v,4} + \mathcal{E}_{v,5} + \mathcal{E}_{v,6}|^2 \\
 &= \frac{\partial}{\partial \omega} |\mathcal{E}_{v,0}|^2 \left| \begin{aligned}
 &|T_i||R_a| e^{i(2\pi\sigma OP_{v,3} + \phi_{ri} + \phi_{ra})} + |R_i||T_a| e^{i(2\pi\sigma OP_{v,4} + \phi_{ri} + \phi_{ra})} + \\
 &+ |T_i||T_a| e^{i(2\pi\sigma OP_{v,5} + \phi_{ri} + \phi_{ra})} + |R_i||R_a| e^{i(2\pi\sigma OP_{v,6} + \phi_{ri} + \phi_{ra})}
 \end{aligned} \right|^2
 \end{aligned} \tag{16}$$

Anhand der Phasenbeziehungen von Gl. (2) und (4) läßt sich obige Gleichung zu folgender Gleichung umformen:

$$\begin{aligned}
 &\frac{\partial}{\partial \omega} |\mathcal{E}_{v,3} + \mathcal{E}_{v,4} + \mathcal{E}_{v,5} + \mathcal{E}_{v,6}|^2 \\
 &= \frac{\partial}{\partial \omega} |\mathcal{E}_{v,0}|^2 \left[\begin{aligned}
 &|T_a|^2 |R_i|^2 + |R_a|^2 |T_i|^2 + |R_a|^2 |R_i|^2 + |T_a|^2 |T_i|^2 + \\
 &+ 2|T_a|^2 |R_i| |T_i| \cos(\gamma(x_p/d - 1/2)) + \\
 &+ 2|R_a|^2 |R_i| |T_i| \cos(\gamma(x_p/d + 1/2)) + \\
 &+ 2|R_a| |T_a| |R_i| |T_i| \sin(2\sigma\pi x) \cos(\gamma/2) + \\
 &+ 2|R_a| |T_a| |R_i|^2 \sin(2\sigma\pi x - \gamma x_p/d) + \\
 &+ 2|R_a| |T_a| |T_i|^2 \sin(2\sigma\pi x + \gamma x_p/d)
 \end{aligned} \right]
 \end{aligned} \tag{17}$$

Bislang wurden nur die elektrischen Felder der unterschiedlichen Strahlengänge überlagert und führten zu einer Interferenzerscheinung. Da die strahlteilende Schicht im ganzen Volumen emittiert, muß über dieses integriert werden. Nun überlagern sich jedoch nicht mehr die elektrischen Felder, sondern die Interferenzerscheinungen selbst, da die einzelnen Volumina inkohärent emittieren. Dabei geht die Integration über die Y-Z-Fläche nur als

³ x_1 , x_2 und x_D sind wie in Abb. 8 definiert.

multiplikativer Faktor ein, während die Integration über die X-Koordinate explizit ausgeführt werden muß. Um den Effekt der Strahlteileremission greifbarer zu machen, wird, anstatt von $x_p = -\frac{d}{2}$ bis $\frac{d}{2}$ zu integrieren, erst die Summe der Interferenzen gebildet, die zur Mitte der strahlteilenden Schicht symmetrisch sind ($x_{p1} = -x_{p2}$, $y_{p1} = y_{p2}$, $z_{p1} = z_{p2}$). Diese wird dann später von $x_p = 0$ bis $\frac{d}{2}$ integriert⁴ zu

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial \omega} |\mathcal{E}_{v,3} + \mathcal{E}_{v,4} + \mathcal{E}_{v,5} + \mathcal{E}_{v,6}|^2 \\ &= 2 * \frac{\partial}{\partial \omega} |\mathcal{E}_{v,0}|^2 \left[\underbrace{\left| R_i \right|^2 + \left| T_i \right|^2 + 2 * |R_i||T_i| \cos(\gamma/2) \cos(\gamma x_p/d)}_{\text{unmoduliert}} \right. \\ & \quad \left. + 2|R_a||T_a| * \underbrace{\left[\left(\left| R_i \right|^2 + \left| T_i \right|^2 \right) \cos(\gamma x_p/d) \right. \right. \\ & \quad \left. \left. + 2|R_i||T_i| \cos(\gamma/2) \right] \sin(2\sigma\pi x) \right] \right] . \end{aligned} \quad (18)$$

Damit zeigt sich auch, daß die Phasenlage des modulierten Signals der Strahlteileremission bezüglich dem Signal der balancierten Strahlung um den Phasenwinkel $\pi/2$ verschoben ist, welche sich durch den Sinus-Term des modulierten Signals ausdrückt.

Abschließend erfolgt die Integration über x_p , welche einen unmodulierten Anteil von

$$S_{v,1,\sigma} = d \frac{\partial}{\partial \omega} |\mathcal{E}_{v,0}|^2 \left[\left| R_i \right|^2 + \left| T_i \right|^2 + \frac{2}{\gamma} |R_i||T_i| \sin(\gamma) \right] \quad (19)$$

ergibt und eine Amplitude des modulierten Anteiles von

$$S_{v,2,\sigma} = 4d \frac{\partial}{\partial \omega} |\mathcal{E}_{v,0}|^2 |R_a||T_a| \left[|R_i||T_i| \cos\left(\frac{\gamma}{2}\right) + \frac{1}{\gamma} \left(\left| R_i \right|^2 + \left| T_i \right|^2 \right) \sin\left(\frac{\gamma}{2}\right) \right]. \quad (20)$$

Die Intensität der Strahlteileremission am Detektor formuliert sich dann wie folgt:

$$IFG_{v,\sigma}(x) \propto S_{v,1,\sigma} + S_{v,2,\sigma} \sin(2\pi\sigma x) . \quad (21)$$

Für die bislang nicht betrachtete, in der Einfallsebene liegende Polarisationsrichtung ergibt sich bezüglich der Phasenlage das gleiche Ergebnis, jedoch sind die Reflexions- und Transmissionskoeffizienten verschieden.

Strahlungssumme aller Ports

Das Interferogramm erhält man aus der Summe der Teilinterferogramme $S_{b/u/v,1/2}$ der unterschiedlichen Quellen, integriert über alle spektralen Anteile. Bislang wurden die Interferogrammanteile als Funktion von x bei festgehaltener Wellenzahl σ angegeben. Im folgenden wird der Übergang zu einem kontinuierlichen Spektrum vollzogen, so daß über alle Wellenzahlen zu integrieren ist:

⁴ Zur Vereinfachung der Ausdrücke wird von der Beziehung $|T_a|^2 + |R_a|^2 = 1$ Gebrauch gemacht, die sich direkt aus den Reflexions- und Transmissionskoeffizienten aus Fußnote 1 herleitet. Diese Beziehung gilt, weil nach der Reflexion R_a an und der Transmission T_a durch den Strahlteiler ein gleicher Brechungsindex vorliegt. Bei der internen Emission wechselt jedoch der Brechungsindex für R_i und T_i , so daß für diese Koeffizienten obige Beziehung keine Gültigkeit hat.

$$\text{IFG}(x) = \underbrace{\int_0^{\infty} S_{b,l}(\sigma) + S_{u,l}(\sigma) + S_{v,l}(\sigma) d\sigma}_{\text{unmoduliert}} + \underbrace{\int_0^{\infty} (S_{b,2}(\sigma) - S_{u,2}(\sigma)) \cos(2\pi\sigma x) + S_{v,2}(\sigma) \sin(2\pi\sigma x) d\sigma}_{\text{moduliert}} . \quad (22)^5$$

Der unmodulierte Term des Interferogramms aus Gl. (20) ist unabhängig von der Weglängendifferenz x und stellt den Gleichlichtanteil dar. Dieser kann instrumentell durch einen Hochpaßfilter, z.B. im Detektorvorverstärker, eliminiert werden. Von daher entfällt er zukünftig auch in allen Gleichungen; genauso wird auf den Index 2 der einzelnen Teilintensitäten verzichtet. Das Interferogramm schreibt sich dann zu:

$$\text{IFG}(x) = \int_0^{\infty} (S_b(\sigma) - S_u(\sigma)) \cos(2\pi\sigma x) d\sigma + \int_0^{\infty} S_v(\sigma) \sin(2\pi\sigma x) d\sigma . \quad (23)$$

Die Integrale können im Integrationsintervall auf $-\infty$ bis $+\infty$ erweitert werden, wenn folgende Symmetrien für negative Wellenzahlen postuliert werden:

S_b, S_u achsensymmetrisch:

$$\begin{aligned} S_b(-\sigma) &= S_b(\sigma) \\ S_u(-\sigma) &= S_u(\sigma) \end{aligned} \quad (24)$$

S_v punktsymmetrisch:

$$S_v(-\sigma) = -S_v(\sigma) \quad (25)$$

Dabei stellen die Intensitäten für negative Wellenzahlen rein mathematische Größen dar und haben keine physikalische Bedeutung. Das Integral über alle Wellenzahlen (die Gesamtintensität des Spektrums) muß aber erhalten bleiben. Deshalb halbieren sich die spektralen Intensitäten. Dieser Faktor kann jedoch im folgenden unberücksichtigt bleiben, da er in die Kalibrierung eingehen wird. Gl. (23) kann nun zu einer einzigen, komplexwertigen Fouriertransformation zusammengefaßt werden:

$$\text{IFG}(x) = \int_{-\infty}^{\infty} (S_b(\sigma) - S_u(\sigma) + iS_v(\sigma)) e^{i2\pi\sigma x} d\sigma \quad (26)$$

Das Interferometer fungiert somit als ein komplexer Fouriertransformator der einfallenden Strahlung. Auf dieser Eigenschaft gründet sich auch die Bezeichnung Fourierspektroskopie.

Die gesamte einfallende Strahlung wird komplex definiert, wobei nach den Gl. (24) und (25)

$$S(-\sigma) = S^*(\sigma) \quad \text{mit } S^* \text{ als komplexe konjugierte von } S \quad (27)$$

gilt.

Umgekehrt kann das Interferogramm nun aber auch mathematisch Fourier-rücktransformiert werden. Da die Fouriertransformation umkehrbar ist, erhält man dann das Interferometer-Eingangssignal, das Spektrum, als Fourier-Rücktransformierte des Interferogramms IFG(x):

$$\begin{aligned} S(\sigma) &= \text{FT}^{-1}[\text{IFG}(x)] = \int_{-\infty}^{\infty} \text{IFG}(x) e^{-i2\pi\sigma x} dx \\ &= S_b(\sigma) - S_u(\sigma) + iS_v(\sigma) \end{aligned} \quad (28)$$

⁵ Der Parameter σ des als bislang für eine monochromatische Strahlung betrachteten Interferogramms ist hier zu einer Variablen des Spektrums geworden.

Gl. (28) gibt letztendlich die Beziehung an, wie aus einem Interferogramm das Spektrum zurückgewonnen wird.

Die Anteile der Strahlteileremission S_v werden auf die imaginäre Achse abgebildet und sind somit eindeutig von der balancierten Strahlung (Atmosphärenport) S_b und der unbalancierten Strahlung (Detektorport) S_u unterscheidbar (Abb. 10). Da die balancierte und unbalancierte Strahlung beide parallel zur reellen Achse verlaufen, werden sie in Zukunft häufig zu S_{bu} mit

$$S_{bu} = S_b - S_u \quad (29)$$

zusammengefaßt.

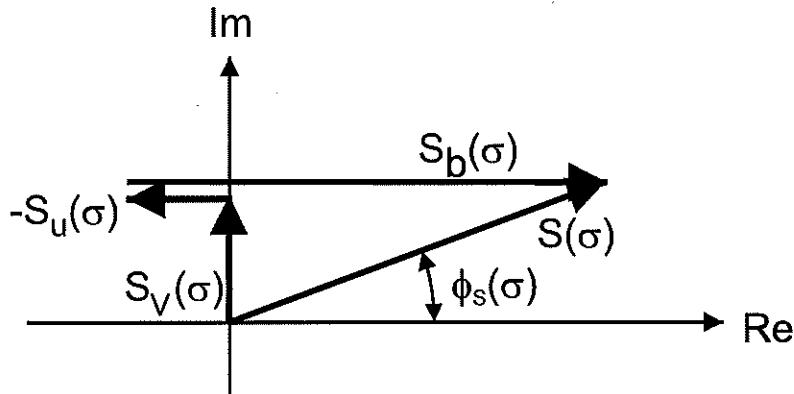


Abb. 10 Strahlungsverteilung aus den einzelnen Ports für eine spezifische Wellenzahl in der komplexen Ebene. Es wird von keinen weiteren Phasenfehlern ausgegangen, so daß der balancierte Strahlungsbeitrag S_b parallel zur reellen Achse zu positiven Werten zeigt. Der unbalancierte Beitrag S_u ist um 180° gedreht, aber ebenfalls parallel zur reellen Achse. Die Strahlteileremission S_v verschiebt jedoch den Vektor S_{bu} in Richtung der imaginären Koordinate, so daß der resultierende Gesamtvektor S komplexer Natur ist. Dies bewirkt einen natürlichen Phasenwinkel von ϕ_S .

Um einen Eindruck von den einzelnen Strahlungsbeiträgen S_{bu} und S_v zu gewinnen, sind in Abb. 11 exemplarisch Spektren im Wellenzahlbereich von 760 bis 1000 cm⁻¹ dargestellt. Die Einheit LSB beschreibt die willkürlichen Einheiten der Messungen, die sich in ganzzahligen Vielfachen der niedrigsten aufzulösenden Einheit ('Least Significant Bit') des Analog-Digital Konverters widerspiegelt.

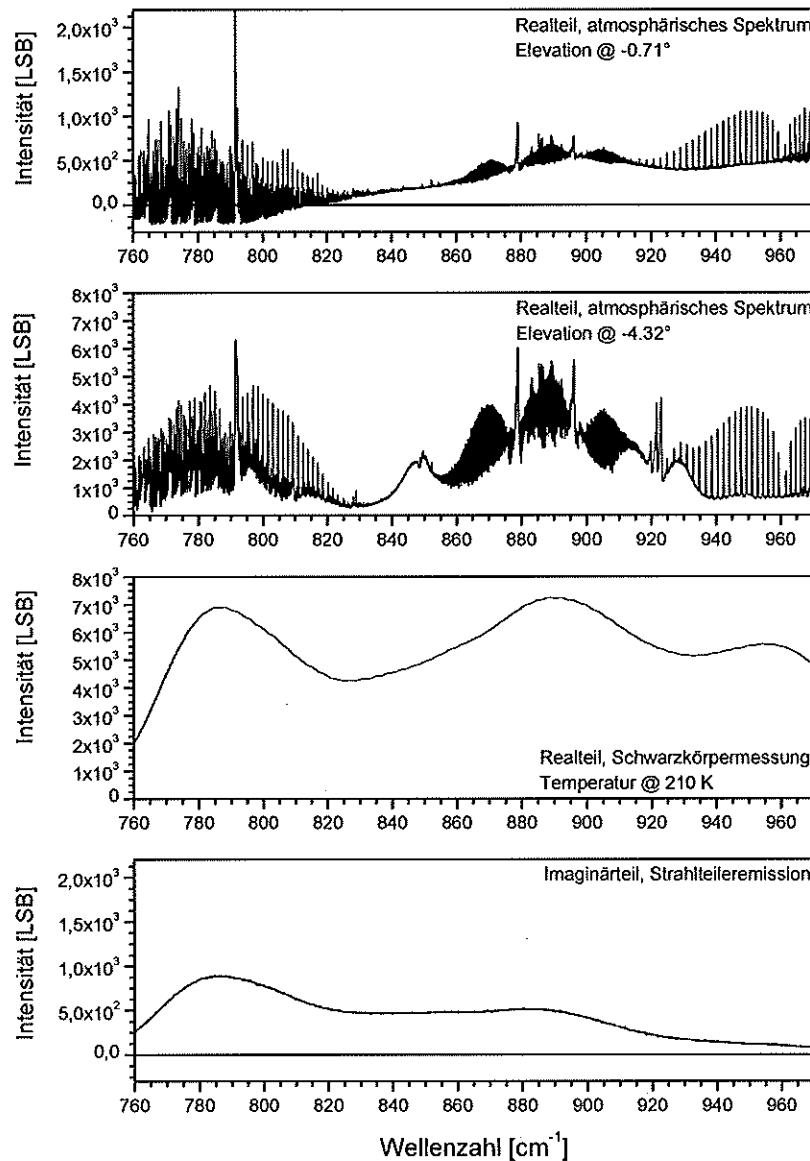


Abb. 11 Typische reale und imaginäre Anteile im Interferometer MIPAS-B2.

- Ganz oben: Reelles Spektrum S_{bu} der Atmosphäre unter dem höchsten Elevationswinkel der Horizontsondierungssequenz von $-0,71^\circ$ aufgenommen. Die Basislinie wird hauptsächlich vom Fenster (ZnSe) des Detektordewars und den Spiegeln im Instrument bestimmt, wobei am linken Rand bis 820 cm^{-1} die unbalancierte Strahlung dominiert, was an der negativen Basislinie sichtbar ist.
2. von oben: wie oben, jedoch bei einem niedrigeren Elevationswinkel von $-4,32^\circ$.
2. von unten: Reelles Schwarzkörperspektrum S_b-S_u der Strahlungstemperatur von 210 K.
- Ganz unten: Imaginäre Strahleiteremission S_v bei einer Eigentemperatur von 210 K. Zu beachten sind die unterschiedlichen Ordinatenkalierungen der Abbildung.
 Die Messungen wurden während einer Meßkampagne in Kiruna am 24. März 1997 aufgenommen.

3.2 Die Digitalisierung und Begrenzung von Interferogrammen

Dieser Abschnitt legt in komprimierter Form einige Zusammenhänge dar, die für das weitere Verständnis der Arbeit hilfreich sind. Es wird die Auswirkung der Digitalisierung der Interferogramme durch die Elektronik besprochen. Dies bewirkt eine Periodizität und bei reellen Interferogrammen eine wiederkehrende Spiegelung des Spektralbereichs, welches 'Aliasing' genannt wird. Da die Interferogrammaufnahme mechanisch nicht unendlich ausgedehnt sein kann, wird die Auswirkung dieser Begrenzung auf das Spektrum angegeben. Es wird jedoch darauf verzichtet, diese Zusammenhänge eingehend zu erläutern, da es sich um klassische Zusammenhänge der Fourierspektroskopie handelt, die in der einschlägigen Literatur nachzulesen sind. An dieser Stelle seien Brault [Brault,1990] und Vanasse, Sakai [Vanasse,Sakai,1967] erwähnt, die auf diese Themen ausführlich eingehen.

Digitalisierung

Bisher wurden Interferogramm und Spektrum als kontinuierliche Funktionen von der optischen Wegdifferenz x bzw. der Wellenzahl σ betrachtet. Dies ist in der Praxis nicht gültig, da die kontinuierlichen, analogen Daten nur zu bestimmten, diskreten Ortspunkten abgetastet werden können. Man spricht von einer 'Digitalisierung' des analogen Signals. Das Triggersignal zum äquidistanten Digitalisieren wird beim MIPAS-Interferometer durch das Referenzinterferogramm eines HeNe-Lasers erzeugt, dessen Kohärenzlänge ein ausgedehntes Interferogramm in Form einer harmonischen Schwingung über den gesamten optischen Weg garantiert. Bei jedem aufsteigenden Nulldurchgang dieses Interferogramms wird eine Digitalisierung ausgelöst. Die Digitalisierungspunkte des IR-Interferogramms haben somit räumlich äquidistante Weglängenabstände von 633 nm. Die räumlich äquidistante digitale Abtastung kann mathematisch über eine Multiplikation des über die Weglängendifferenz x kontinuierlichen Interferogramms $IFG_{kont}(x)$ mit einer Kamm-distribution $COMB_{dx}(x)$ dargestellt werden:

$$S_{\text{digit}}(\sigma) = \text{FT} \left[\underbrace{IFG_{\text{kont}}(x) * COMB_{dx}(x)}_{IFG_{\text{digit}}(x)} \right] \quad (30)$$

$$\text{mit } COMB_{dx}(x) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \delta(x - n dx), \quad n \in \mathbb{Z}$$

Dieses digitalisierte Spektrum entspricht dem Ergebnis einer diskreten Fouriertransformation des digitalisierten Interferogramms⁶

$$S_{\text{digit}}(md\sigma) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{n=-\frac{N}{2}}^{\frac{N}{2}-1} IFG_{\text{digit}}(ndx) e^{-\frac{i2\pi mn}{N}} \quad (31)$$

mit $m \in \mathbb{Z}$, der Anzahl Punkte im Interferogramm $N \in \mathbb{N}$ und $d\sigma * dx = \frac{1}{N}$.

⁶ Die Normierung weicht von der üblichen Konvention ab, welche die Vorwärtstransformation mit $1/N$ und die Rückwärtstransformation mit eins normiert. Um mit der integralen Schreibweise konform zu sein, werden in dieser Arbeit sowohl die Vorwärts- und die Rückwärtstransformation mit $1/\sqrt{N}$ normiert.

Durch die in der Datenerfassung nachfolgenden analogen elektrischen Filter und Verstärker wird das Interferogramm mit der Transformierten der Filterfunktionen⁷ $F_{\text{samp}}(\sigma)$ gefaltet

$$\text{IFG}_{\text{digit}}(x) = [\text{IFG}_{\text{kont}}(x) \otimes \text{FT}[F_{\text{samp}}(\sigma)]] * \text{COMB}_{dx}(x) . \quad (32)$$

Entsprechend dem Faltungstheorem wird das Spektrum mit der Filterfunktion multipliziert und mit der Fouriertransformierten der Kammdistribution, die wiederum eine Kammdistribution ist, gefaltet und ergibt

$$S_{\text{digit}}(\sigma) = [S_{\text{kont}}(\sigma) * F_{\text{samp}}(\sigma)] \otimes \left[\frac{1}{dx} \text{COMB}_{\frac{1}{dx}}(\sigma) \right] . \quad (33)$$

Aliasing

Durch die Faltung mit der Kammdistribution ist das resultierende Spektrum eine $1/dx$ -periodische Funktion. Damit keine Überlappungen der sich periodisch wiederholenden Spektren auftreten, muß der Spektralbereich $[\sigma_1, \sigma_2]$ des zugrundeliegenden Spektrums durch optische Filter auf

$$\sigma_1 > \ell \frac{1}{2dx} , \quad \sigma_2 < (\ell + 1) \frac{1}{2dx} , \quad \ell \in \mathbb{N}_0 \quad (34)$$

begrenzt werden [Gulde,Trieschmann,1989], wobei ℓ den Filterfaktor des gewählten Spektralbereichs angibt. Das Spektrum wird immer im Bereich von $[0, \sigma_2 - \sigma_1]$ berechnet oder in diesen Bereich eingespiegelt. Die maximale Bandbreite, die so untersucht werden kann, wird nach Gl. (32) durch den Abstand dx der Datenpunkte des Interferogramms festgelegt [Connes,1963]:

$$\sigma_2 - \sigma_1 \leq \frac{1}{2dx} = \sigma_{\text{Nyquist}} \quad (35)$$

Die Größe $1/2dx$ wird als 'Nyquistwellenzahl' σ_{Nyquist} bezeichnet und steht für die maximale Breite des Spektralbereichs, die bei einem Digitalisierungsabstand von dx ausgemessen werden kann. Ist die Breite des betrachteten Spektralbereichs kleiner als die Nyquistwellenzahl, so kann der Digitalisierungsabstand entsprechend den technischen Möglichkeiten des Gerätes vergrößert werden. Im umgekehrten Fall, wenn der Spektralbereich größer als die Nyquistwellenzahl ist, muß dieser optisch eingeschränkt werden, damit keine Spektralbereiche eingespiegelt werden. Aus Gl. (31) und Gl. (32) lassen sich folgende Symmetrien ableiten, die unter dem Begriff 'Aliasing' zusammengefaßt werden:

Für gerade Filterfaktoren ℓ gilt

$$\begin{aligned} S(\ell * \sigma_{\text{Nyquist}}) &= S(0) \\ S((\ell + 1) * \sigma_{\text{Nyquist}}) &= S(\sigma_{\text{Nyquist}}) \end{aligned} \quad (36)$$

und für ungerade ℓ

⁷ Bei einem annähernd konstanten Vorschub lassen sich die frequenzabhängigen Filter in wellenzahlabhängige Filterfunktionen mit

$$F_{\text{samp}}(\sigma) = F_{\text{samp}}\left(\frac{v}{\frac{dx}{dt}}\right) \quad \text{mit} \quad v : \text{Frequenz} \quad \frac{dx}{dt} : \text{Vorschubgeschwindigkeit}$$

überführen. Spikes im Spektrum können durch einen fluktuierenden Vorschub hervorgerufen werden [Zachor,1977].

$$\begin{aligned} S((\ell+1) * \sigma_{\text{Nyquist}}) &= S(0) \\ S(\ell * \sigma_{\text{Nyquist}}) &= S(\sigma_{\text{Nyquist}}) \end{aligned} \quad . \quad (37)$$

Begrenzung der Interferogrammlänge und Definition der Apparatefunktion

Die maximale Weglängendifferenz Λ der beiden Arme des Interferometers wird durch die Mechanik des Instrumentes definiert, d.h. das Interferogramm wird auf eine endliche Länge Λ begrenzt. Mathematisch kann diese Begrenzung des Interferogramms auf die Länge Λ durch eine Multiplikation des Interferogramms mit einer Rechteckfunktion $\text{RECT}[x/2\Lambda]$ (siehe Anhang 11.5) beschrieben werden. Das Spektrum S_Γ aus dem begrenzten Interferogramm ergibt sich mit

$$\begin{aligned} S_\Gamma(\sigma) &= \int_{-\infty}^{\infty} \text{IFG}(x) \text{RECT}\left[\frac{x}{2\Lambda}\right] e^{-i2\pi\sigma x} dx \\ &= S(\sigma) \otimes \frac{\sin(2\pi\Lambda\sigma)}{\pi\sigma} = S(\sigma) \otimes 2\Lambda \text{SINC}(2\pi\Lambda\sigma) \end{aligned} \quad . \quad (38)$$

Das Spektrum S_Γ ergibt sich folglich aus dem Spektrum S eines nicht-längenbegrenzten Interferogramms gefaltet mit einer SINC-Funktion. Dieser wichtige Zusammenhang definiert die bestmögliche Apparatefunktion eines Fourierspektrometers. Die Apparatefunktion ist die Antwortfunktion eines Fourierspektrometers auf einen monochromatisch einfallenden Lichtstrahl, dessen Spektrum mathematisch eine Deltadistribution

$$S_{\text{monochr.}}(\sigma) = I_0 \delta(\sigma - \sigma_0) \quad (39)$$

darstellt. Wird das monochromatische Spektrum in Gl. (38) eingesetzt, so erhält man die ideale Apparatefunktion $\text{ILS}(\sigma)$ eines Michelson-Interferometers mit

$$\text{ILS}(\sigma) = \frac{S_{\text{F,monochr.}}}{2I_0\Lambda} = \text{SINC}(2\pi\Lambda(\sigma - \sigma_0)) \quad . \quad (40)$$

Die spektrale Auflösung Γ eines Michelson-Interferometers ist definiert als der Abstand zwischen Maximum und erster Nullstelle der Apparatefunktion und gibt gleichzeitig den engsten Abstand unabhängiger spektraler Stützstellen an⁸:

$$\Gamma = \frac{1}{2\Lambda} \quad . \quad (41)$$

Die Auflösung bzw. die Apparatefunktion aus Gl. (40) ist nur für ein ideales Interferometer gültig, dessen interferierende Strahlung vollständig kollimiert ist. Experimentell ist dies jedoch nicht zu erreichen. Die sich daraus ergebenden Abweichungen der Apparatefunktion werden in Kapitel 8 näher beleuchtet.

Folgende Eigenschaften lassen sich zusammenfassen:

⁸ Neben der Auflösung Γ existiert eine weitere wichtige Größe, die Halbwertsbreite FWHM (Full Width Half Maximum) der Apparatefunktion, die bei Apparatefunktionen Verwendung findet, bei denen keine Nullstelle existiert, oder bei denen diese kein Gütekriterium der eigentlichen Linie darstellt. Bei einer Apparatefunktion mit einem SINC-Profil beträgt die Halbwertsbreite $\text{FWHM}_{\text{SINC}} \approx 1,21 * \Gamma$.

- Wird das Interferogramm mit dem Abstand dx digitalisiert, so beträgt der maximale Spektralbereich des Spektrums $\frac{1}{2dx} = \sigma_{\text{Nyquist}}$.
- Das aus der Fouriertransformierten des digitalisierten Interferogramms gewonnene Spektrum wird durch Aliasing in den spektralen Bereich von 0 bis σ_{Nyquist} eingespiegelt.
- Der Abstand der spektralen Stützstellen beträgt

$$d\sigma = \frac{1/(2dx)}{N/2} = \frac{1}{Ndx} . \quad (42)$$

- Aus N reellen Punkten im Interferogramm lassen sich $N/2$ unabhängige komplexe Fourierkoeffizienten des Spektrums bestimmen.

3.3 Das spektrale Rauschen

Jedes Interferogramm beinhaltet Rauschen, dessen Größe durch die Standardabweichung $\tilde{\sigma}$ von Punkten mit gleicher Weglängendifferenz x sukzessiv aufgenommener Interferogramme berechnet werden kann. Die dominierende Rauschquelle sollte das statistische Rauschen der auf den Detektor fallenden Photonen sein. Das Photonenrauschen ist direkt proportional zur Wurzel der Anzahl einfallender Photonen. In diesem Abschnitt werden die Auswirkungen des Photonenrauschens im Interferogramm auf das Spektrum charakterisiert. Bei Fourierspektrometern – und speziell bei Emissionsgeräten – dominiert die Anzahl der Photonen des Gleichlichtanteils vom Detektor über die des modulierten Interferogrammsignals (Abb. 12). Dabei sind diesem Detektorgleichlichtanteil einerseits die Gleichlichtanteile der balancierten und unbalancierten Strahlung und der Strahlteileremission (Gl. (22)) zuzurechnen und andererseits die unmodulierte Hintergrundstrahlung, d.h. die Geräteemission, die in den Strahlengang zwischen Strahlteiler und Detektor eingestreut bzw. von optischen Komponenten emittiert wird.

Da der Detektorgleichlichtanteil über die Aufnahmedauer mehrerer Interferogramme unverändert ist, wird dieser aus dem Interferogramm durch einen Hochpaßfilter eliminiert. Dadurch trägt er zwar nicht mehr zum Spektrum bei; das Rauschen dieses Anteils wird allerdings nicht eliminiert und bleibt im betrachteten Spektralbereich im Interferogramm erhalten. Ist dieses Photonenrauschen der dominierende Rauschanteil, so können Detektor- und das Verstärkerrauschen vernachlässigt werden, und man spricht von 'Hintergrund-Photonenrausbegrenzung', bzw. von BLIP (Background Limited Infrared Photodetectors, s.a. [Kleinert, 1998; Keyes, 1980]).

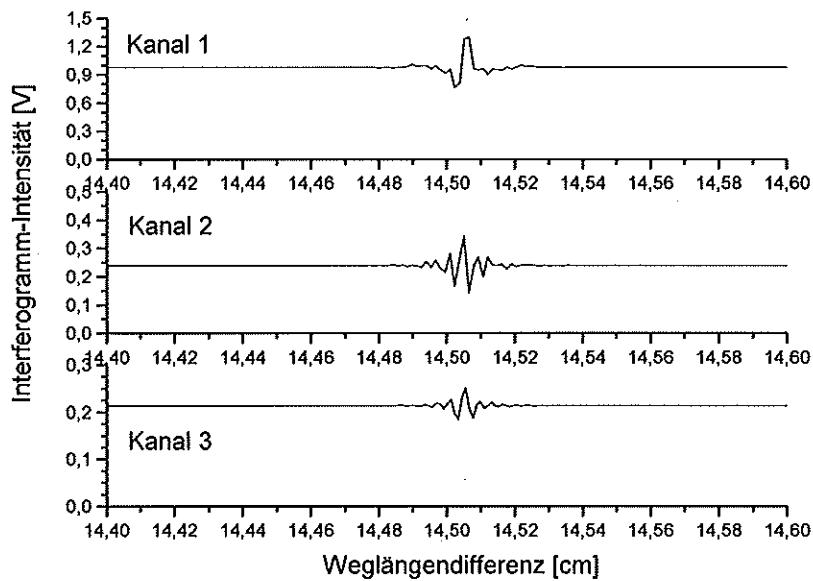


Abb. 12 Die Detektorsignale für die Kanäle 1 bis 3 des MIPAS-B2. Das Detektorsignal setzt sich aus dem Gleichlichtanteil und dem Interferogramm zusammen.

Dargestellt ist ein Ausschnitt des Interferogramms, welches sich im Ganzen über 29 cm optischen Hub erstreckt. Die Kurve für Kanal 4 ist nicht dargestellt, da sich bei ihr das Signal in dieser Darstellung nicht aus dem Rauschen sichtbar heraushebt.

Im folgenden werden die Auswirkungen des Photonenauschens auf das Spektrum untersucht [Friedle,1993]. Das Interferogramm kann aus der Summe des Erwartungswertes E , hier des Mittelwertes über alle Interferogramme, und dem Rauschanteil im Interferogramm IFG_{rau} mit

$$IFG(x) = E[IFG(x)] + IFG_{rau}(x) \quad (43)$$

gebildet werden. Da die Fouriertransformation eine lineare Operation darstellt, kann das Rauschspektrum aus Gl. (43) separat aus der Fouriertransformierten des Rauschanteils des Interferogramms gewonnen werden. Mit der diskreten Fouriertransformation (Gl. (31)) ergibt sich das Rauschspektrum zu

$$S_{rau}(md\sigma) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{n=-\frac{N}{2}}^{\frac{N}{2}-1} IFG_{rau}(ndx) e^{-\frac{i2\pi mn}{N}} \quad \text{mit } m \in \mathbb{Z}, N \in \mathbb{N}. \quad (44)$$

Die Standardabweichung des Signals über viele Spektren bei festgehaltener Wellenzahl ist letztendlich das Maß für das Rauschen. Sind die Werte von $IFG_{rau}(0)$, $IFG_{rau}(1*dx)$, ..., $IFG_{rau}(N/2*dx)$ statistisch voneinander unabhängig, dann addieren sich die Standardabweichungen $\tilde{\sigma}$ über alle Ortspunkte in Gl. (44) quadratisch⁹ [Mildenberger, 1986]. Dabei müssen allerdings die einzelnen Interferogrammpunkte entsprechend ihrem Beitrag, den sie zum Spektrum liefern, gewichtet werden. Dies wird durch die Sinus- und

⁹ Die Standardabweichung $\tilde{\sigma}$ über C Interferogramme für alle Ortspunkte ist durch $\tilde{\sigma}^2(x) = \frac{1}{C} \sum_{i=1}^C (y_i(x) - E[y_i(x)])^2$ gegeben, wobei $E[x_i]$ den Mittelwert von x beim Index i repräsentiert. Im Fall obiger Betrachtungen ist IFG_{rau} gleich der Differenz zwischen der Messung und deren Erwartungswert.

Kosinus-Multiplikatoren beschrieben (Gl. (44)). Die Standardabweichungen der Punkte des Rauschspektrums können aus den Standardabweichungen der Interferogrammpunkte durch

$$\begin{aligned}\tilde{\sigma}^2(\operatorname{Re}[S_{\text{rau}}(m\delta\sigma)]) &= \frac{1}{N} \sum_{n=-\frac{N}{2}}^{\frac{N}{2}-1} \tilde{\sigma}^2(\operatorname{IFG}_{\text{rau}}(ndx)) \cos^2\left(\frac{2\pi mn}{N}\right) \\ \tilde{\sigma}^2(\operatorname{Im}[S_{\text{rau}}(m\delta\sigma)]) &= \frac{1}{N} \sum_{n=-\frac{N}{2}}^{\frac{N}{2}-1} \tilde{\sigma}^2(\operatorname{IFG}_{\text{rau}}(ndx)) \sin^2\left(\frac{2\pi mn}{N}\right)\end{aligned}\quad (45)$$

gewonnen werden. Ein stationäres Rauschverhalten kann vorausgesetzt werden, d.h. daß das Rauschen sein statistisches Verhalten nicht ändert und im Verhältnis zur Messung lange andauert. Bei einer konstanten optischen Weglängenänderung über der Zeit, und damit einer konstanten Integrationszeit für jeden Digitalisierungspunkt, ergibt sich für jeden Punkt die gleiche Rauschleistung. Das erhöhte Photonenrauschen beim Interferogrammaximum erstreckt sich nur über einen kleinen Bruchteil des Interferogramms und kann deshalb unberücksichtigt bleiben. Somit kann die Beziehung

$$\tilde{\sigma}^2(\operatorname{IFG}_{\text{rau}}(x)) = \tilde{\sigma}^2(\operatorname{IFG}_{\text{rau}}) = \text{const.} \quad (46)$$

angenommen werden.

Aus Gl. (45) ergibt sich¹⁰

$$\begin{aligned}\tilde{\sigma}^2(\operatorname{Re}[S_{\text{rau}}(m\delta\sigma)]) &= \tilde{\sigma}^2(\operatorname{IFG}_{\text{rau}}) \frac{2}{N} \sum_{n=0}^{\frac{N}{2}-1} \cos^2\left(\frac{2\pi mn}{N}\right) \\ &= \frac{1}{2} \begin{cases} \tilde{\sigma}^2(\operatorname{IFG}_{\text{rau}}) & \text{für } m \neq 0 \\ 2\tilde{\sigma}^2(\operatorname{IFG}_{\text{rau}}) & \text{für } m = 0 \end{cases} \\ \tilde{\sigma}^2(\operatorname{Im}[S_{\text{rau}}(m\delta\sigma)]) &= \tilde{\sigma}^2(\operatorname{IFG}_{\text{rau}}) \frac{2}{N} \sum_{n=0}^{\frac{N}{2}-1} \sin^2\left(\frac{2\pi mn}{N}\right) \\ &= \frac{1}{2} \begin{cases} \tilde{\sigma}^2(\operatorname{IFG}_{\text{rau}}) & \text{für } m \neq 0 \\ 0 & \text{für } m = 0 \end{cases}\end{aligned}\quad (47)$$

Die Gleichungen (47) stellen den wichtigen Zusammenhang zwischen dem Rauschen im Interferogramm und dem im Spektrum her¹¹. Interessant ist hierbei, daß sich das Rauschen

¹⁰ Die Summe kann gelöst werden, indem zuerst die Summe in die Bereiche von $-N/2$ bis -1 und von 0 bis $N/2-1$ aufgespalten wird und dann die Grenzen der ersten Teilsummen invertiert werden. Gradstein und Rhyzik [Gradstejn,Rhyzik,1981] geben folgende Lösungen für die Summen an:

$$\begin{aligned}\sum_{n=0}^{\frac{N}{2}-1} \cos^2\left(\frac{2\pi nm}{N}\right) &= \sum_{n=1}^{\frac{N}{2}} \cos^2\left(\frac{2\pi nm}{N}\right) = \begin{cases} N/4 & \text{für } m \neq 0 \\ N/2 & \text{für } m = 0 \end{cases} \\ \sum_{n=0}^{\frac{N}{2}-1} \sin^2\left(\frac{2\pi nm}{N}\right) &= \sum_{n=1}^{\frac{N}{2}} \sin^2\left(\frac{2\pi nm}{N}\right) = \begin{cases} N/4 & \text{für } m \neq 0 \\ 0 & \text{für } m = 0 \end{cases}\end{aligned}$$

¹¹ Interessant ist der Vergleich zu 'Einarminterferogrammen', bei denen zur Fouriertransformation die Indizes von $1..N/2-1$ nach $-1..-N/2+1$ entsprechend

$$\operatorname{IFG}_{\text{rau}}(ndx) = \operatorname{IFG}_{\text{rau}}(-ndx) \quad \text{mit } n = 1, 2, \dots, \frac{N}{2}-1$$

gespiegelt werden. Hier hat Friedle [Friedle,1993] ebenfalls nachgewiesen, daß der Zusammenhang zwischen Interferogramm und Spektrum

auf Real- und Imaginärteil gleichermaßen verteilt. Damit überträgt sich das Rauschen vom Interferogramm in den Real- und den Imaginärteil des Spektrums jeweils mit dem Faktor $1/\sqrt{2}$ ¹². Der spektrale Index $m=0$ bezeichnet eine der Grenzfrequenzen des Spektralbereichs und hat somit keine praktische Relevanz.

3.4 Das Koaddieren von Interferogrammen und Spektren

Die Koaddition ist bei Fourierspektrometern eine gängige und probate Methode zur Reduktion des Rauschens. Unter Koaddition wird das Summieren mehrerer Interferogramme bzw. Spektren verstanden, um das Gesamtrauschen zu reduzieren. Eine Koaddition der Interferogramme, also im Ortsraum, bedingt eine phasengleiche Addition der Interferogramme, so daß die Ortszuordnungen der einzelnen Interferogrammpunkte einander entsprechen. Der Ort der optischen Weglängendifferenz Null (Zero Optical Path Difference oder kurz ZOPD) eines zu addierenden Interferogramms kommt somit über den ZOPD der bereits addierten Interferogramme zu liegen. Dieses Vorgehen funktioniert nur, wenn das Instrument in einem absolut stabilen Modus läuft und somit keine Phasenfluktuationen auftreten. Dies muß vor einer eventuellen Koaddition im Ortsraum geprüft werden. Die Koaddition von Spektren bedingt eine korrekte Zuordnung der Wellenzahlskala. Diese kann nachträglich kalibriert werden (Abschnitt 7.3), so daß die Koaddition von Spektren auch möglich ist, wenn die Koaddition von Interferogrammen nicht durchgeführt werden kann. Der numerische Aufwand ist jedoch ungleich höher, da für jedes einzelne Interferogramm das Spektrum berechnet werden muß.

Da sich das Rauschen quadratisch addiert, folgt aus $\tilde{\sigma}_{\text{Gesamt}}^2 = \sum_{i=1}^C \tilde{\sigma}_i^2 = C * \tilde{\sigma}^2$, daß sich das Gesamtrauschen nur mit der Wurzel der Anzahl C der Koadditionen zu

$$\tilde{\sigma}_{\text{Gesamt}} = \sqrt{C} * \tilde{\sigma} \quad (48)$$

erhöht. Bei der Normierung, also der Division des Gesamtsignals durch die Anzahl der Koadditionen, reduziert sich das Gesamtrauschen um den Faktor $\frac{1}{\sqrt{C}}$ zu

$$\tilde{\sigma}^2(S_{\text{rau}}(md\sigma)) = \frac{1}{N/2} \left[\tilde{\sigma}^2(\text{IFG}_{\text{rau}})|_{m=0} + 2 \sum_{n=1}^{N-1} \tilde{\sigma}^2(\text{IFG}_{\text{rau}}) \cos^2\left(\frac{2\pi mn}{N}\right) \right]$$

beträgt und man damit

$$\tilde{\sigma}^2(S_{\text{rau}}(md\sigma)) = \begin{cases} \frac{N-2}{N} \tilde{\sigma}^2(\text{IFG}_{\text{rau}}) \approx \tilde{\sigma}^2(\text{IFG}_{\text{rau}}) & \text{für } m \neq 0 \\ \frac{2(N-1)}{N} \tilde{\sigma}^2(\text{IFG}_{\text{rau}}) \approx 2\tilde{\sigma}^2(\text{IFG}_{\text{rau}}) & \text{für } m = 0 \end{cases}$$

erhält. Hierbei wird der eigentlich imaginäre Rauschanteil dem reellen Anteil aufgeschlagen. Allerdings benötigen derartige 'einarmige' Interferogramme auch nur die halbe Meßdauer. Bei einer Verdoppelung der Meßdauer der einarmigen Interferogrammen gleichen sich die Rauschbeiträge an.

¹² Dieser Faktor ist abhängig von der Normierung der Fouriertransformation und muß bei unsymmetrischen Normierungen zwischen Vorwärts- und Rückwärtstransformation entsprechend angepaßt werden.

$$\tilde{\sigma}_{\text{koadd}} = \frac{1}{C} \sqrt{C * \tilde{\sigma}^2} = \frac{\tilde{\sigma}}{\sqrt{C}} \quad (49)$$

Damit erhöht sich das Signal-zu-Rauschen-Verhältnis ($\frac{S}{N} \equiv \frac{S}{\tilde{\sigma}}$) des koaddierten Signals S_{koadd} zu

$$\frac{S_{\text{koadd}}}{N_{\text{koadd}}} = \sqrt{C} * \frac{S}{N} \quad (50)$$

4 Das MIPAS-B2-FTIR-Spektrometer

Das MIPAS-B2-Experiment besteht aus mehreren Einheiten: der Gondel, der Sichtlinienstabilisierung mit dem Sternreferenzsystem, der Ballon- und Bodenelektronik und natürlich dem gekühlten Spektrometer, mit dem sich diese Arbeit beschäftigt [Friedl-Vallon et al., 1999]. Die angesprochenen Einheiten werden nur in soweit behandelt, wie es für das Verständnis dieser Arbeit notwendig ist.

Neben dem klassischen Michelson-Prinzip von Fourierspektrometern mit einem feststehenden und einem linear bewegten Reflektor haben sich weitere Konstruktionen etabliert, die andere Strahlengänge aufweisen. Auch die Spektrometer der MIPAS-Familie sind abweichend zu dem klassischen Michelson-Prinzip konzipiert. Hier wird der Linearantrieb des Retroreflektors durch ein Pendel mit zwei Spiegelecken ersetzt, die an einem Rotor angebracht sind und den Strahl zwischen Strahlteiler und Retroreflektor falten [Burkert et al., 1983]. Durch Drehung des Rotors wird ein unterschiedlicher optischer Weg in den beiden Armen des Interferometers erzeugt. In Abb. 13 ist eine Prinzipskizze dieses als 'Doppelpendel'-Interferometer (DPI) bezeichneten Systems dargestellt.

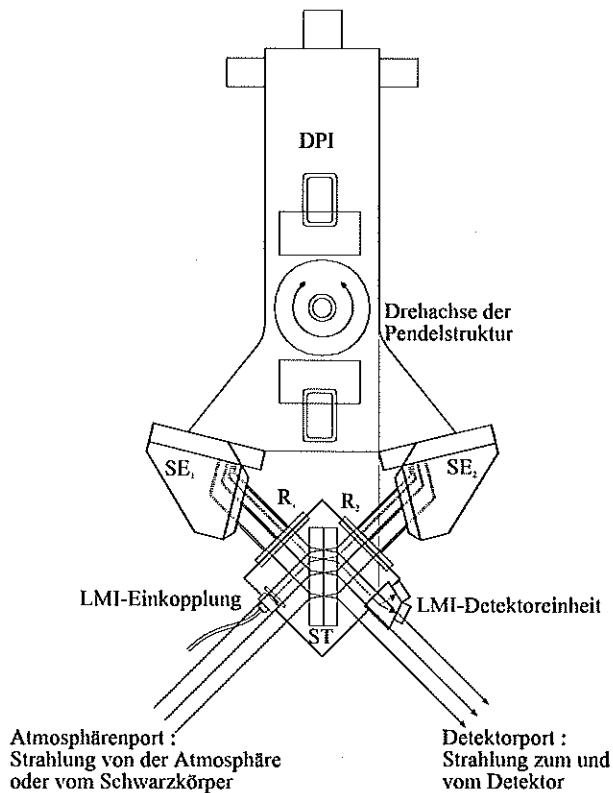


Abb. 13 zeigt das Doppelpendel-Interferometer (DPI) des MIPAS-B2 Fourierspektrometers. Der optische Weglängen- und Phasenversatz erfolgt durch Drehung der Pendelstruktur des DPI. In durchgezogener Linie ist der IR-Strahlengang und strichliert der des Längenmeßinterferogramms (LMI) eingezeichnet. Die festen Retroreflektoren sind oberhalb des Strahlteilers angebracht, da die Spiegelecken einen vertikalen Strahlversatz bewirken. Siehe auch Abb. 15.

Der einfallende IR-Strahl aus dem atmosphärischen Port spaltet sich am Strahlteiler (ST) auf. Die resultierenden Strahlen werden jeweils über die beiden Spiegelecken (SE_1 und SE_2) zu den Planspiegeln (Retroreflektoren, R_1 und R_2) geleitet und an ihnen wieder in sich selbst

zurückgespiegelt. Die Rekombination und damit die Überlagerung der nun phasenverschobenen Strahlungsbündel erfolgt am Strahlteiler (ST) und bildet ein Interferogramm als Funktion der optischen Weglängendifferenz der Interferometerarme (optischer Hub) aus. Aufgrund der Anordnung der Spiegelecken an der Pendelstruktur wird der optische Weg in einem Arm in dem Maße verkürzt wie er im anderen Arm verlängert wird. Durch die Faltung an den Spiegelecken durchläuft der Strahl den doppelten Abstand Strahlteiler – Spiegelecke, bis er am Retroreflektor zurückgespiegelt wird. Im Ganzen ergibt dies einen optischen Hub zwischen den beiden Interferometerarmen, der achtmal so schnell variiert wie der mechanische Ortsversatz der Spiegelecken. Kleine Winkelvariationen der DPI-Struktur bei MIPAS-B2 von ca. 5° resultieren daher schon in einem optischen Hub von +/-15 cm.

Damit im Spektrum keine parasitären Spektren (auch als Geisterlinien bezeichnet) auftreten [Zachor,1997; Gulde,Trieschmann,1989], muß eine konstante Änderung der optischen Weglängendifferenz mit der Zeit und damit eine konstante Winkelgeschwindigkeit der Struktur gewährleistet werden. Das Pendelprinzip erweist sich als invariant gegenüber translatorischen Bewegungen, ist jedoch gegenüber Drehmomenten auf das Pendel anfällig. Daher wird zur Durchführung des Meßprogramms die Gondel während eines Fluges azimutstabilisiert. Aufgrund dieser Azimutstabilisierung führt sie primär translatorische Bewegungen und kaum Drehbewegungen aus. Die Drehmomente sind aufgrund der angesprochenen azimutalen Stabilisierung [Maucher,1999; Seefeldner et al.,1995] von so geringer Ausprägung, daß bislang keine durch Drehmomente verursachten parasitären Spektren beobachtet werden konnten.

Ein konstruktives Problem ergibt sich jedoch aufgrund des 'Wanderns' des Strahlenbündels auf den Spiegeln der optischen Arme. Dies bedingt höhere Präzisionsanforderungen in bezug auf Oberflächengüte und Winkelgenauigkeit der Spiegelecken und der Retroreflektoren, als sie bei einem linear bewegten Fourierspektrometer nötig wären.

Zu dem IR-Strahl ist in Abb. 13 strichliert der parallele Strahlengang des Längenmeßinterferogramms (LMI) dargestellt. Dieses LMI besitzt als Quelle einen möglichst monochromatischen Laser (HeNe-Laser mit 633 nm Wellenlänge) mit einer deutlich größeren Kohärenzlänge als der maximale optische Hub des Interferometers. Das LMI-Interferogramm dieser quasi monochromatischen Quelle ist eine Kosinusfunktion mit der Wellenlänge der LMI-Quelle über den gesamten Hub. Dieses Interferogramm wird benutzt, um die Winkelposition der Pendelstruktur und damit den Hub des Interferometers zu bestimmen. Die äquidistanten aufsteigenden Nulldurchgänge des LMI werden als Triggerpunkte verwendet, um so mit konstanten Schrittweiten das IR-Interferogramm abzutasten und zu digitalisieren.

In Abb. 14 ist das gesamte Instrument schematisch dargestellt. Dem Interferometer vorgeschaltet ist ein Teleskop mit einem 2,4-fachen Öffnungsverhältnis, um den Blickwinkel in die Atmosphäre, das 'Field of View' (FOV), zu begrenzen und so die gewünschte vertikale Auflösung zu erreichen. Zudem wird mit dem Teleskop der Streulichtanteil von der Erdoberfläche in das Instrument mit der Lyot-Blende (LS) sowie dem gestaffelten Blendensystem aus der Eintrittsapertur EA und den Gesichtsfeldblenden FS₁ und FS₂ reduziert. Über die planen Spiegel F₁ und F₂ wird schließlich der Strahl in das Interferometer eingekoppelt.

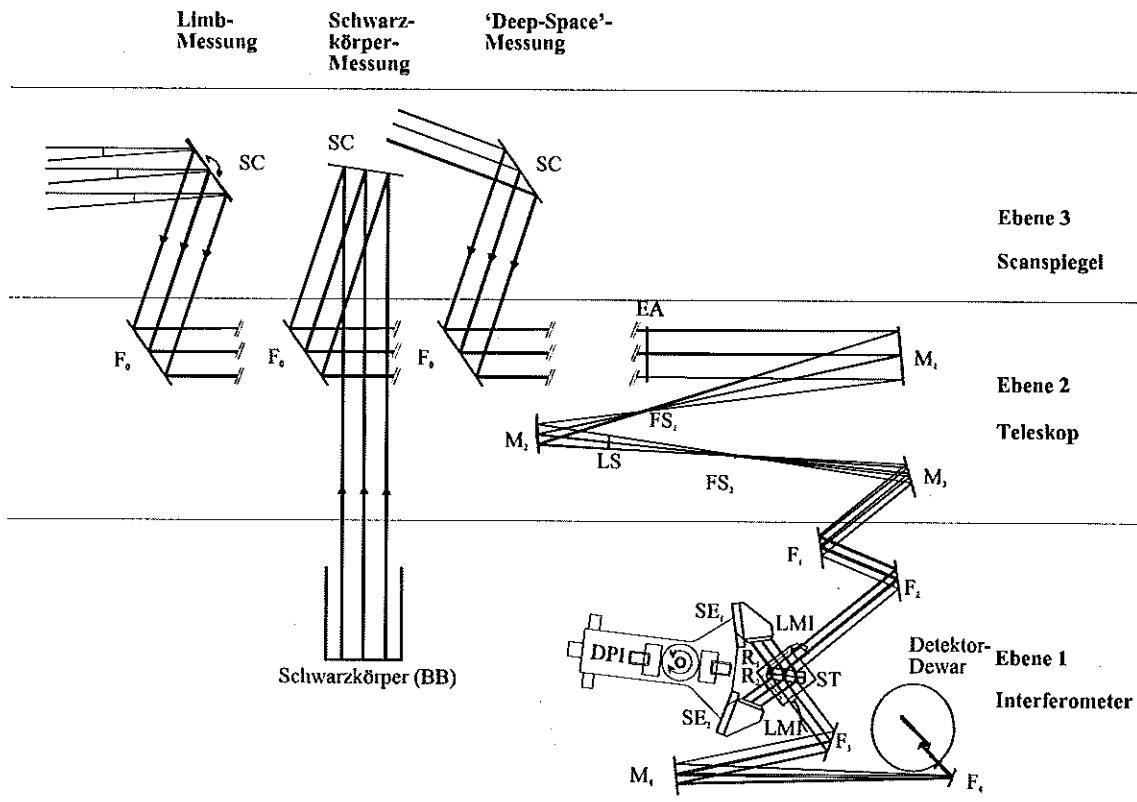


Abb. 14 Maßstabsgenauer Strahlengang des MIPAS-B2 Experiments mit den drei prinzipiell unterschiedlichen Meßmodi. Die einzelnen Ebenen sind 'aufgefaltet' übereinander abgebildet.
Die Meßmodi, die gegeneinander versetzt dargestellt sind, werden durch unterschiedliche Scanspiegelpositionen eingestellt.
BB: Schwarzkörper, DPI: Doppelpendelstruktur, EA: Eingangsaperturblende, F: Planspiegel, LMI: Längenmeßinterferogramm, LS: Lyot-Stop, M: Sphärische Spiegel, R: Retroreflektoren,
SC: Scanspiegel, SE: Spiegelecken, ST: Strahlteiler

Scanspiegel SC	4280
Planspiegel F ₀	3818
Aperturblende EA	3558
sphärischer Spiegel M ₁	2882
Gesichtsfeldblende FS ₁	2202
sphärischer Spiegel M ₂	1890
Lyotstop LS	1697
Gesichtsfeldblende FS ₂	1359
sphärischer Spiegel M ₃	891
Planspiegel F ₁	592
Planspiegel F ₂	374
↓	
Strahlteiler ST	0
↑	
Planspiegel F ₃	198
sphärischer Spiegel M ₄	618
Planspiegel F ₄	1351
Dewar-Fenster W	1391

← 359 Retroreflektoren R

Tab. 1 Geometrische Weglängenabstände der optischen Elemente relativ zum Strahlteiler ST.
Alle Abstände sind in mm angegeben. Der Abstand der Retroreflektoren zum Strahlteiler ist für die optische Weglängendifferenz Null (ZOPD) angegeben.

Die drei konstruktiven Ebenen in Abb. 14 sind im Experiment übereinander angeordnet, um so ein kompaktes Gerät zu erhalten. In der dreidimensionalen Anschauung (Abb. 15) des realen Experimentes lässt sich die Anordnung der optischen Komponenten gut erkennen. Um die Strahlung des Gerätehintergrunds zu reduzieren, wird das Instrument von außen mit Trockeneis auf ~220 K gekühlt. Dadurch entsteht eine vertikale Luftsichtung im abgeschlossenen Instrumentgehäuse. Während im Labor die kältesten Temperaturen am Boden des Gerätes herrschen, dreht sich der Temperaturgradient während des Fluges um. Nach der Entnahme des Trockeneises vor dem Start des Ballons wird das Temperaturverhalten durch die Umgebungstemperatur bestimmt. Während des Aufstiegs und in Flughöhen von ca. 30 km ist mitunter die Umgebungsluft kälter als die Innentemperatur des Instrumentes. Der Temperaturhaushalt des Instruments wird jedoch überwiegend durch die Ausstrahlung der Geräteoberseite in den Weltraum und den Strahlungseintrag von der Erdoberfläche oder Wolken auf der Geräteunterseite reguliert. Dadurch kann sich eine Temperatur im Instrument einstellen, die oben (Ebene 3) kälter ist als unten (Ebene 1).

Der Kern des Experimentes liegt mit dem Interferometer in der untersten Ebene 1. Das Interferometersignal wird über die beiden Planspiegel F_3 und F_4 sowie den sphärischen Spiegel M_4 in das Dewar eingekoppelt. In diesem befinden sich vier Si:As-BIB-Detektoren, die zum Unterdrücken der thermisch bedingten elektrischen Leitfähigkeit und des Eigenrauschens mit flüssigem Helium auf eine Betriebstemperatur von ca. 8 K gekühlt werden. Zur Erhöhung des Signal-zu-Rauschen-Verhältnisses (S/N) und zur Reduktion des Dynamikumfangs des Interferogramms wird der gesamte Spektralbereich des Interferometers von 675 bis 2450 cm^{-1} (4 bis 14 μm) auf vier Detektoren aufgeteilt. Zur spektralen Auftrennung werden dichroische Strahlteiler verwendet. Tab. 2 gibt Auskunft über die gewählten Filter mit ihren Spektralbereichen und den erwarteten rauschäquivalenten Strahldichten (NESR – Noise Equivalent Spectral Radiance) sowie allgemeine Spezifikationen des MIPAS-B2.

Größe	Für alle Kanäle				Einheiten
Optischer Hub	+/- 15				cm
Dauer einer Pendelschwingung	~20				s
Etendue	2×10^{-3}				sr cm^2
Strahlteiler	KCl-Substrat mit Germaniumbeschichtung				
Strahlapertur des Strahlteilers	47				mm
Öffnungsverhältnis des Teleskopes	1:2,4 vertikal 1:2 horizontal				
Divergenzwinkel des Interferometers	42,5				Bogenminuten
	Kanal 1	Kanal 2	Kanal 3	Kanal 4	
Spektralbereich	675-970	1000-1430	1580-1750	1790-2450	cm^{-1}
NESR (Jahr)	1999: 5×10^{-9} 1998: $1,5 \times 10^{-8}$	1999: $2-6 \times 10^{-9}$ 1998: $3,5 \times 10^{-9}$	1999: $2-3 \times 10^{-9}$ 1998: $3,0 \times 10^{-9}$	1999: $3-4 \times 10^{-9}$ 1998: $3,0 \times 10^{-9}$	$\text{W}/(\text{cm}^2 \text{ sr cm}^{-1})$
Detektortyp	Si:As Blocked Impurity Band – Detektoren				

Tab. 2 Typische spektroskopische Größen der vier Detektorkanäle und des Instrumentes [Friedl-Vallon et al., 1999 und pers. Mitteilung].

Der zu messende Strahl wird über den Scanspiegel (SC) der Ebene 3 in das 'off-axis' Teleskop in Ebene 2, bestehend aus dem Planspiegel F_0 und den das Teleskop definierenden sphärischen Spiegeln M_1 bis M_3 , eingeleitet. Dem Meßszenario kommt dabei die besondere Funktion zu, den Scanspiegel zu steuern (in Abb. 14 angedeutet). Während das Instrument unter einem Blickwinkel von $+20^\circ$ relativ zur Horizontalebene in den kalten Weltraum schaut, wird unter einem Winkel von -90° die Strahlung des experimenteigenen Schwarzkörpers in das Instrument eingespiegelt. Diese beiden Messmodi dienen vornehmlich der Kalibrierung der atmosphärischen Spektren. Die wissenschaftlich interessanten atmosphärischen Spektren werden unter den Winkeln von $+3^\circ$ ($+7^\circ$ beim Aufstieg) bis -5° Elevationswinkel aufgenommen. Die notwendigerweise hohe Winkelgenauigkeit gegenüber dem Horizont wird während des Fluges durch eine Regelung des Scanspiegels erreicht. Dazu wird die Lage und Orientierung der Gondel mit einem AHRS (Attitude and Heading Reference System) mit GPS-Stützung bestimmt. Nach dem Flug wird aus Aufnahmen des Sternhimmels mit einer CCD-Kamera die Sichtlinie validiert und korrigiert. So wird eine Winkelgenauigkeit von $1'$ erreicht, was zusammen mit einer präzisen Höheninformation des Ballons einer maximalen Unsicherheit am Tangentenpunkt von ~ 100 m (3σ) entspricht [Maucher, 1999].

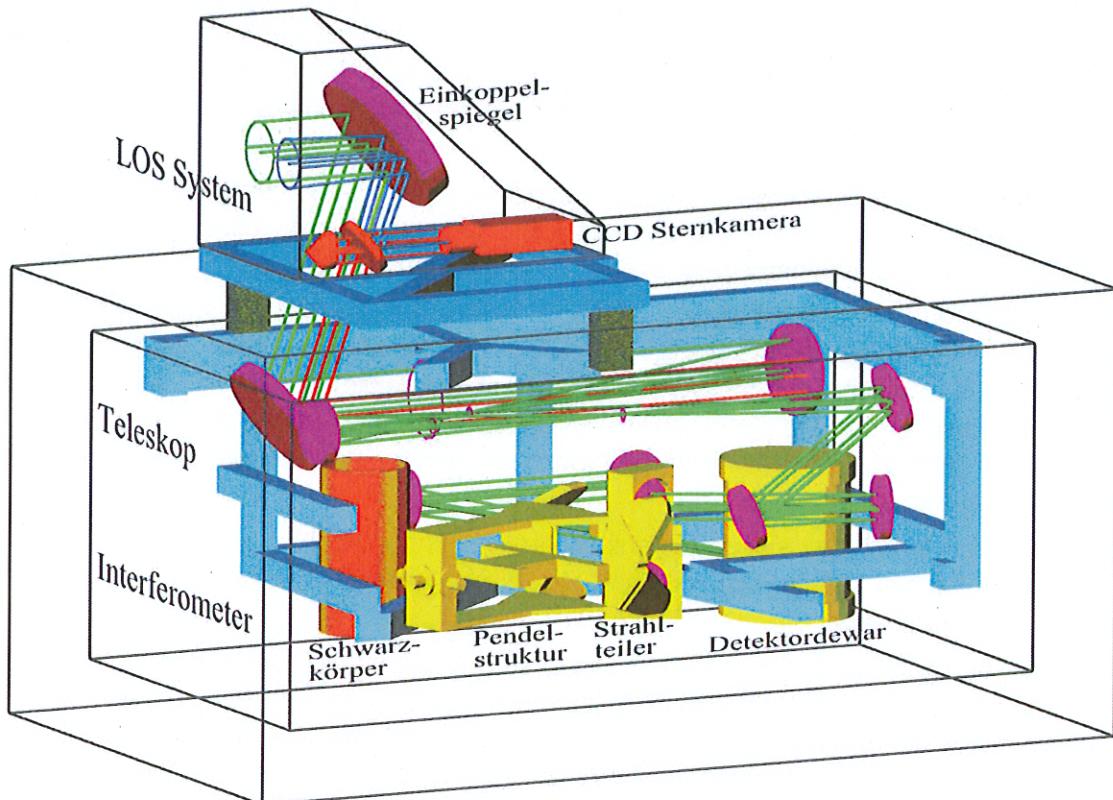


Abb. 15 3-dimensionale Zeichnung des MIPAS-B2 Instrumentes
Gelb: Interferometer und Detektordewar, Violett: Spiegel, Rot: Sternkamerasytem,
Grüner Strahlengang: IR-Signal, Blauer Strahlengang: Signal der Sternkamera

5 Das Phasenproblem

Bei den bislang betrachteten Interferogrammen sind die Anteile der balancierten und der unbalancierten Strahlung um $x=0$ achsensymmetrisch und im Spektrum reell, der Anteil der Strahlteileremission ist zum Ursprung punktsymmetrisch und im Spektrum imaginär. Diese Symmetrien werden jedoch bei realen Messungen gebrochen. Die Auswirkungen dieser Asymmetrien und insbesondere deren Korrektur werden den Inhalt dieses Kapitels bestimmen.

5.1 Die unterschiedlichen Phasenkomponenten

Für die Störungen der Symmetrie gibt es mehrere Gründe, die durch die experimentellen Rahmenbedingungen nicht vermieden werden können:

- Die Gruppenlaufzeiten der analogen Verstärker des IR- und LMI-Zweiges variieren mit der Frequenz des Signals. Die Frequenz ist über die Vorschubgeschwindigkeit des Pendels direkt proportional zur Wellenzahl. Dies führt zu einem Ortsunterschied zwischen dem IR-Interferogramm und dem Referenzinterferogramm (LMI) [Gulde,Trieschmann, 1989].
- Der Aufbau eines Strahlteilers aus verschiedenen dielektrischen Schichten führt mit der Wellenzahl zu unterschiedlichen mittleren Orten der effektiven strahlteilenden Grenzschicht und damit zu einem wellenzahlabhängigen Ortsfehler.
- Die Dispersion des Substratmaterials des Strahlteilers und der Kompensationsplatte führen ebenfalls zu unterschiedlichen optischen Wegdifferenzen in Abhängigkeit der Wellenzahl zwischen den beiden Armen, wenn die Dicke der beiden Substrate nicht absolut identisch ist. Da die Substrate gekeilt sind, ist allein durch den Fertigungsprozeß mit einer geringfügig unterschiedlichen Dicke und damit einer Störung der Symmetrie des Interferogramms zu rechnen.

Diese Effekte bewirken einen wellenzahlabhängigen Ortsfehler $\epsilon_{x,1}=\epsilon_{x,1}(\sigma)$ und sind instrumentababhängig, aber zeitlich konstant. Sie können parametrisiert werden und gelten für alle weiteren Messungen.

- Durch die digitalisierte Datenaufnahme des Interferogramms, die bei den aufsteigenden Nulldurchgängen des Referenzinterferogramms erfolgt, kommt es zu einer weiteren Asymmetrie im Interferogramm. Diese tritt auf, wenn die Lokalität des digitalisierten Abtastpunkts, der als Weglängendifferenz Null der beiden optischen Arme betrachtet wird, nicht mit dem wirklichen Interferogramm-Nullpunkt (**ZOPD, Zero Optical Path Difference**) übereinstimmt. Dann ist das digitisierte Interferogramm zu dem digitalisierten Punkt des ZOPDs nicht mehr achsen- bzw. punktsymmetrisch.

Dieser Effekt bewirkt einen über alle Wellenzahlen konstanten Ortsfehler $\epsilon_{x,2}=\text{konst.}$, der jedoch von Messung zu Messung variieren kann.

Mathematisch drücken sich die Asymmetrien durch den Abstand ϵ der gemessenen Weglängendifferenz x zur wahren Wegdifferenz wie

$$\begin{aligned}
 S_{\text{gest}}(\sigma) &= \int_{-\infty}^{\infty} \underbrace{\text{IFG}(x + \varepsilon_{x,1}(\sigma) + \varepsilon_{x,2})}_{\text{IFG}_{\text{gest}}(x)} e^{-i2\pi\sigma x} dx \\
 &= e^{i2\pi\sigma\varepsilon_{x,1}(\sigma)} * e^{i2\pi\sigma\varepsilon_{x,2}} * \int_{-\infty}^{\infty} \text{IFG}(x) e^{-i2\pi\sigma x} dx \\
 &= \underbrace{e^{i2\pi\sigma\varepsilon_{x,1}(\sigma)}}_{\text{instrumenteller Phasenfehler}} * \underbrace{e^{i2\pi\sigma\varepsilon_{x,2}}}_{\text{linearer Phasenfehler}} * S(\sigma)
 \end{aligned} \tag{51}$$

aus. Durch die Fouriertransformation eines in den Symmetrien gestörten Interferogramms $\text{IFG}_{\text{gest}}(x)$ entsteht ein komplexes phasengestörtes Spektrum $S_{\text{gest}}(\sigma)$, bei dem Anteile der balancierten und unbalancierten Strahlung in den Imaginärteil gedreht werden und ein Anteil der Strahlteileremission in den Realteil gedreht wird. Hier zeigt sich auch deutlich der Ursprung des Begriffes Phasenfehler: Die Ortsfehler im Interferogrammraum bewirken über die Phasen der komplexen e-Funktionen ein Drehen des Spektrums im komplexen spektralen Raum.

Die Phase der ersten e-Funktion in Gl. (51) ist vom Instrument bestimmt und von Messung zu Messung annähernd konstant, da nur Temperaturschwankungen die optischen und elektrischen Komponenten beeinflussen und zwischen aufeinanderfolgenden Messungen vernachlässigbar sind. Diese Phase wird im folgenden als '**instrumenteller Phasenfehler**' $\phi_{\text{inst}}(\sigma) = 2\pi\sigma\varepsilon_{x,1}(\sigma)$ bezeichnet. Der zweite Term unterscheidet sich jedoch von Messung zu Messung und nimmt mit der Wellenzahl linear zu. Infolgedessen wird er auch als '**linearer Phasenfehler**' $\phi_{\text{lin}}(\sigma) = 2\pi\sigma\varepsilon_{x,2}$ bezeichnet.

Der totale Phasenfehler ϕ_{tot} setzt sich aus ϕ_{inst} und ϕ_{lin} additiv entsprechend

$$\phi_{\text{tot}}(\sigma) = \phi_{\text{inst}}(\sigma) + \phi_{\text{lin}}(\sigma) = 2\pi\sigma[\varepsilon_{x,1}(\sigma) + \varepsilon_{x,2}] \tag{52}$$

zusammen.

Der '**natürlicher Phasenwinkel**' ϕ_s wird durch die reellen balancierten und unbalancierten Strahlungsanteile bzw. durch die imaginäre Strahlteileremission im komplexen Raum gebildet (Abb. 10). Allein durch diesen natürlichen Phasenwinkel ist die Symmetrie des gesamten Interferogramms gestört. Neben ihm trägt noch ϕ_{tot} zur Gesamtphase bei.

Das MIPAS-B2 Interferometer wurde mit der Maßgabe entwickelt, die instrumentelle Hintergrundstrahlung zu reduzieren, indem die Optik des Experimentes mit Trockeneis auf ~ 220 K gekühlt wird. Dies führt hauptsächlich bei hohen Elevationswinkeln und in langwelligen Spektralbereichen zu ausgeglichenen Intensitäten der balancierten und unbalancierten Strahlung sowie der Strahlteileremission. Die Strahlteileremission ist in diesem Fall signifikant und dreht den spektralen Vektor S in Richtung der imaginären Achse (Abschnitt 3.1.3). Diese Drehung korreliert mit der instrumentellen Phase, die durch die übrigen optischen Komponenten definiert wird, noch kann er durch den linearen Phasenfehler, hervorgerufen durch Nullpunktsverschiebungen der Abtastung, beschrieben werden.

Die gesamte Phase ϕ des gestörten Spektrums setzt sich nun aus der natürlichen Phase ϕ_s und dem Phasenfehler ϕ_{tot} zusammen. Sie erhält man direkt aus der Winkelbestimmung des spektralen Vektors in der komplexen Ebene mit

$$\phi(\sigma) = \phi_s(\sigma) + \phi_{\text{tot}}(\sigma) = \text{arctan2}(S_{\text{gest}}(\sigma)) . \tag{53}$$

Die neu eingeführte arctan2-Funktion ist eine Arkustangensfunktion mit einem erweiterten Wertebereich von $-\pi$ bis $+\pi$ und ist im Anhang 11.5 definiert. Die Phase ϕ erstreckt sich somit über alle vier Quadranten.

In Abb. 16 sind die Phasenfehler in einem Zeigerdiagramm zusammengefaßt dargestellt.

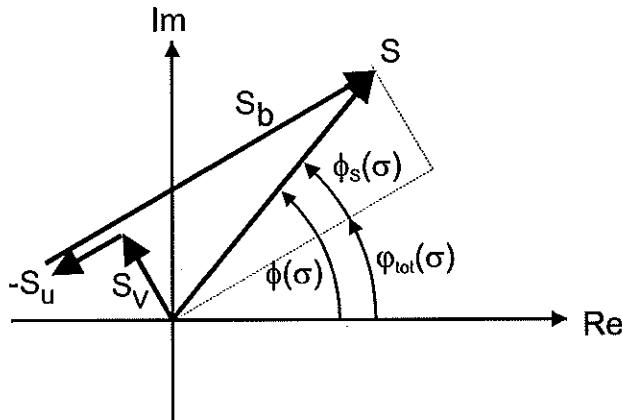


Abb. 16 Das Vektordiagramm eines phasengestörten Spektrums bei einer Wellenzahl σ_0 .
Der gesamte Phasenwinkel setzt sich aus dem totalen Phasenfehler φ_{tot} und dem natürlichen Phasenwinkel ϕ_s zusammen.

Die relativen Fehler der spektralen Werte aufgrund des Phasenfehlers ergeben sich durch Differenzbildung des gestörten Spektrums $S_{\text{gest}}(\sigma)$ vom ungestörten Spektrum $S(\sigma)$. In Abb. 17 sind die Fehlerbereiche durch eine falsche Phase markiert.

$$\begin{aligned}\Delta S_{bu}(\sigma) &= \operatorname{Re}[(iS_v(\sigma) + S_{bu}(\sigma))e^{i\varphi_{\text{tot}}}] - S_{bu}(\sigma) \\ &= S_{bu}(\sigma)(\cos \varphi_{\text{tot}} - 1) - S_v(\sigma) \sin \varphi_{\text{tot}} \\ \Delta S_v(\sigma) &= \operatorname{Im}[(iS_v(\sigma) + S_{bu}(\sigma))e^{i\varphi_{\text{tot}}}] - S_v(\sigma) \\ &= S_v(\sigma)(\cos \varphi_{\text{tot}} - 1) + S_{bu}(\sigma) \sin \varphi_{\text{tot}}\end{aligned}\quad (54)$$

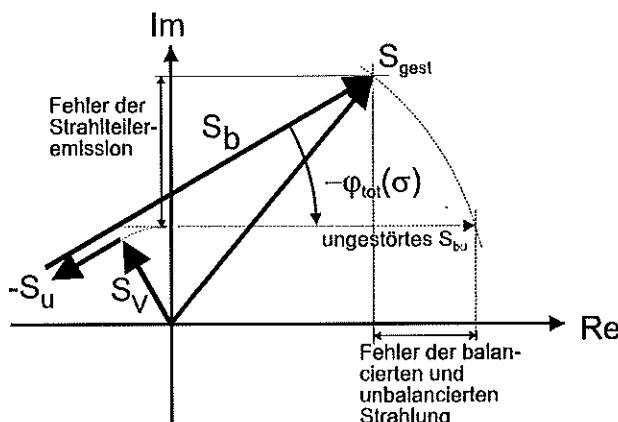


Abb. 17 Das Vektordiagramm eines phasengestörten Spektrums bei einer Wellenzahl σ_0 .
Die Fehler durch φ_{tot} sind für die balancierte und unbalancierte Strahlung S_{bu} sowie für die Strahlteileremission S_v angegeben. Die Fehler aufgrund der Phasenstörung wirken sich bei kleinen Fehlern vornehmlich im Imaginärteil aus.

In Abb. 18 ist die Fehlerabhängigkeit der balancierten und unbalancierten Strahlung $S_{bu}(\sigma)$ von dem Phasenfehler bei unterschiedlichen Strahlungsverhältnissen zwischen den ungestörten Anteilen von $S_v(\sigma)$ zu $S_{bu}(\sigma)$ grafisch dargestellt. Um den Intensitätsfehler aufgrund von Phasenfehlern auf maximal 1 % zu begrenzen, darf der Phasenfehler $0,5^\circ$ nicht überschreiten.

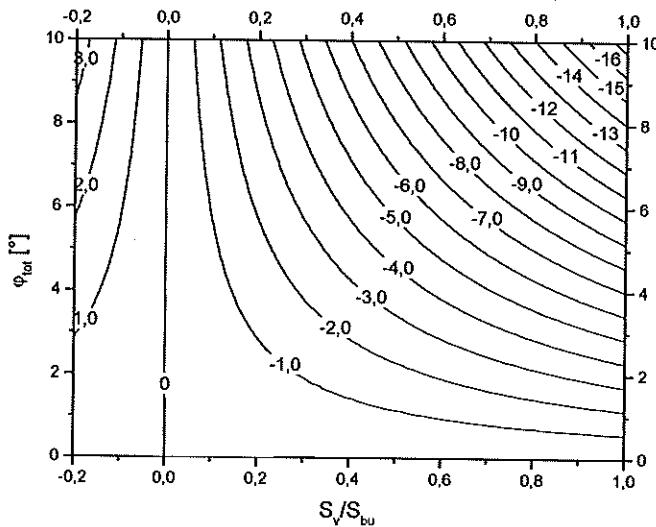


Abb. 18 Relativer Fehler in Prozent der balancierten und unbalancierten Strahlung S_{bu} aufgrund von Phasenfehlern φ_{tot} und dem Verhältnis zwischen der Strahleiteremission S_v und S_{bu} .

Auswirkungen von Phasenfehlern auf die Linienform bzw. das Apparateprofil treten bei zweiseitigen Interferogrammen, d.h. bei Interferogrammen, die sich mit der gleichen optischen Weglänge vor und nach dem ZOPD erstrecken, nicht auf. Die Deformationen der Apparatefunktion durch Phasenfehler sind nur bei (vom ZOPD aus) einseitigen Interferogrammen zu beobachten¹³.

Korrektur der Phase

Mit Kenntnis der Phase lässt sich das gewünschte Spektrum aus dem asymmetrischen Interferogramm $IFG_{\text{gest}}(x)$ gewinnen, indem das komplexe Spektrum $S_{\text{gest}}(\sigma)$ mit der inversen

¹³ Bei einseitigen Interferogrammen wird zur Fouriertransformation das Interferogramm am ZOPD gespiegelt. Eine monochromatische Linie mit der Wellenzahl σ_0 bewirkt bei einem Phasenfehler φ_{tot} ein folgendermaßen gespiegeltes Interferogramm:

$$IFG(x) = \cos(2\pi\sigma_0 x + \varphi_{tot}) \text{RECT}\left[\frac{x-\Lambda/2}{\Lambda}\right] + \underbrace{\cos(2\pi\sigma_0 x - \varphi_{tot}) \text{RECT}\left[\frac{x+\Lambda/2}{\Lambda}\right]}_{\text{gespiegelter Anteil}},$$

welches wiederum folgendes asymmetrische Apparateprofil ergibt:

$$ILS(\sigma) = \frac{1}{\pi\sigma} \left[\underbrace{\cos(\varphi) \sin(2\pi\Lambda\sigma)}_{\text{symmetrischer Teil}} + \underbrace{\sin(\varphi) [\cos(2\pi\Lambda\sigma) - 1]}_{\text{antisymmetrischer Teil}} \right].$$

Phasenfehlerfunktion φ_{tot} zurückgedreht wird [Mertz,1963]. In Abb. 17 ist bereits das Prinzip der Phasenkorrektur angedeutet, bei der die komplexen spektralen Werte um $-\varphi_{\text{tot}}$ gedreht werden, so daß der balancierte und unbalancierte Strahlungsanteil parallel zur reellen Achse und die Strahlteileremission parallel zur imaginären Achse ausgerichtet werden.

$$S(\sigma) = e^{-i\varphi_{\text{tot}}} * S_{\text{gest}}(\sigma) = e^{-i2\pi\sigma\varepsilon_{x,1}(\sigma)} * e^{-i2\pi\sigma\varepsilon_{x,2}} * \int_{-\infty}^{\infty} \text{IFG}_{\text{gest}}(x) e^{-i2\pi\sigma x} dx \quad (55)$$

Forman [Forman et al.,1966] führte die Korrektur im Interferogramm ein, bei der die fouriertransformierte Phasenfunktion mit dem Interferogramm gefaltet wird. Im Ortsraum bedeutet die Faltung (\otimes) nichts anderes, als die spezifische Korrektur der Verschiebung ε_x des Interferogramms für die jeweilige Wellenzahl.

$$\text{IFG}(x) = \text{IFG}_{\text{gest}}(x) \otimes \underbrace{\text{FT}^*[e^{-i\varphi_{\text{tot}}(\sigma)}]}_{\text{Faltungskernel}} \quad (56)$$

Der entscheidende Punkt für eine qualitativ gute Phasenkorrektur ist die Bestimmung der Phasenfehlerfunktion φ_{tot} , wobei zwischen instrumentellem und linearem Phasenfehler unterschieden wird. Soweit das Instrument thermisch stabil ist, kann der instrumentelle Phasenfehler, der von den Komponenten des Interferometers abhängt, als zeitlich konstant angenommen werden. Dadurch ändert sich nur der lineare Phasenfehler von Messung zu Messung entsprechend der Positionierung und Wiederkehrgenauigkeit der Abtastung. Das heißt auch, daß die instrumentelle Phase nicht bei jeder Messung gewonnen werden muß, sondern die bestmöglich gewonnene instrumentelle Phase für alle Einzelmessungen verwendet werden kann. Der totale Phasenfehler φ_{tot} ergibt sich, indem auf die feste instrumentelle Phase eine für jede Messung individuelle lineare Phase addiert wird. Diese lineare Phase kann dabei durch eine Steigung a_1 und einen Punkt a_0 parametrisiert werden¹⁴. Die Phasenfehlerfunktion wird dann folgendermaßen geschrieben:

$$\varphi_{\text{tot}}(\sigma) = \varphi_{\text{inst}}(\sigma) + a_0 + a_1(\sigma - \sigma_0) \text{ mit } a_0 = a_0(\sigma_0) \quad (57)$$

5.2 Die klassische Phasenbestimmung der Absorptionsspektroskopie

Bei der klassischen Labor- und Absorptionsspektroskopie stehen im allgemeinen so energiereiche Strahlungsquellen zur Verfügung, daß die Strahlteileremission ihnen gegenüber vernachlässigt werden kann. Der 'natürliche Phasenwinkel' ϕ_s kann somit als Null angenommen werden und der gesuchte Phasenfehler φ_{tot} fällt mit dem gesamten Phasenwinkel ϕ zusammen. Mit der Annahme, daß die Phase keine höher aufgelösten Signaturen enthält, kann sie aus einem sehr niedrig aufgelösten komplexen Spektrum ($\Gamma > 1 \text{ cm}^{-1}$) durch Bestimmen des Phasenwinkels des komplexen Vektors gewonnen werden. Durch die geringe Auflösung hat selbstverständlich auch der Faltungskernel aus Gl. (56) nur eine gleichermaßen geringe Ausdehnung. In Zusammenhang mit einer weiteren mathematischen Filterung zur Begrenzung der Bandbreite und damit einer weiteren Reduktion der

¹⁴ Üblicherweise wird allerdings nicht der Schnittpunkt mit der Ordinate für den Achsenabschnitt a_0 gewählt, sondern der Punkt auf der Geraden mit σ gleich der Mittenwellenzahl σ_0 des Spektralbereiches. Dies führt zu einer merklich präziseren linearen Phasenfunktion, da ein Fehler der Steigung a_1 nicht so stark in das Ergebnis propagiert.

Datenmenge kann dieses Verfahren auch die Rechenzeit merklich verkürzen [Forman et al., 1966]. Aufgrund der geringeren Auflösung des Phasenspektrums ist dieses annähernd rauschfrei.

Schwarzkörpermessungen

Bei Messungen gegen einen heißen Schwarzkörper arbeitet ein Fourierspektrometer vergleichbar zu einem Absorptionsspektrometer. Da der Schwarzkörper von MIPAS-B2 jedoch die Temperatur des Instruments besitzt, muß die Gültigkeit dieser Phasenbestimmung noch nachgewiesen werden. Es zeigt sich, daß ein Restfehler durch eine nicht vollständig vernachlässigbare Strahlteileremission bestehen bleibt, auf den in Abschnitt 5.5 näher eingegangen wird. Vorerst wird der Schwarzkörper als dominant gegenüber allen anderen Strahlungsbeiträgen betrachtet, so daß die Strahlteileremission gegenüber letzterem in guter Näherung vernachlässigt werden kann. Die Anwendung des klassischen Phasenbestimmungsverfahrens führt dann zu den folgenden Ergebnissen:

Durch Gleichsetzung des Phasenfehlers ϕ_{tot} mit der gesamten Phase ϕ wird aus Gl. (53)

$$\phi_{\text{tot}}(\sigma) \rightarrow \phi(\sigma) = \arctan 2(S_{\text{ges}}(\sigma)) . \quad (58)$$

In Abb. 19 ist die so bestimmte Phase in unterschiedlichen Auflösungen dargestellt.

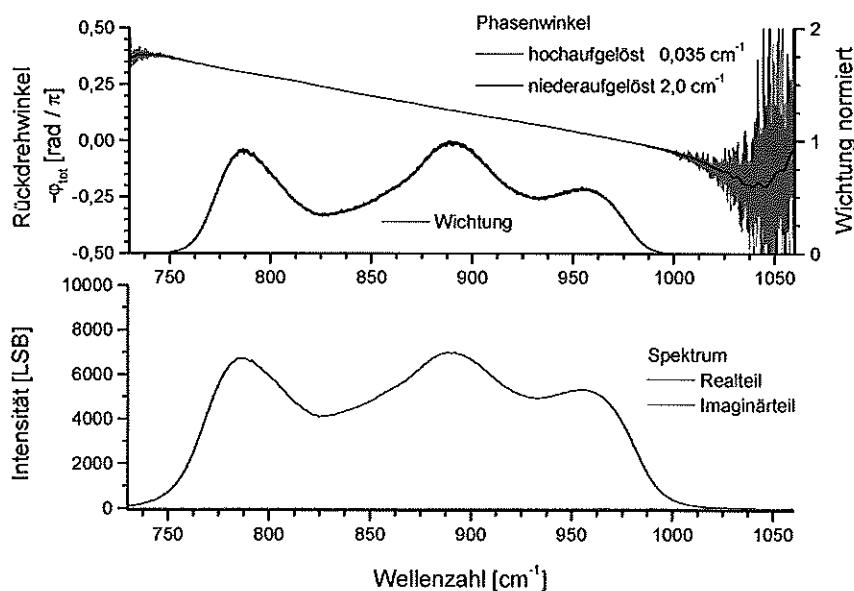


Abb. 19 Bestimmung des Phasenfehlers einer Schwarzkörpermessung.

Im oberen Feld ist die Phase hoch- und niederaufgelöst dargestellt. Nach der Phasenkorrektur ergibt sich ein rein reelles Spektrum. Im Imaginärteil bleibt nur ein Rauschanteil übrig. Die Strahlteileremission wird als vernachlässigbar angenommen (Einzelmessung).

In Bereichen niedriger Gesamtintensität des Spektrums läßt sich keine Phase finden. Für die Wellenzahl von 790 cm^{-1} ist in Abb. 20 das komplexe Phasendiagramm angegeben. Durch die starke Schwarzkörperemission im Vergleich zum Strahlteiler fällt der natürliche Phasenwinkel sichtbar gering aus.

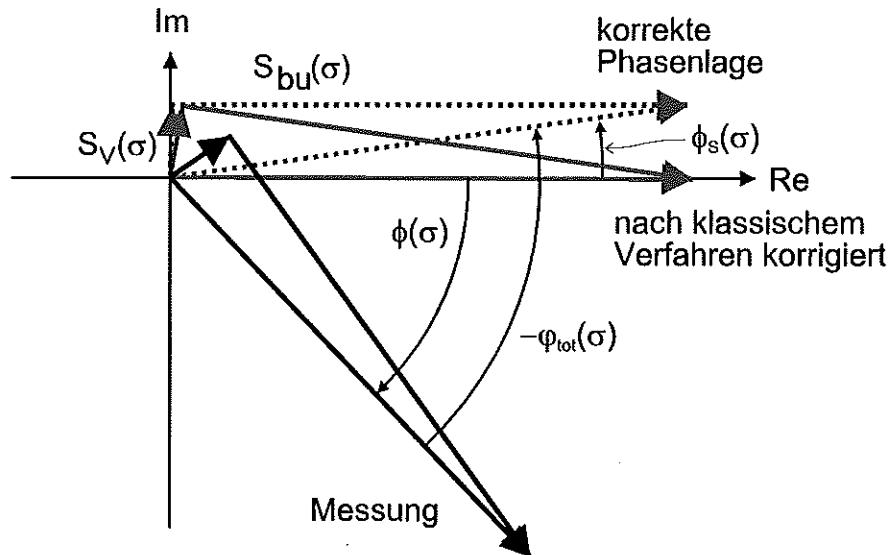


Abb. 20 zeigt die Phasenkorrektur einer Schwarzkörpermessung durch Rückdrehen des komplexen Gesamtvektors S um den Winkel ϕ auf die reelle Achse. Die Phase wurde mittels des klassischen Phasenbestimmungsverfahrens bestimmt. Dabei wurde der natürliche Phasenwinkel ϕ_s als vernachlässigbar angesehen.

Diese 'Schwarzkörpermessungen' werden auch zur Bestimmung der instrumentellen Phase verwendet. Der in diesen Phasenfunktionen noch enthaltene lineare Anteil wird eliminiert, indem von der Phasenfunktion eine an sie angepaßte Geradenfunktion $g_{a_0, a_1}(\sigma) = a_0 + a_1(\sigma - \sigma_0)$ subtrahiert wird. Somit wird die Definition der instrumentellen Phase dahingehend erweitert, daß sie zeitlich konstant ist und nur nichtlineare Anteile enthält:

$$\phi_{\text{inst}}(\sigma) = \phi_{\text{tot}}(\sigma) - g_{a_0, a_1}(\sigma) \quad \text{mit } g_{a_0, a_1}(\sigma) \xrightarrow{\text{Anpassung nach kleinsten Abweichungsquadraten}} \phi(\sigma) . \quad (59)$$

Bei der Anpassung der Geradenfunktion werden die Phasenpunkte entsprechend dem Quadrat der spektralen Intensität gleicher Wellenzahl gewichtet.

Atmosphärenmessungen

Bei den folgenden Messungen gegen die Atmosphäre kann die Phase durch Addition der instrumentellen Phase mit einer richtig gewählten individuellen Geradenfunktion gewonnen werden. Die Bestimmung dieser Geradenfunktion wird im folgenden beschrieben.

Bei Messungen in die Atmosphäre ergibt sich mit der klassischen Phasenbestimmung folgendes Bild: Mit dem beschriebenen Verfahren wird der gesamte spektrale Vektor S auf die reelle Achse gedreht, anstatt nur die Anteile der balancierten und unbalancierten Strahlteileremission, z.B. bei atmosphärischen Messungen und insbesondere bei hohen Elevationswinkeln (Abb. 21), führt dies zu großen Fehlern beim Rückdrehen des spektralen Vektors. Infolgedessen kann diese Methode der Phasenbestimmung bei signifikanter Strahlteileremission nicht verwendet werden.

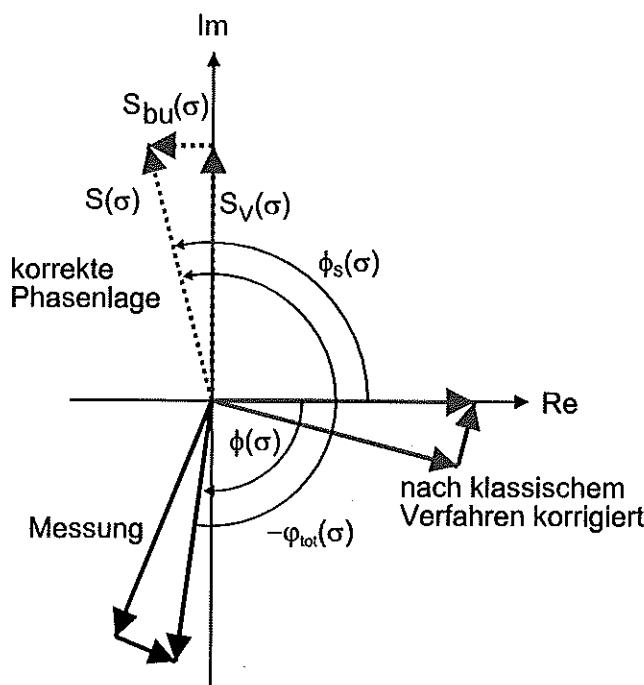


Abb. 21 Klassisches Verfahren der Phasenkorrektur bei einer Atmosphärenmessung unter $-0,71^\circ$ Elevationswinkel, bei der die Strahlteileremission nicht vernachlässigt werden kann.
Dieses Verfahren führt ein Rückdrehen des komplexen Gesamtvektors S um den Winkel ϕ auf die reelle Achse aus. Die korrekte Rückdrehung müßte jedoch ϕ_{tot} betragen.

Die Strahlteileremission variiert nur langsam mit der Wellenzahl. Hingegen weist die balancierte Strahlung entsprechend ihren atmosphärischen Linien eine hochauflöste Struktur auf. Im hochauflösten Phasenspektrum finden sich die Linienstrukturen wieder (Abb. 22).

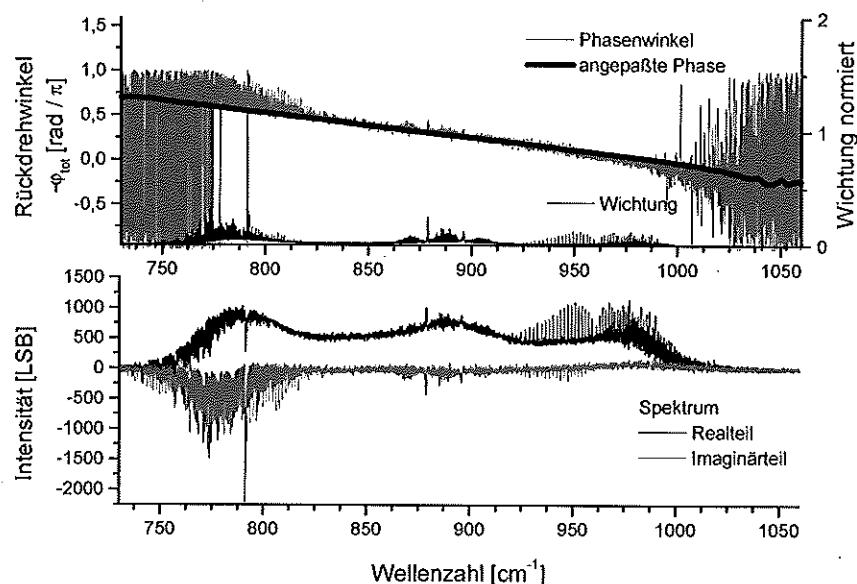


Abb. 22 Die Phasenfehlerbestimmung einer atmosphärischen Messung bei einem Elevationswinkel von $-0,71^\circ$ mit der klassischen Methode lässt deutlich Linienstrukturen in der Phase erkennen. Die Anpassung der instrumentellen Phase erfolgte mit einer Geradenfunktion und wurde mit der dargestellten Wichtungsfunktion gewichtet. Im Imaginärteil des Spektrums sind 'verbogene' Linienstrukturen sichtbar.

Spektrale Signaturen im hochauflösten Phasenspektrum sind somit ein Indiz für eine nicht vernachlässigbare Strahlteileremission. Diese spektralen Signaturen treten bei den Emissionsmessungen der Atmosphäre von MIPAS-B2 laufend auf. Daher ist mit dem an dieser Stelle beschriebenen 'klassischen' Verfahren kein korrekter Phasenfehler φ_{tot} für atmosphärische Messungen zu bestimmen.

5.3 Die differentielle Phasenbestimmung

Mit der 'differentiellen Phasenbestimmung' [Weddigen et al., 1993; Höpfner, 1994; Blom et al., 1996] wurde eine Methode gefunden, den Phasenfehler φ_{tot} unabhängig von der Gesamtphase ϕ zu bestimmen und auf diese Weise den balancierten und unbalancierten Strahlungsanteil parallel zur reellen Achse drehen zu können. Wieder unter der Annahme, daß sich der Phasenfehler φ_{tot} und die Strahlteileremission nur langsam mit der Wellenzahl ändern, kann für kleine Wellenzahlbereiche ($\Delta\sigma \sim 1 \text{ cm}^{-1}$) der Phasenfehler als konstant angenommen werden. Durch Differenzierung des Spektrums mittels Differenzbildung benachbarter spektraler Punkte wird der Differenzvektor in den Ursprung verschoben. Der Phasenwinkel des Differenzvektors entspricht somit dem Winkel der balancierten und unbalancierten Strahlung $S_{\text{bu}}(\sigma)$ gegenüber der reellen Achse.

$$\varphi_{\text{diff}}(\sigma) = \arctan\left(\frac{\partial S(\sigma)}{\partial \sigma}\right) \quad (60)$$

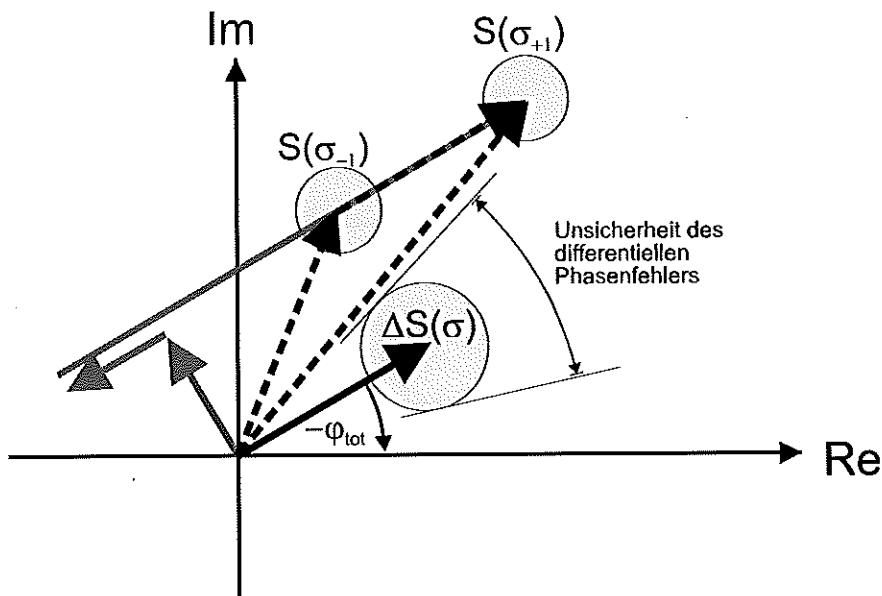


Abb. 23 Darstellung der spektralen Vektorkomponenten im komplexen Raum, wie sie zur Bestimmung der differentiellen Phase benötigt werden.
Die Fehlerbereiche werden als Kreise gekennzeichnet, wobei sich der Fehlerradius von $\Delta S(\sigma)$ aus der statistischen Addition der Einzelfehler von $S(\sigma_{-1})$ und $S(\sigma_{+1})$ ergibt.

Die Genauigkeit dieses Verfahrens geht mit der Amplitude der Differenz einher. In Abb. 23 ist dieser Sachverhalt illustriert. Unter der Annahme, die Kreise repräsentieren den Fehlerbereich der spektralen Punkte $S(\sigma_{-1})$ und $S(\sigma_{+1})$ bzw. der Differenzbildung $S(\sigma_{+1}) - S(\sigma_{-1})$, kann der resultierende Fehler leicht die Größenordnung der Differenz annehmen. Der Fehler

des Phasenwinkels wäre damit derartig groß, daß diese Methode nicht zuverlässig für die Phasenbestimmung herangezogen werden könnte. Dieses Verfahren ist nur dann anwendbar, wenn hinreichend starke Gradienten an den Linienflanken vorliegen, so daß der Differenzvektor gegenüber dem Rauschbeitrag dominiert.

Um die statistischen Fehler der so gewonnenen Phase zu reduzieren, läßt sich die bereits in Gl. (59) bestimmte instrumentelle Phase zusammen mit einer Geraden an die durch Differenzbildung gewonnene Phase anpassen. Die Punkte mit einer hohen absoluten Differenz werden dabei stärker bei dem Anpassungsprozeß gewichtet. Grundsätzlich ist eine Anpassung nicht über den gesamten Spektralbereich möglich, da durch die π -Periodizität der arctan-Funktion der Häufigkeitsverlauf in dem Punkteband nicht stetig ist. Die Begrenzung des Punktebandes erfolgt entweder durch die Phasenbestimmung vorangegangener Messungen oder durch die Phasenfunktion, die mit der klassischen Methode gewonnen wurde. Der statistische Fehler der Anpassung wird durch die Bandstruktur vergrößert, wenn die Häufigkeitsverteilung nicht mittig liegt, da keine symmetrische Verteilungsfunktion im Punkteband angenommen werden kann (Abb. 24). Ein iterativer Prozeß zum Anpassen der Bandbegrenzung führt hier mitunter zu präziseren Ergebnissen. Bei Messungen von MIPAS-B2 gegen den kalten Weltraum sind jedoch die Liniенstärken nicht ausreichend, um den nötigen Rauschabstand zu gewährleisten, so daß dieses Verfahren zur Phasenbestimmung nicht generell angewendet werden kann (Abb. 25).

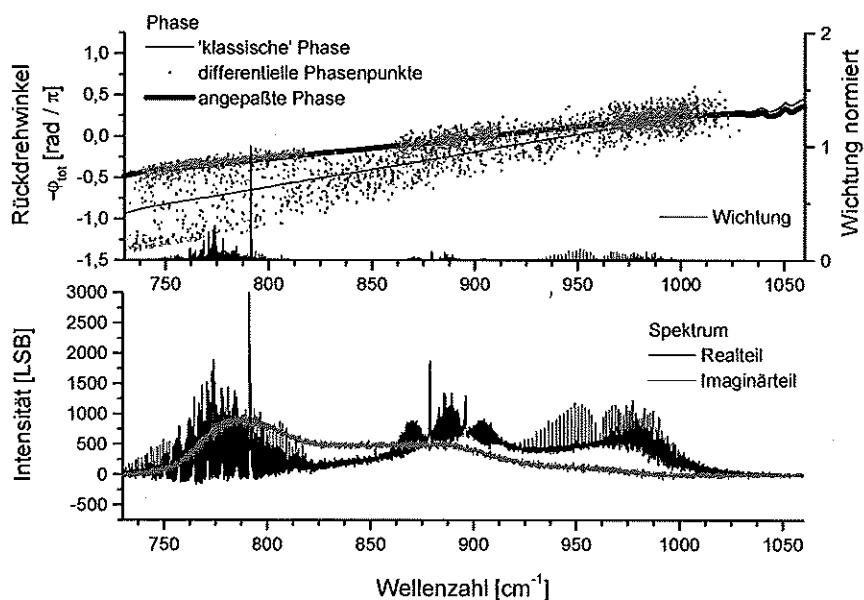


Abb. 24 Phasenfehlerbestimmung nach der differentiellen Methode. Als Begrenzung wurde das Ergebnis der klassischen Phasenbestimmung $\pm\pi$ verwendet.

Die instrumentelle Phase wurde mit einer Geradengleichung an die Phasenpunkte mit der dargestellten Wichtungsfunktion angepaßt. Es sind nur Phasenpunkte mit einem Wichtungsfaktor größer $5 \cdot 10^{-4}$ dargestellt, um die Häufungsbereiche besser zu erkennen. Die angepaßte Phasenfunktion kommt über die Häufungsbereiche der Phasenpunkte zu liegen. Im Imaginärteil lassen sich keine Linien mehr ausmachen

(Elevationswinkel: $-1,89^\circ$).

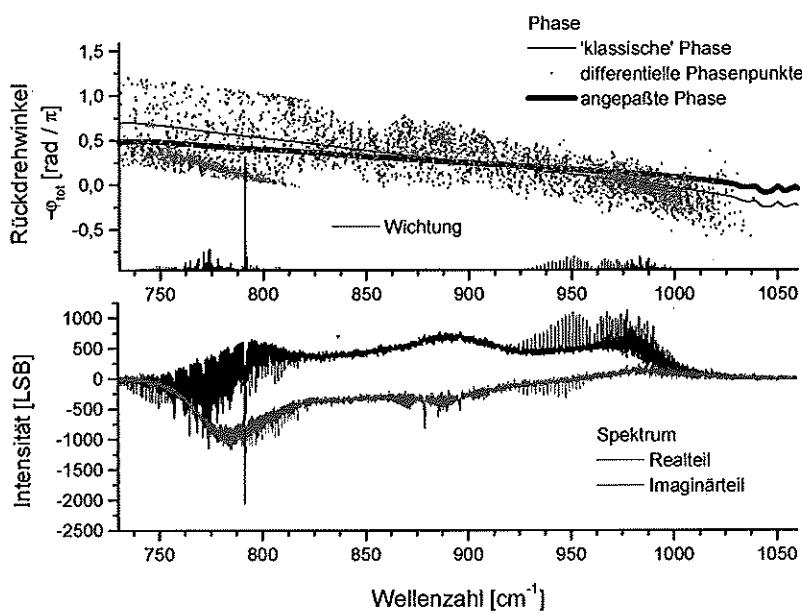


Abb. 25 Bestimmung des Phasenfehlers wie in Abb. 24. Die Messung erfolgte jedoch unter einem Elevationswinkel von $-0,71^\circ$.

Bei diesem Winkel findet sich keine ausreichende Begrenzungsfunktion, so daß das Anpassen der instrumentellen Phase an die Phasenpunkte fehlschlägt. Dies ist an den übriggebliebenen Linien im Imaginärteil deutlich sichtbar. Wieder sind nur Phasenpunkte mit einem Wichtungsfaktor größer $5 \cdot 10^{-4}$ dargestellt.

5.4 Die statistische Phasenbestimmung

Die im Rahmen dieser Arbeit entwickelte Methode zur Phasenbestimmung beruht auf einem statistischen Verhalten der Phaseninformationen innerhalb eines Spektrums und wird fortan als 'statistische Phasenbestimmung' bezeichnet. Wie in Abschnitt 3.1 bereits dargestellt, besitzt das vom Strahlteiler emittierte Spektrum keine Liniенstruktur, sondern verhält sich als Strahler, dessen Spektrum durch die Planckfunktion der Strahlteilertemperatur, die Emissivität des Strahlteilers und durch die optischen Filter definiert wird. Die grundlegende Idee zur Bestimmung der Phase als statistische Größe ist, daß im Imaginärteil des Spektrums, das die Strahlteileremission repräsentiert, keine atmosphärischen Linien erkennbar sein dürfen. Die Linien müssen sich vollständig im Realteil des Spektrums abbilden. Dies führt zu folgenden Aussagen:

- Die Korrelation μ zwischen dem Realteil des korrigierten Spektrums $S(\sigma)$ (mit den balancierten und unbalancierten Strahlungsbeiträgen) und dem Imaginärteil (der Strahlteileremission) sollte verschwinden.

$$\mu(\operatorname{Re}(S^{\text{HP}}), \operatorname{Im}(S^{\text{HP}})) = \sum_i [\operatorname{Re}(S^{\text{HP}}(\sigma_i)) * \operatorname{Im}(S^{\text{HP}}(\sigma_i))] \rightarrow \pm 0 \quad (61)$$

Der Index HP deutet auf eine Hochpaßfilterung hin, auf die noch detaillierter eingegangen wird.

- Im Imaginärteil des Spektrums sollte außer der langsam mit der Wellenzahl variierenden Strahlteileremission nur Rauschen ohne atmosphärische Liniensstrukturen erkennbar sein. Diese Annahme läßt sich verwenden, um die Minimierung der Varianz über alle Punkte

des Imaginärteils zu fordern. D.h. die erste Ableitung der Varianz muß verschwinden und die zweite Ableitung muß positiv sein. Die Varianz v wird über alle Punkte des Imaginärteils des hochpaßgefilterten Spektrums $S^{HP}(\sigma)$ bestimmt:

$$\begin{aligned} v(\text{Im}(S^{HP})) &= \sum_i [\text{Im}(S^{HP}(\sigma_i))]^2 \rightarrow \min \\ \Rightarrow \frac{dv}{d\varphi} &= 0 \quad \text{und} \quad \frac{d^2v}{d(\varphi)^2} > 0 \end{aligned} \quad (62)$$

Damit die Filterfunktionen der optischen und elektrischen Komponenten die Korrelation bzw. die Rauschbewertung nicht beeinflussen, wird das gesamte Spektrum hochpaßgefiltert und somit die langsam variierenden Komponenten eliminiert (z.B. [Walraven,1984]). Es hat sich als sinnvoll erwiesen, Signale durchzulassen, die eine maximale Linienbreite von der 2,5-fachen instrumentellen Auflösung Γ aufweisen¹⁵. D.h. daß im hochpaßgefilterten Spektrum $S^{HP}(\sigma)$ nur noch Signaturen sichtbar sind, deren Struktur höher aufgelöst ist als besagte Auflösungsgrenze von $2,5\Gamma$.

Das korrigierte Spektrum $S(\sigma)$ ergibt sich entsprechend Gl. (55) aus der Rückdrehung des gestörten Spektrums $S_{\text{gest}}(\sigma)$ um $-\varphi_{\text{tot}}(\sigma)$. Der gesamte Phasenfehler $\varphi_{\text{tot}}(\sigma)$ wird wiederum aus einer Überlagerung der instrumentellen Phase mit einer Geraden bestimmt. Letztere muß aus den eben aufgestellten Bedingungen gewonnen werden. Um die Geradengleichung mit der Steigung a_1 und dem Punkt a_0 an der Stelle σ_0 zu gewinnen, bietet sich eine iterative Entwicklung erster Ordnung der Rückdrehfunktion aus Gl. (57) an. Die Phase $\varphi_{\text{iter},m}(\sigma)$ wird dabei über mehrere Iterationsschritte der wahren totalen Phase $\varphi_{\text{tot}}(\sigma)$ mit

$$\begin{aligned} e^{-i\varphi_{\text{iter},m}} &= e^{-i\varphi_{\text{iter},m}} \left| \frac{\partial e^{-i\varphi_{\text{iter},m}}}{\partial \varphi_{\text{iter},m}} \right|_{\varphi_{\text{iter},m}} * \varphi_{\text{iter},m} + \dots \\ &= 1 - i\varphi_{\text{iter},m} + \dots \end{aligned} \quad (63)$$

angenähert, wobei der Index m den Iterationsschritt bezeichnet. Diese Reihenentwicklung ist nur zulässig für kleine Phasenfehler. Bei großen Phasenfehlern führt der Abbruch nach den ersten Gliedern zu einem nicht vernachlässigbaren Restglied. Um den Fehler der Reihenentwicklung des Rückdrehprozesses zu minimieren, sollte die Bestimmung der Parameter über die Reihenentwicklung iterativ erfolgen. Das Spektrum $S_{\text{iter},m+1}^{HP}(\sigma)$ aus dem $m+1$ -ten Iterationsschritt ergibt sich aus der Rückdrehung um die Phase $\varphi_{\text{iter},m}$ eines bereits korrigierten Spektrums $S_{\text{iter},m}^{HP}(\sigma)$ aus dem m -ten Iterationsschritt zu

$$S_{\text{iter},m+1}^{HP}(\sigma) = e^{-i\varphi_{\text{iter},m}} * S_{\text{iter},m}^{HP}(\sigma) \quad (64)$$

und aufgetrennt in Real- und Imaginärteil mit Gl. (63) zu

$$\begin{aligned} S_{\text{iter},m+1}^{HP}(\sigma) &= \text{Re}[S_{\text{iter},m}^{HP}(\sigma)] - \text{Im}[S_{\text{iter},m}^{HP}(\sigma) * \varphi_{\text{iter},m}] \\ &\quad + i[\text{Im}[S_{\text{iter},m}^{HP}(\sigma)] + \text{Re}[S_{\text{iter},m}^{HP}(\sigma) * \varphi_{\text{iter},m}]] \end{aligned} \quad (65)$$

¹⁵ Ein Hochpaßfilter im Wellenzahlraum bedeutet eine Beschränkung des Signals im Ortsraum (Analogie: Ein Hochpaßfilter im Zeitraum fordert eine Einschränkung im Frequenzraum).

Das Endergebnis für den Phasenfehler φ_{tot} nach dem m-ten Durchgang der Iteration bildet sich aus der Summe aller in den vorhergehenden Durchgängen bestimmten Phasen $\varphi_{\text{iter},m}$ mit

$$\varphi_{\text{tot}} = \sum_{n=0}^m \varphi_{\text{iter},n} \quad (66)$$

Als Initialisierung für die Startphase $\varphi_{\text{iter},0}$ bietet sich die Phase an, die durch das klassische bzw. durch das differentielle Verfahren ermittelt wurde und die bereits die instrumentelle Phase enthält. Damit muß für alle weiteren Iterationsschritte nur mehr eine für den Iterationsschritt spezifische Gerade

$$\varphi_{\text{iter},m} = g_{a_0, a_1}(\sigma) = a_0 + a_1(\sigma - \sigma_0) = a_0 + a_1 \Delta \sigma \quad (67)$$

ermittelt werden.

Für die Korrelation nach Gl. (61) folgt dann mit Gl. (65) für jeden Iterationsschritt

$$\begin{aligned} & \mu_{a_0, a_1} (\operatorname{Re}(S_{\text{iter},m+1}^{\text{HP}}), \operatorname{Im}(S_{\text{iter},m+1}^{\text{HP}})) \\ &= \sum_i \left[\frac{[\operatorname{Re}(S_{\text{iter},m}^{\text{HP}}(\sigma_i)) - a_0 \operatorname{Im}(S_{\text{iter},m}^{\text{HP}}(\sigma_i)) - a_1 \Delta \sigma \operatorname{Im}(S_{\text{iter},m}^{\text{HP}}(\sigma_i))]^2}{[\operatorname{Im}(S_{\text{iter},m}^{\text{HP}}(\sigma_i)) + a_0 \operatorname{Re}(S_{\text{iter},m}^{\text{HP}}(\sigma_i)) + a_1 \Delta \sigma \operatorname{Re}(S_{\text{iter},m}^{\text{HP}}(\sigma_i))]^2} \right] \rightarrow \pm 0 \end{aligned} \quad (68)$$

Indem die Korrelation (Anhang 11.2.1) gleich Null gesetzt wird, ergeben sich die Parameter a_0 und a_1 . Die Korrelation μ konvergiert schnell gegen Null für den Phasenabschnitt a_0 , nicht unbedingt jedoch für die Steigung a_1 , weil positive Korrelationswerte auf einer Seite des Spektralbereichs durch negative Korrelationswerte auf der anderen Seite des Spektralbereichs kompensiert werden können. Dies würde natürlich zu falschen Ergebnissen führen, so daß nur der Achsenabschnitt a_0 verwendet wird.

Analog folgt für die Varianz aus Gl. (62) mit Gl. (65)

$$\begin{aligned} & \frac{d v_{a_0, a_1} (\operatorname{Im}(S_{\text{iter},m+1}^{\text{HP}}))}{d \varphi_{\text{iter},m+1}} \\ &= \frac{d \sum_i [\operatorname{Im}(S_{\text{iter},m}^{\text{HP}}(\sigma_i)) + a_0 \operatorname{Re}(S_{\text{iter},m}^{\text{HP}}(\sigma_i)) + a_1 \Delta \sigma \operatorname{Re}(S_{\text{iter},m}^{\text{HP}}(\sigma_i))]^2}{d \varphi_{\text{iter},m+1}} = 0 \end{aligned} \quad (69)$$

und

$$\frac{d^2 v_{a_0, a_1} (\operatorname{Im}(S_{\text{iter},m+1}^{\text{HP}}))}{(d \varphi_{\text{iter},m+1})^2} > 0 \quad (70)$$

Die Varianz konvergiert schnell für die Steigung a_1 , nicht jedoch für den Achsenabschnitt a_0 .

Bei der Varianz wird die Verteilung der Werte im Imaginärteil des Spektrums als eine Gaußfunktion interpretiert. Eine Minimierung der Varianz entspricht einer Maximierung der Wahrscheinlichkeit, im Imaginärteil eine Gaußverteilung der Daten wiederzufinden. Entsprechend der Wahrscheinlichkeit an den Flügeln des Gaußverteilung verbleiben einzelne Linien im Imaginärteil. Eine Reduktion der Linien wird erreicht, wenn eine im Zentrum flachere und zu den Flügeln aber stärker abfallende Verteilung zugrunde gelegt wird. So werden bei der Maximierung der Wahrscheinlichkeit dieser Verteilung im Imaginärteil die Linien stärker unterdrückt. Eine Verteilungsfunktion P von

$$P = e^{-\frac{1}{4} \left(\frac{y_i - \bar{y}}{\sigma} \right)^4} \quad (71)$$

fordert zur Maximierung der Wahrscheinlichkeit die Minimierung des Ausdrückes

$$\kappa = \sum_{i=1}^N \left(y_i - \bar{y} \right)^4 \quad (72)$$

Dieser Ausdruck ähnelt der Kurtosis, die die Steilheit bzw. Flachheit gegenüber einer Gaußverteilung beschreibt. Die Minimierung von κ (Anhang 11.2.2) liefert eine schnellere Konvergenz der Ergebnisse für a_0 und a_1 mit

$$\begin{aligned} & \frac{d\kappa_{a_0, a_1} \left(\text{Im}(S_{\text{iter}, m+1}^{\text{HP}}) \right)}{d\varphi_{\text{iter}, m+1}} \\ &= \frac{d \sum_i \left[\text{Im}(S_{\text{iter}, m}^{\text{HP}}(\sigma_i)) + a_0 \text{Re}(S_{\text{iter}, m}^{\text{HP}}(\sigma_i)) + a_1 \Delta \sigma_i \text{Re}(S_{\text{iter}, m}^{\text{HP}}(\sigma_i)) \right]^4}{d\varphi_{\text{iter}, m+1}} = 0 \end{aligned} \quad (73)$$

und

$$\frac{d^2 \kappa_{a_0, a_1} \left(\text{Im}(S_{\text{iter}, m+1}^{\text{HP}}) \right)}{(d\varphi_{\text{iter}, m+1})^2} > 0 \quad (74)$$

als es die Minimierung der Varianz liefern würde. Ein wichtiges Kriterium für eine schnelle und eindeutige Konvergenz des Verfahrens ist eine gute Wahl einer Initialisierungsphase (Abschnitt 5.6) für den Iterationsprozeß. Speziell für das Varianzkriterium lassen sich lokale Minima finden, die jedoch nicht unbedingt dem absoluten Minimum entsprechen müssen.

In Abb. 26 ist der gesamte Ablauf der statistischen Phasenbestimmung als Blockschaltbild zusammengefaßt. Im ersten Durchgang des iterativen Verfahrens wird ein Spektrum unter Zuhilfenahme der Initialisierungsphase gebildet. Bei weiteren Iterationen wird jeweils die Phase verwendet, die aus dem vorangegangen Iterationsschritt gewonnen wurde. Anschließend erfolgt eine Hochpaßfilterung, so daß sich das Spektrum $S_{\text{iter}, m}^{\text{HP}}$ ergibt. Die Steilheit der Filterfunktion an den Filterkanten ist unkritisch, so daß ein verhältnismäßig kleiner Kernel verwendet werden kann. Aus diesem Spektrum wird nun entsprechend Gl. (68) die Korrelation und nach Gl. (73) die Ableitung der vierten Potenz gebildet. Entsprechend dem Modus des jeweiligen Iterationsschrittes werden nun a_0 und a_1 für eine verschwindende Korrelation bzw. für eine minimale vierte Potenz bestimmt. Zur schnelleren Konvergenz hat es sich bewährt, im ersten Iterationsdurchgang das Korrelationsverfahren anzuwenden.

Für die weiteren Schritte entscheidet das Abbruchkriterium, mit welchem Verfahren beim nächsten Iterationsdurchgang die Parameter bestimmt werden sollen. Demzufolge spielt das Abbruchkriterium eine entscheidende Rolle. Als Bewertung wird die relative Verbesserung des jeweiligen Kriteriums (verschwindende Korrelation bzw. Minimierung der Kurtosis) gegenüber dem vorhergehenden Iterationsschritt herangezogen. Unterschreitet die Verbesserung einen eingestellten Wert, so wird auf das jeweils andere Kriterium umgeschaltet. Der Iterationsprozeß wird als beendet erklärt, wenn entweder

- bei beiden Kriterien die relativen Verbesserungen unter dem Grenzwert liegen oder

- sich die Änderungen der Parameter a_0 und a_1 nur im statistischen Rauschen um Null bewegen oder
- die frei gewählte maximal zulässige Anzahl der Iterationsschritte erreicht ist.

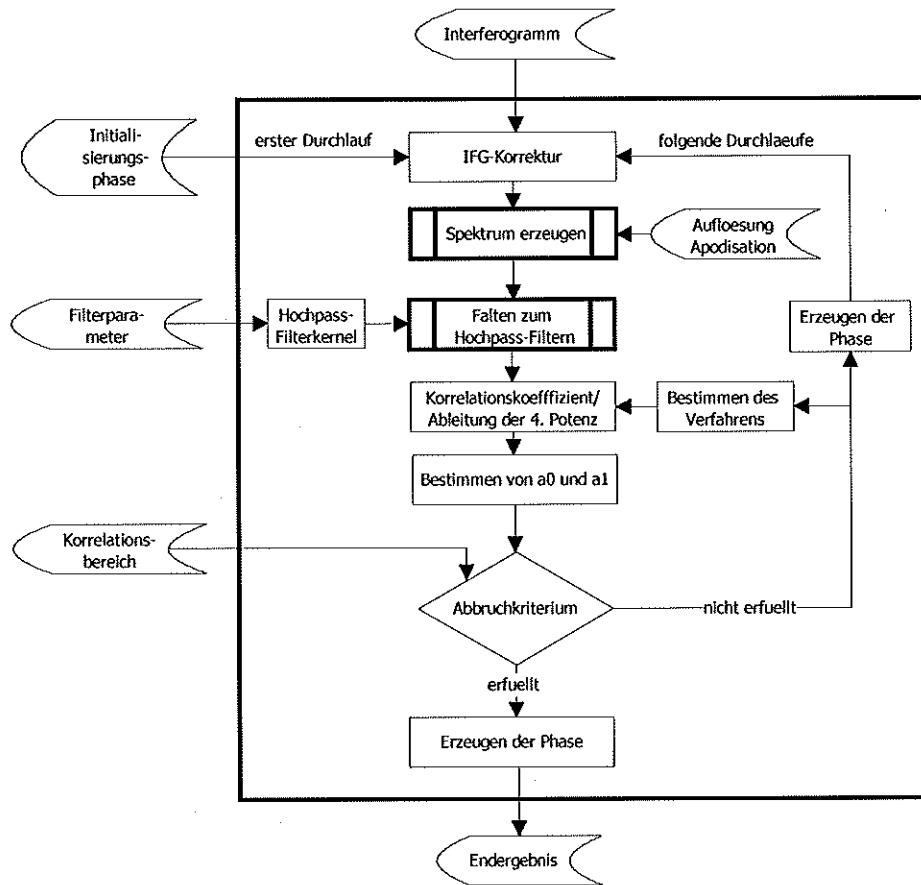


Abb. 26 Blockdiagramm des Ablaufs zur statistischen Phasenbestimmung. Siehe begleitender Textabschnitt.

In Abb. 27 sind die Konvergenzergebnisse einer Einzelmessung¹⁶ unter dem Elevationswinkel von $-0,71^\circ$ für die Parameter a_0 und a_1 beispielhaft dargestellt. Alle weiteren Abbildungen dieses Kapitels beziehen sich auf dieselbe Messung, außer es ist anderweitig vermerkt. Die ersten 3 Iterationsschritte wurden entsprechend dem Korrelationskriterium ausgeführt. Danach kam die Minimierung der vierten Potenz zum Zuge. Da der Absolutwert aufgetragen ist, bedeutet der Einschnitt bei Iterationsschritt 36 im linken Schaubild einen Vorzeichenwechsel von a_0 . Ab Iterationsschritt 60 finden keine Änderungen des Achsenabschnitts und der Steigung mehr statt.

Für die Messungen des dritten Kanals vom 8.5.1998, die im folgenden Kapitel bedeutend sind, sind im Anhang 11.2.3 die Entwicklungen der Phasenkoeffizienten dargestellt. Hier ist die Konvergenz bereits nach dem 20. Iterationsschritt erreicht.

¹⁶ Die Messung wurde während einer Meßkampagne in Kiruna am 24. März 1997 um 19:19:42 UT aufgenommen.

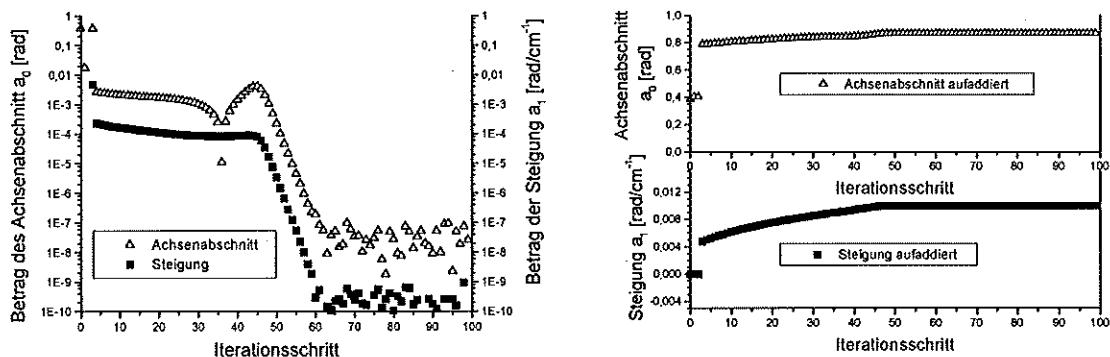


Abb. 27 Entwicklung des Achsenabschnitts $a_{0,m}$ und der Steigung $a_{1,m}$ der linearen Phase $\phi_{\text{iter},m}$ während der Iteration der statistischen Phasenbestimmung.
Für jeden Iterationsschritt m sind einzeln (links) und summiert (rechts) die Parameter dargestellt.

5.5 Die Korrektur des instrumentellen Phasenfehlers

Die bisher verwendete instrumentelle Phase basiert allein auf dem Phasenwinkel des komplexen Schwarzkörperspektrums. Die Strahlteileremission wurde nicht berücksichtigt. Da die Strahlteileremission über den Zeitraum einer Kalibrierungssequenz als konstant angenommen werden kann, kann sie nun berücksichtigt werden, indem auf die Strahlteileremission der Weltraummessungen zurückgegriffen wird. Entsprechend dem vorhergehenden Abschnitt wurde sie dort mittels der statistischen Phasenkorrektur ermittelt. Mit ihrer Hilfe ist es nun möglich, das Schwarzkörperspektrum, dessen Phase und somit ebenfalls die instrumentelle Phase zu korrigieren.

Aus Abb. 20 lässt sich der Winkel der Überdrehung $\Delta\varphi_{\text{tot}} = \phi - \varphi_{\text{tot}} = \phi_s$ ablesen und zu

$$\Delta\varphi_{\text{tot}}(\sigma) = \arcsin \frac{S_v(\sigma)}{\text{Re}[S(\sigma)]} \quad \Delta\varphi_{\text{tot}}(\sigma) \in \left[-\frac{\pi}{2} .. \frac{\pi}{2} \right] \quad (75)$$

bestimmen. Bisher ergab sich die instrumentelle Phase φ_{inst} aus der Phase φ_{tot} der Schwarzkörpermessung abzüglich der linearen Phase φ_{lin} (Gl. (57)). Aufgrund des linearen Zusammenhangs wird die instrumentelle Phase ebenfalls mit $\Delta\varphi_{\text{tot}}(\sigma)$ korrigiert.

$$\varphi_{\text{inst}}(\sigma) \rightarrow \varphi_{\text{inst}}(\sigma) - \Delta\varphi_{\text{tot}}(\sigma) = \varphi_{\text{inst}}(\sigma) - \arcsin \frac{S_v(\sigma)}{\text{Re}[S(\sigma)]} \quad (76)$$

und für den balancierten und unbalancierten Anteil des Schwarzkörperspektrums folgt

$$S_{\text{bu}}(\sigma) = \text{Re}[S(\sigma)] * \cos \Delta\varphi_{\text{tot}}(\sigma). \quad (77)$$

Aufgrund der geänderten Phase ergibt sich zwangsläufig eine geänderte Strahlteileremission im atmosphärischen Spektrum, welche wiederum eine erneute Korrektur der instrumentellen Phase mit sich bringt. Es zeigte sich aber, daß dieser iterative Prozeß nicht nötig ist, da eine erneute Korrektur Änderungen hervorruft, die geringer als die Meßgenauigkeit sind und demnach vernachlässigt werden können.

Die korrigierte instrumentelle Phase wird fortan auf alle atmosphärischen Spektren angewendet.

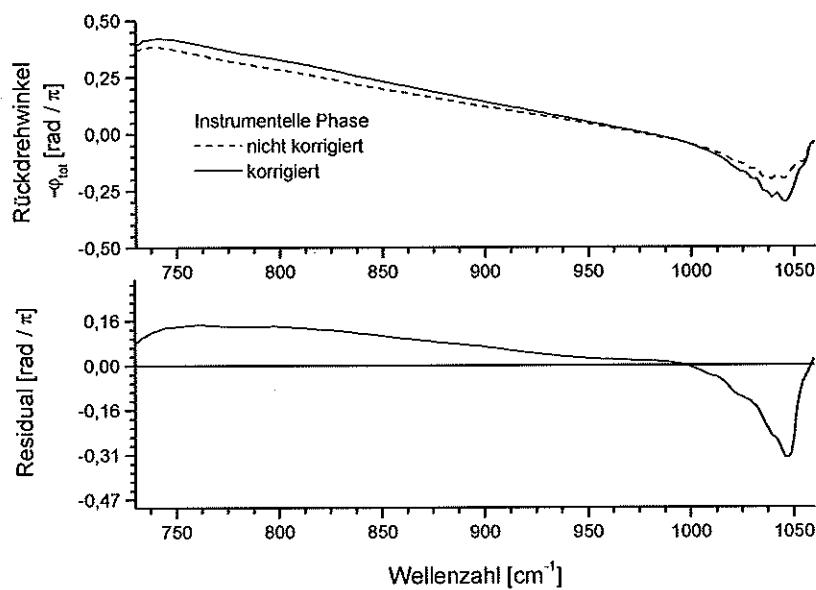


Abb. 28 Vergleich zwischen originärer Phase des Schwarzkörperspektrums, welche als instrumentelle Phase dient, und deren Korrektur aufgrund der ursprünglich vernachlässigten Strahlteileremission.

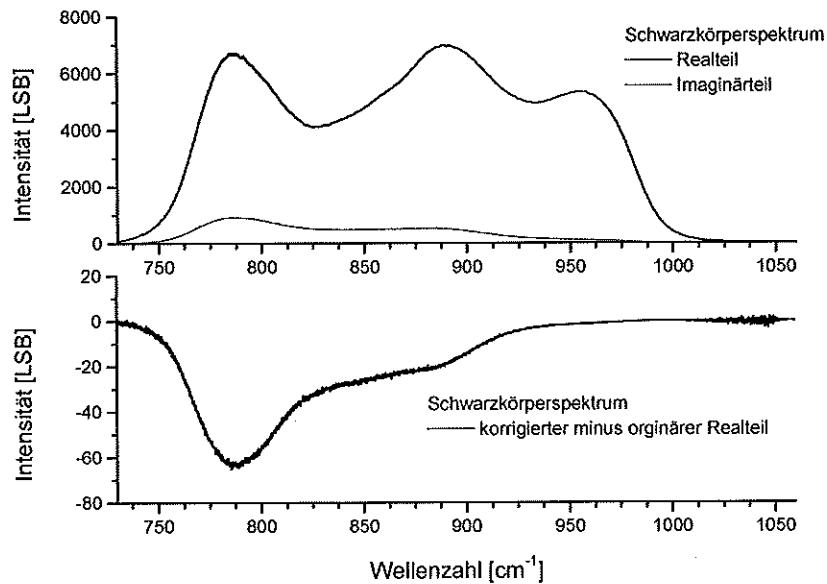


Abb. 29 Dargestellt sind die Auswirkungen der Korrektur der instrumentellen Phase auf das Schwarzkörperspektrum.
Die Änderungen im Realteil des Schwarzkörperspektrums liegen unter 1 % und sind daher im Spektrum selbst nicht sichtbar. Der Imaginärteil wächst auf den geforderten Anteil der Strahlteileremission an. Zur Rauschreduktion wurden die Schwarzkörpermessungen 32-fach koaddiert.

5.6 Der Prozeßablauf der Phasenbestimmung und Phasenkorrektur

In diesem Abschnitt wird mit Hilfe der bereits beschriebenen Schritte und Verfahren der gesamte Ablauf der Phasenkorrektur eines Interferogramms bzw. Spektrums zusammengefaßt. In den vorangegangen Abschnitten zeigte sich, daß für eine vollständige Phasenkorrektur atmosphärischer Spektren eine korrigierte instrumentelle Phase zur Verfügung stehen muß. Zudem wird eine Initialisierungsphase benötigt, die eine plausible Startphase darstellt, damit das Ergebnis der statistischen Phasenbestimmung nicht zu falschen lokalen Extremwerten konvergiert. Erst danach können die atmosphärischen Messungen phasenkorrigiert werden.

Instrumentelle Phase

Die Bestimmung und Korrektur der instrumentellen Phase erfordert folgende Arbeitsschritte:

1. Ermitteln der Phase aus einer Schwarzkörpermessung mittels des klassischen Phasenbestimmungsverfahrens (Abschnitt 5.2).
2. Herauslösen des nicht linearen Anteils aus der Phase des Schwarzkörperspektrums durch Subtraktion des linearen Anteils. Die instrumentelle Phase wird diesem nicht linearen Anteil gleichgesetzt (Abschnitt 5.2).
3. Die instrumentelle Phase muß aufgrund der nicht berücksichtigten Strahlteileremission korrigiert werden. Dazu wird eine atmosphärische Messung oder Weltraummessung ausgewählt, die ausreichend scharfe Linien aufweist und gleichzeitig ausreichend intensitätsstark ist, um das Rauschen gering zu halten. Messungen bei einer Tangentenhöhe von ca. 20 km bieten in der Regel ein gutes Verhältnis zwischen Linienschärfe und geringem Rauschen.
4. Bestimmung des atmosphärischen Spektrums der Messung aus Punkt 3. Der Ablauf ist im nächsten Abschnitt beschrieben.
5. Korrektur der instrumentellen Phase mit dem gewonnenen Imaginärteil des atmosphärischen Spektrums, welches der Strahlteileremission entspricht (Abschnitt 5.5).

Phasenkorrektur atmosphärischer Messungen

Unter Verwendung der korrigierten instrumentellen Phase können nun die atmosphärischen Messungen aller Tangentenhöhen einzeln phasenkorrigiert werden. Dabei kommen die folgenden Arbeitsschritte zum Einsatz:

1. Bestimmen der Initialisierungsphase mit der klassischen Methode (1. Stufe in Abb. 30, Abschnitt 5.2) und der evtl. darauf aufbauenden differentiellen Methode (2. Stufe, Abschnitt 5.3). Während der Flüge von MIPAS-B2 ergaben sich folgende Erfahrungen für die Initialisierungsphase:
 - Die klassische Phasenbestimmung kann als Initialisierungsphase verwendet werden. Wenn keine Linienstruktur in dieser Phase erkennbar ist, stellt die klassische Phasenbestimmung bereits eine gute Näherung des endgültigen Ergebnisses dar. Dies gilt für niedrige Tangentenhöhen, bei denen der Kontinuumsuntergrund in den atmosphärischen Spektren groß gegenüber der Strahlteileremission ist und für hohe

Tangentenhöhen, bei denen die Strahlteileremission groß gegenüber der balancierten und unbalancierten Strahlung ist.

- Die differentielle Phasenbestimmung bietet sich dann als initiale Phase an, wenn das S/N-Verhältnis der Linien im Spektrums > 10 ist, die Linien über den gesamten Spektralbereich möglichst homogen verteilt sind und die Häufigkeitsverteilung mittig zum Phasenband der Breite π liegt.
2. Zur Bestimmung der endgültigen Phase einer individuellen atmosphärischen Messung wird die statistische Phasenbestimmungsmethode angewendet (3. Stufe in Abb. 30, Abschnitt 5.4). Dies muß nur dann unterbleiben, wenn keine zur statistischen Phasenbestimmung notwendigen Linien im Spektrum vorhanden sind.
 3. Durch Korrektur des Interferogramms mit der gewonnen Phase erhält man nach Fouriertransformation das komplexe Spektrum, dessen reeller Anteil der balancierten und unbalancierten Strahlung entspricht.
 4. Es ist zu überprüfen, ob der imaginäre Anteil, der der Strahlteileremission entspricht, identisch dem der anderen Messungen einer Horizontsondierungssequenz ist. Aufgrund der Konstanz der Strahlteileremission dient diese Überprüfung der Qualitätssicherung der angewendeten Phasenbestimmung bzw. Phasenkorrektur.

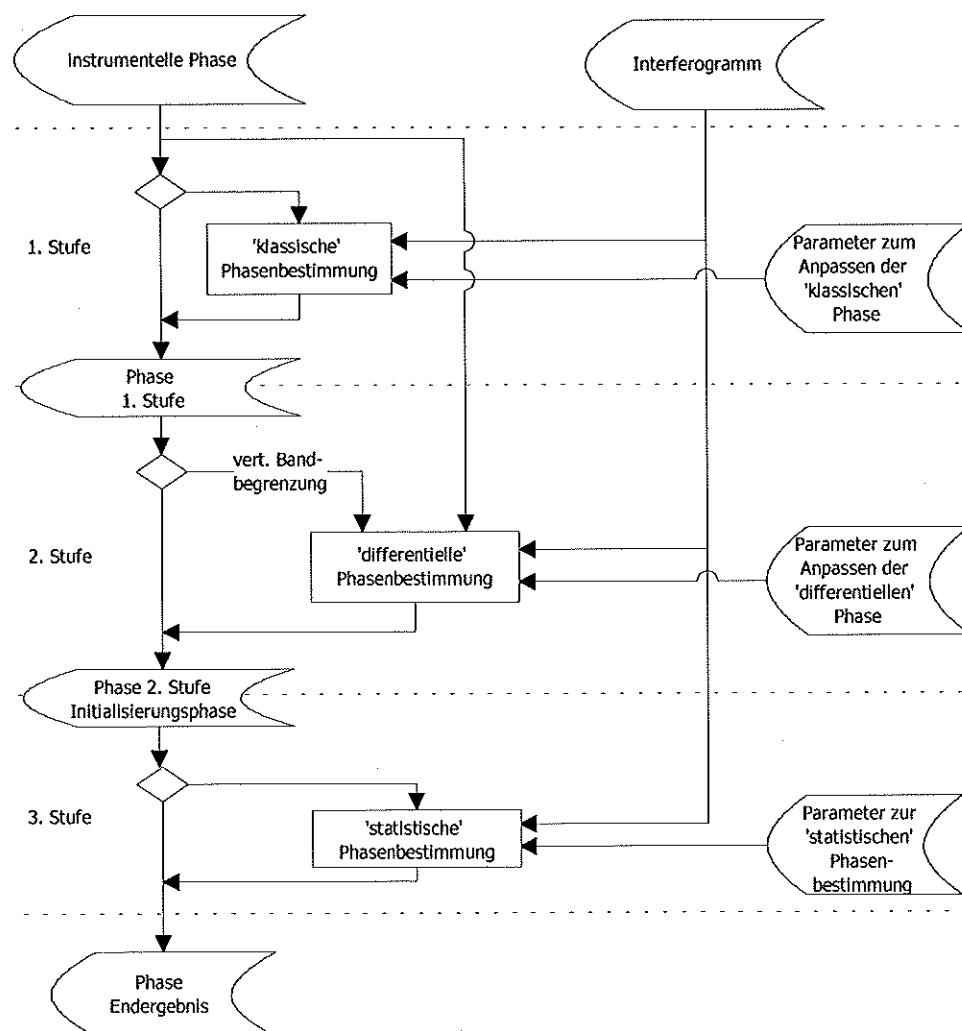


Abb. 30 Blockdiagramm des Ablaufs zum Bestimmen der Phase eines Interferogramms von einer atmosphärischen Messung. (Siehe begleitenden Textabschnitt.)

Im folgenden ist eine Sequenz von Iterationsschritten dargestellt (Abb. 31 bis Abb. 36), die typisch für die Bestimmung der Phase aus atmosphärischen Messungen ist. Als Datensatz wurde wieder die Einzelmessung mit dem Elevationswinkel von $-0,71^\circ$ ausgewählt, für die bereits in Abb. 22 die Phase nach der klassischen Methode, in Abb. 25 die Phase nach der differentielle Methode und in Abb. 27 die Iterationsschritte von a_0 und a_1 dargestellt wurden.

Als Initialisierungsphase wurde das Ergebnis der klassischen Phasenbestimmung verwendet, da sich aufgrund der innerhalb des Bandes gestreuten Phasenpunktewolke der differentiellen Phase die instrumentelle Phase nicht an die optisch sichtbare Häufungsverteilung anpassen läßt.

Die statistische Phasenbestimmung ermöglicht nun das Konvergieren der Phase an diese Häufungsverteilung. Deutlich erkennbar nähert sich die Phase dem erwarteten Ergebnis an. Gleichzeitig ist auch die Abnahme der Korrelation zwischen imaginären und realen Anteilen in den Spektren festzustellen, bis sich im imaginären Teil keine Linien wiederfinden. Die Phasenpunkte der differentiellen Methode sind zum Demonstrieren der Konvergenz der statistischen Methode zusätzlich dargestellt.

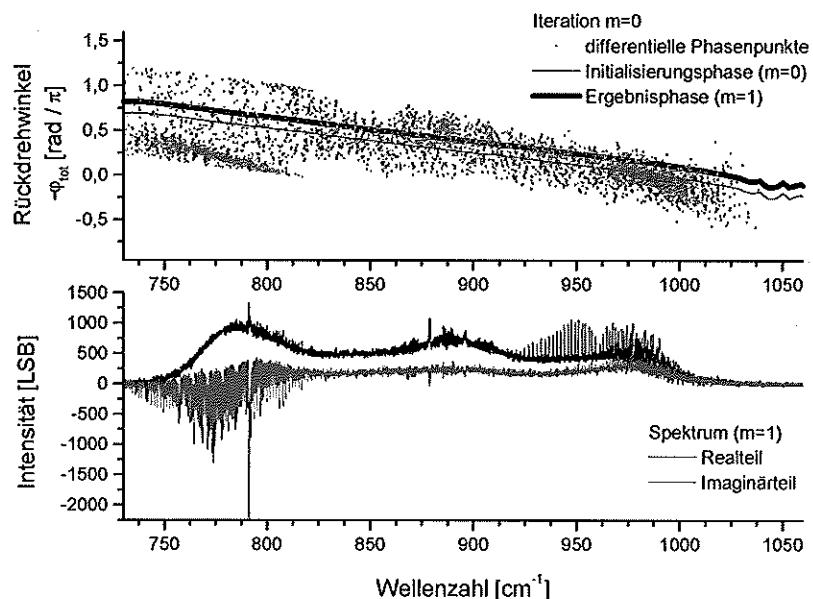


Abb. 31 0. Iterationsschritt: Das Spektrum ist mit der initialen Phase korrigiert worden. Aus den hochpaßgefilterten Spektren wurden a_0 und a_1 gewonnen, so daß sich die Phase für die erste Iteration ($m=1$) ergibt (Elevationswinkel $-0,71^\circ$).

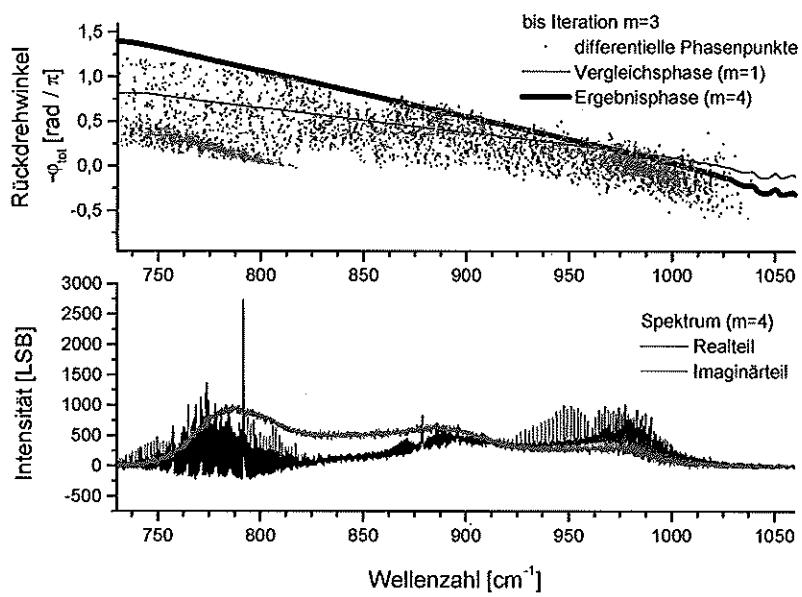


Abb. 32 Bis zum 3. Iterationsschritt: Die Phase läuft bereits in Richtung der Häufungspunkte.

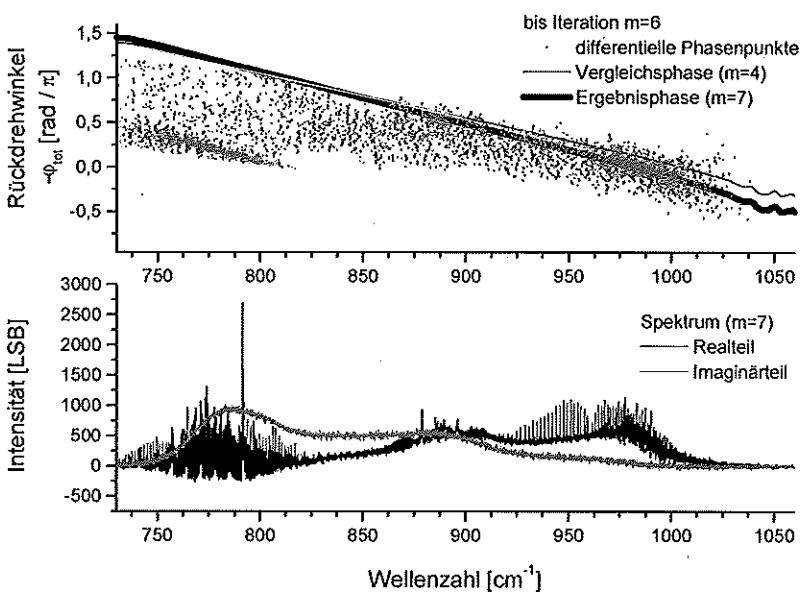


Abb. 33 Bis zum 6. Iterationsschritt: Die Verfeinerung der Phasenbestimmung beginnt.

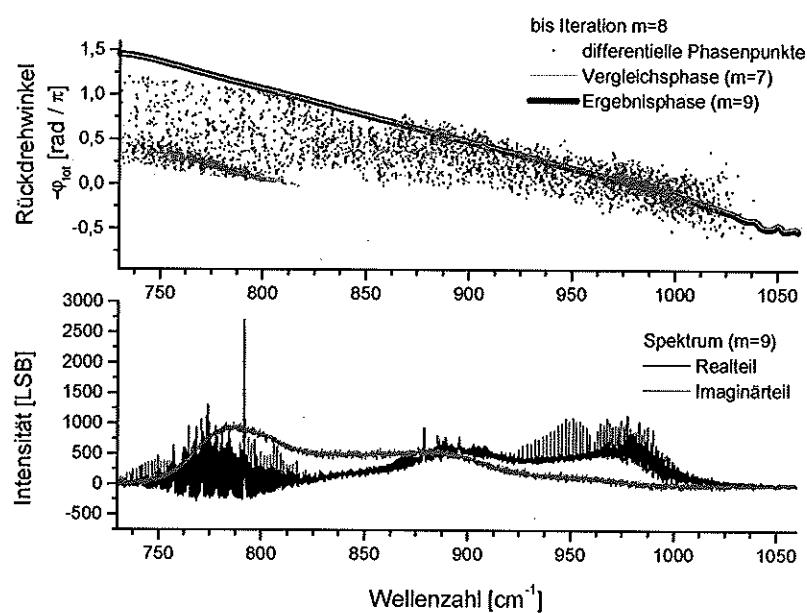


Abb. 34 Bis zum 8. Iterationsschritt: Im Imaginärteil sind keine Linien mehr erkennbar.

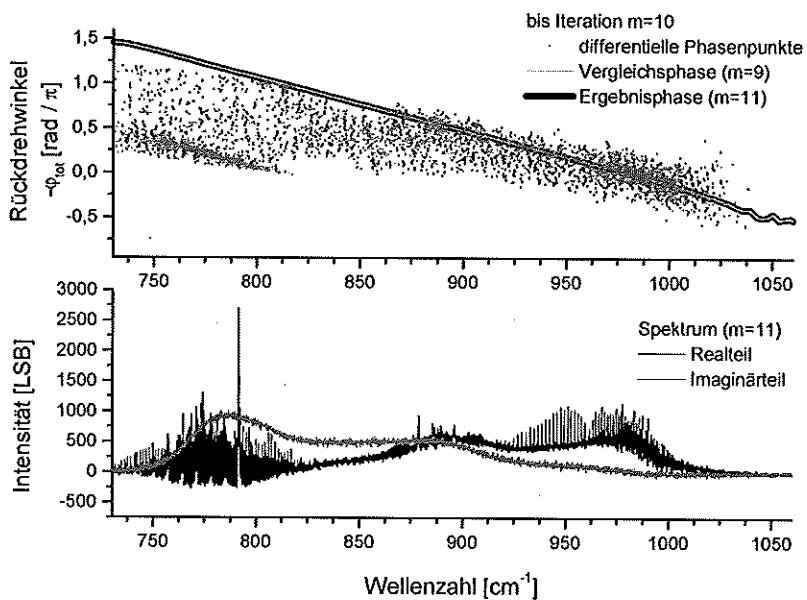


Abb. 35 Bis zum 10. Iterationsschritt: Ein weiteres Konvergieren ist grafisch nicht mehr erkennbar.

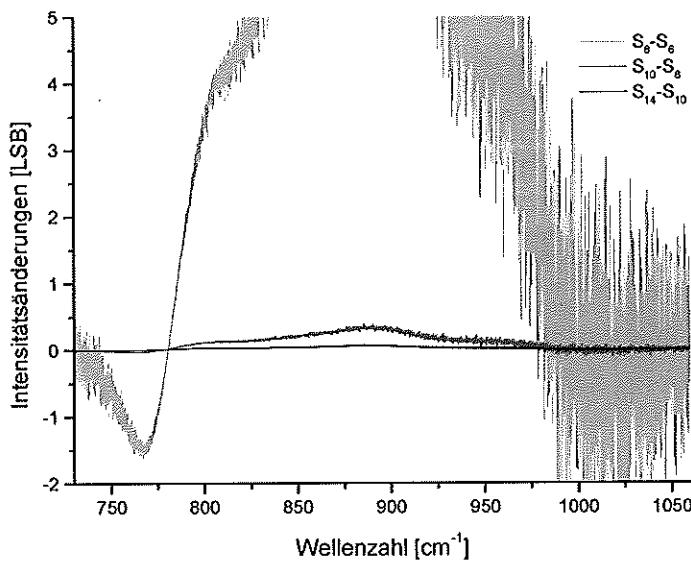


Abb. 36 zeigt Abweichungen zwischen den Iterationsschritten des Realteils der komplexen Spektren. Die hellgraue Kurve beschreibt die Differenz zwischen dem 6. und 8. Iterationsschritt, die dunkelgraue Kurve die Differenz zwischen dem 8. und 10. Iterationsschritt und schließlich die schwarze Kurve die Differenz zwischen dem 10. und 14. Iterationsschritt. Nach dem 10. Iterationsschritt sind keine signifikanten Änderungen mehr festzustellen.

5.7 Fehlerbetrachtung zur Phasenbestimmung

Die Bestimmung eines Phasenpunktes ist vergleichbar zu Abb. 23 mit einem Fehlerbereich behaftet, der sich durch einen Kreis im komplexen Raum darstellen lässt. Nach dem Fehlerfortpflanzungsgesetz folgt für kleine Fehler der instrumentellen Phasenbeziehung

$$\varphi_{\text{inst}} = \arctan \frac{\text{Im}[S_{\text{BB}}(\sigma)]}{\text{Re}[S_{\text{BB}}(\sigma)]} \quad \text{ein Phasenfehler von}$$

$$(\Delta \varphi_{\text{inst}})^2 = \left[\frac{\partial \varphi_{\text{inst}}}{\partial \text{Im}[S_{\text{BB}}(\sigma)]} \Delta \text{Im}[S_{\text{BB}}(\sigma)] \right]^2 + \left[\frac{\partial \varphi_{\text{inst}}}{\partial \text{Re}[S_{\text{BB}}(\sigma)]} \Delta \text{Re}[S_{\text{BB}}(\sigma)] \right]^2 \quad (78)$$

Da sich das Rauschen gleichermaßen auf den Real- und Imaginärteil aufteilt (Abschnitt 3.3), gilt

$$\Delta \text{Im}[S_{\text{BB}}(\sigma)] = \Delta \text{Re}[S_{\text{BB}}(\sigma)] = \Delta S_{\text{NESR,BB}} \quad , \quad (79)$$

wobei die Fehler $\Delta \text{Re}[S_{\text{BB}}]$ bzw. $\Delta \text{Im}[S_{\text{BB}}]$ den Standardabweichungen $\tilde{\sigma}(\text{Re}[S_{\text{BB}}])$ bzw. $\tilde{\sigma}(\text{Im}[S_{\text{BB}}])$ der Rauschanteile im Spektrum entsprechen und $\Delta S_{\text{NESR,BB}}$ somit den statistischen Rauschfehler des Spektrums angibt. Der Phasenfehler vereinfacht sich damit zu

$$(\Delta\varphi_{\text{inst}})^2 = \left(\frac{\Delta S_{\text{NESR,BB}}}{|S(\sigma)|} \right)^2 \approx \left(\frac{1}{(S/N)_{\text{BB}}} \right)^2 . \quad (80)$$

Nach Abschnitt 3.3 verteilt sich das Rauschen über den gesamten Spektralbereich gleichförmig und kann durch Berechnen der Varianz des Spektrums gewonnen werden. $\Delta S_{\text{NESR,BB}}$ lässt sich somit direkt aus den Bereichen des Schwarzkörperspektrums abschätzen, in denen der optische Filter dicht ist. Da der Realteil des Schwarzkörperspektrums durch dessen Absolutbetrag angenähert werden kann, ist der Fehler der instrumentellen Phase (in Radian) auch reziprok zum Signal-zu-Rauschen-Verhältnis des Spektrums (Gl. (80)). Nach Tab. 2 lässt sich das Signal-zu-Rauschen-Verhältnis für Schwarzkörpermessungen aus dem Verhältnis der Planckschen Strahlung zur NESR des Kanals für hochauflöste atmosphärische Spektren ermitteln. Dabei ist zu berücksichtigen, daß Schwarzkörpermessungen zum Bestimmen der Phase mit einer geringeren Auflösung berechnet werden als die hochauflösten Spektren, für die die NESR bestimmt ist. Das Rauschen der Schwarzkörpermessung wird dadurch um die Wurzel aus dem Auflösungsverhältnis reduziert.

Der instrumentelle Phasenfehler für den ersten Kanal des in diesem Kapitel betrachteten Fluges vom 8.5.1998 beträgt aufgrund des hohen Signal-zu-Rauschen-Verhältnisses nur $8,0 \cdot 10^{-4}$ rad (0,046 Grad)¹⁷. Die bislang unberücksichtigte Korrektur der instrumentellen Phase kann gleichermaßen abgeleitet werden und trägt den gleichen Fehlerbetrag nochmals bei. Bei einem gesamten instrumentellen Phasenfehler von $1,6 \cdot 10^{-3}$ rad kann dieser für weitere Betrachtungen vernachlässigt werden.

Bei der statistischen Phasenbestimmung kommen noch die Anpassungsfehler für den Achsenabschnitt a_0 und für die Steigung a_1 hinzu. Wendet man das Fehlerfortpflanzungsgesetz rigoros an, so ergeben sich getrennt für das Korrelationsverfahren und die Minimierung der vierten Potenz die im Anhang 11.2, Gl. (145) und Gl. (154) berechneten Fehler. Als Ausgangsprodukt für die Berechnung dient ein phasenkorrigiertes Spektrum, bei dem a_0 und a_1 nicht weiter konvergieren.

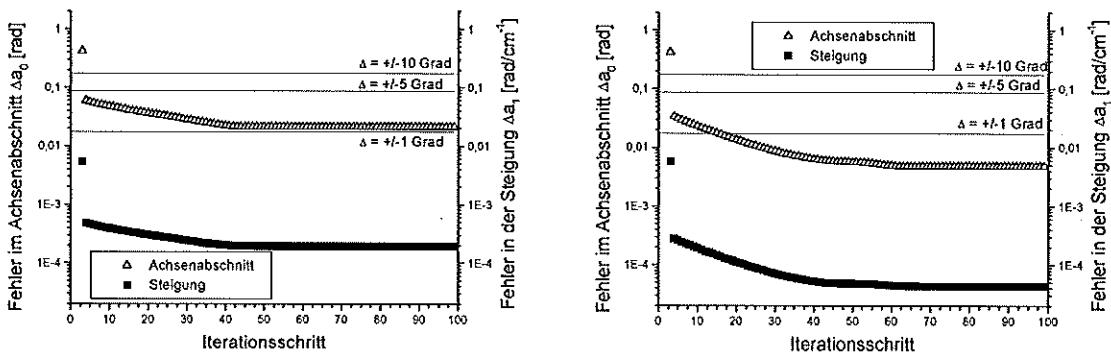


Abb. 37 Fehlerentwicklung während der statistischen Phasenbestimmung.
Die Konvergenz auf einen Restfehler ist deutlich zu erkennen. Links ist die Entwicklung eines einzelnen und rechts eines koaddierten Interferogramms dargestellt.

¹⁷ Mit der NESR von $1,5 \cdot 10^{-8} \text{ W}/(\text{cm}^2 \text{ sr cm}^{-1})$ und einer mittleren Planckschen Strahldichte im ersten Kanal von $3,5 \cdot 10^{-6} \text{ W}/(\text{cm}^2 \text{ sr cm}^{-1})$ beträgt das Signal-zu-Rauschen-Verhältnis (S/N) 233 im hochauflösten Modus mit der Auflösung von $0,035 \text{ cm}^{-1}$. Bei einer Auflösungsreduktion auf 1 cm^{-1} erhöht sich das S/N um $\sqrt{1/0,035} = 5,35$ auf 1245. Der Phasenfehler entspricht dem reziproken Wert, also $8 \cdot 10^{-4}$ rad.

Der Restfehler der statistischen Phasenbestimmung berechnet sich ebenfalls mit Hilfe der Fehlerfortpflanzung und ist im Anhang 11.2.2, Gl. (157) angegeben. Der gesamte Restphasenfehler setzt sich statistisch aus den Fehlern der instrumentellen und statistischen Phasenbestimmung zusammen, die aus unterschiedlichen Messungen gewonnen wurden, und ergibt

$$(\Delta\varphi_{\text{tot}}(\sigma))^2 = (\Delta\varphi_{\text{inst}})^2 + (\Delta\varphi_{\text{stat}}(\sigma))^2 , \quad (81)$$

wobei der Anteil der instrumentellen Phasenbestimmung vernachlässigt werden kann. Der gesamte Restphasenfehler von der statistischen Phasenbestimmung im Konvergenzfall (Abb. 37) beträgt für das gezeigte Spektrum im Minimum $1,4 \cdot 10^{-2}$ rad (0,8 Grad) bei 815 cm^{-1} und im absoluten Maximum $5,0 \cdot 10^{-2}$ rad (0,016 Grad) bei 1076 cm^{-1} am Ende des Spektralbereiches.

Zum Überprüfen der Zuverlässigkeit dieser Fehlerangaben und deren Bestimmung wurden die weiteren 24 gemessenen Spektren dieses Elevationswinkels von $-0,71^\circ$ jeweils einzeln ausgewertet und für die beiden Parameter a_0 und a_1 die Streuung bestimmt. Dabei ist zu berücksichtigen, daß in dieser Streuung noch die Variabilitäten des linearen Phasenfehlers aufgrund von Geräteinstabilitäten enthalten sind. Mit den Streuungen für a_0 von $1,35 \cdot 10^{-2}$ rad und für a_1 von $1,14 \cdot 10^{-4}$ rad/cm $^{-1}$, die sich in diesem Fall quadratisch addieren, ergibt sich für 815 cm^{-1} ein Fehler von $1,37 \cdot 10^{-2}$ rad und für 1076 cm^{-1} ein Fehler von $3,5 \cdot 10^{-2}$ rad. Beide Ergebnisse stehen in sehr guter Übereinstimmung mit den Fehlerwerten, die mit dem Fortpflanzungsverfahren für ein einzelnes Spektrum ermittelt wurden. Der Vorteil des Fortpflanzungsverfahrens ist, daß für jede einzelne Messung die Qualität der Phasenbestimmung abgeschätzt werden kann. Dies kann zudem als weiteres Abbruchkriterium bei der statistischen Phasenbestimmung und zum Erkennen von fehlerhaften Interferogrammen dienen.

Die Auswirkung des Phasenfehlers auf das Spektrum ist bereits in Abschnitt 5.1 und Gl. (54) angegeben worden. Da es sich im Konvergenzfall um kleine Winkel handelt, kann der (1-Kosinus)-Term vernachlässigt werden, so daß sich der Fehler im Spektrum mit

$$\Delta S_{\text{bu}}(\sigma) \approx | -S_v(\sigma) \sin \Delta\varphi_{\text{tot}}(\sigma) | \approx S_v(\sigma) \Delta\varphi_{\text{tot}}(\sigma) \quad (82)$$

angeben läßt. D.h. daß sich als Fehler nur die imaginäre Strahlteileremission S_v proportional mit dem Fehler der Phasenbestimmung in Radian auf die reelle Achse der balancierten und unbalancierten Strahlung S_{bu} auswirkt. In Abschnitt 7.6 wird der Einfluß eines Restfehlers $\Delta\varphi_{\text{tot}}(\sigma)$ auf die kalibrierten Spektren näher untersucht und quantifiziert.

5.8 Bemerkungen zur Phasenbestimmung

Die in diesem Kapitel entwickelte Methode der statistischen Phasenbestimmung ermöglicht es, die spektralen Komponenten des balancierten und unbalancierten Strahlungsbeitrags von der Strahlteileremission zu trennen. Erst dadurch ist es bei dem MIPAS-B2 Experiment möglich geworden, die Phasenfehler aufgrund optischer Komponenten und der elektrischen Gruppenlaufzeiten der Verstärker zu korrigieren, so daß Spektren zuverlässig berechnet werden können. Das beschriebene Verfahren ist mittlerweile im operationellen Einsatz bei der Auswertung der von MIPAS-B2 gewonnenen Interferogramme und kann auf alle Elevationswinkel angewandt werden. Diese präzise Phasenbestimmung und -korrektur bildet die Grundlage, um die im folgenden Kapitel dargelegte radiometrische Kalibrierung ausführen zu können.

Vorher sollen jedoch noch einige Punkte erörtert werden:

Das hier vorgestellte Verfahren ist notwendig geworden, da keine Strahlungsquelle derart über die anderen dominiert, daß an ihr die Phase eindeutig bestimmt werden kann. Diese Angleichung der Strahlungsbeiträge ist erstmals bei gekühlten Interferometern, die Emissionsstrahlung messen, aufgetreten [Revercomb, 1988]. Es stellt sich damit die Frage, inwieweit die Strahlteileremission bei bisherigen Interferometern zu Restfehlern beigetragen hat. Um dies zu untersuchen, sind hierzu nach dem derzeitigen Kenntnisstand Interferogramme nötig, die sich in beide Richtungen vom ZOPD gleich weit erstrecken. Dies ist jedoch bei den wenigsten Geräten der Fall. In diesem Bereich wäre mit Sicherheit noch Forschungsarbeit zu leisten, um schon bestehende Daten auf diesen Sachverhalt hin untersuchen zu können.

Für zukünftige gekühlte Experimente sollte daher darauf geachtet werden, die Interferometer so zu konstruieren, daß eine zweiseitige Interferogrammaufnahme möglich ist. Weiter sind für das Trennen der Strahlungsbeiträge schmalbandige Linienbeiträge zwingend notwendig. Falls keine entsprechenden Linienbeiträge im Spektrum zur Verfügung stehen, wäre es zu überlegen, Linien künstlich beizusteuern. Das kann in Form einer mit einem Referenzgas gefüllten Küvette erfolgen, die sich im Strahlengang befindet. Das Referenzgas sollte sich jedoch nur so wenig wie möglich mit dem zu messenden Gas spektroskopisch überlagern. Die Küvette könnte auch einzeln gegen einen Schwarzkörper ausgemessen und die Phaseninformation auf die nachfolgenden Interferogramme übertragen werden. Dies setzt jedoch ein äußerst stabiles und mit hoher Wiederkehrgenauigkeit arbeitendes Interferometer voraus. Um sehr schmale Linien zu generieren und um die Küvettengröße zu begrenzen, bietet sich ein Fabry-Perot-Etalon an, welches mit dem Referenzgas gefüllt ist. Gleichzeitig bietet eine solche Küvettenmessung ein präzises Normal zur spektroskopischen Kalibrierung (siehe auch Abschnitt 7.3). Die Entwicklung einer solchen Küvette ist ein komplexes Unterfangen, würde jedoch eine äußerst sichere Nachweismethode bieten, um die Phase auch in Abwesenheit von Linien im zu messenden Spektrum zu bestimmen.

Eine Alternative, ganz ohne Phasenkorrektur auszukommen, hat Revercomb [Revercomb, 1988] vorgeschlagen. Dabei wird der Phasenfehler durch die Kalibrierung eliminiert, indem die konstante Strahlteileremission im Weltraum und Schwarzkörperspektrum erhalten wird, und vom Atmosphärenspektrum subtrahiert wird. Dies setzt jedoch ein Interferometer voraus, das keinerlei Variation des linearen Phasenfehlers zwischen der Atmosphärenmessung und den Kalibrationsmessungen zuläßt. Die ist schon allein aufgrund thermischer Variabilität während des Fluges für MIPAS-B2 nicht gewährleistet. Zudem dürfen im Weltraumspektrum keinerlei Linien vorhanden sein, was bei Flughöhen von unter 40 km nicht der Fall ist. Diese Methode bietet sich folglich für Satelliteninstrumente an oder wenn ein kalter Schwarzkörper zur Verfügung steht, der den Weltraum als Kalibrierungssquelle ersetzt.

6 Das radiometrische Verhalten von MIPAS-B2

Mit der in Kapitel 5 dargestellten Phasenkorrekturmethode können nun für die verschiedenen Strahlungsquellen die entsprechenden phasenkorrigierten Spektren aus den Interferogrammen berechnet werden. Für die weiteren Betrachtungen wird nun von bereits phasenkorrigierten Spektren ausgegangen. Die aus den Horizontsondierungsmessungen gewonnen atmosphärischen Spektren S_{ATM} müssen noch in die physikalische Einheit der Strahldichte $\text{W}/(\text{cm}^2 \cdot \text{sr} \cdot \text{cm}^{-1})$ transformiert werden. Dieser Prozeß wird als 'radiometrische Kalibrierung' bezeichnet. Ein direktes Folgern aus den optischen Eigenschaften des Systems, der Etendue, dem Detektor, allen Reflexions- und Transmissionseigenschaften der optischen Komponenten sowie der elektrischen Verstärkungs- und Digitalisierungskette wäre zu ungenau, um die erforderliche Kalibrierungsgenauigkeit zu erlangen. Mittels eines radiometrischen Modells und der Kalibrierungsspektren von bekannten Quellen läßt sich jedoch das MIPAS-B2 Spektrometer sehr präzise kalibrieren. Die klassische zwei-Punkt-Kalibrierung bezieht einen Kalibrierungspunkt aus den kalten Weltraumspektren S_{DS} , deren Hintergrundstrahlungsintensität gleich Null gesetzt werden kann und dadurch die Untergrundstrahlung im Instrument definiert. Der zweite Kalibrierungspunkt ist die Messung eines Schwarzkörperspektrums S_{BB} mit einer definierten Planckschen Strahlungsverteilung $B(T)$, das zusammen mit der Untergrundstrahlung des Instruments die Empfindlichkeitsfunktion angibt. Damit ergibt sich die einfache Kalibrierungsfunktion

$$L_{\text{ATM}} = (S_{\text{ATM}} - S_{\text{DS}}) \frac{L_{\text{BB}}}{S_{\text{BB}} - S_{\text{DS}}} . \quad (83)$$

Da beide Kalibrierungsquellen spektrale Elemente enthalten, die nicht einem idealen Nullwert bzw. einer idealen Planckschen Strahlungsverteilung entsprechen, muß der Kalibrierungsprozeß einer eingehenden Prüfung unterzogen werden. Dieses Kapitel zeigt, daß das klassische Verfahren einer zwei-Punkt-Kalibrierung für die Kalibrierung der Spektren von MIPAS-B2 nicht ausreichend ist. Deswegen wird zuerst das radiometrische Verhalten des Instruments analysiert. Als Grundlage wird kurz auf die Strahlungsübertragung im Instrument eingegangen, um damit die einzelnen Strahlungsquellen, die für ein Interferogramm bzw. Spektrum relevant sind, zu quantifizieren. Bereits in Abschnitt 3.1 sind die unterschiedlichen radiometrischen Quellen des Interferometers definiert worden. Mit ihnen und den Beziehungen zur Strahlungsübertragung wird für MIPAS-B2 ein radiometrisches Modell entwickelt. Mit dessen Hilfe können die gemessenen Spektren charakterisiert und im Umkehrschluß die Methoden für eine exakte radiometrische Kalibrierung der atmosphärischen Spektren gewonnen werden (Kapitel 7). Mit dem entwickelten radiometrischen Modell lassen sich zudem die geräteinternen spektralen Quellen angeben, die weitere Rückschlüsse über das Verhalten des Instruments ermöglichen.

Die Linearität der Detektorempfindlichkeiten zwischen den Kalibrierungspunkten und den zu kalibrierenden Spektren muß zudem gewährleistet sein. Kleinert [Kleinert, 1998] hat das Empfindlichkeitsverhalten der verwendeten Detektoren eingehend untersucht und deren Nichtlinearitäten charakterisiert. In [Trieschmann, Friedl-Vallon, 1998] ist die Korrektur der Nichtlinearitäten durch die Korrektur der Responsivität im Interferogramm beschrieben. Im folgenden wird daher immer auf Spektren zurückgegriffen, die auf Interferogrammen beruhen, die bezüglich ihrer Nichtlinearität bereits korrigiert sind.

6.1 Die Strahlungsquellen im Instrument

Die von der Atmosphäre stammende Strahlung ist stark abhängig vom Elevationswinkel, unter dem das Instrument in die Atmosphäre schaut. Der Elevationswinkel wird dabei als Winkel der Blickrichtung gegen den Horizont angegeben, wobei positive Winkel eine nach oben gerichtete Blickrichtung beschreiben. Abb. 38 illustriert ein typisches Meßszenario während eines Fluges mit den Sequenzen der Horizontsondierung und den dazwischen liegenden Kalibrierungsmessungen, bestehend aus Weltraum- und Schwarzkörpermessungen. Bei den sogenannten Weltraummessungen, die unter einem Elevationswinkel von $+20^\circ$ in den Weltraum aufgenommen werden, sind nur kleine CO₂, O₃ und H₂O-Linien sichtbar.

Während der Horizontsondierung (vgl. Abb. 38) variiert der Elevationswinkel stufenweise zwischen $-0,7^\circ$ und $-5,5^\circ$. Die Strahlung aus der Atmosphäre nimmt mit tiefen Elevationswinkeln aufgrund der im allgemeinen zunehmenden Anzahl emittierender Moleküle im Sehstrahl kontinuierlich zu, bis bei Tangentenhöhen in der Tropopausenregion (von ca. 8 km in den polaren Breiten bis zu 13 km in mittleren Breiten) das Spektrum zunehmend von der Kontinuumsemission der Atmosphäre und starken Linienflügeln dominiert wird.

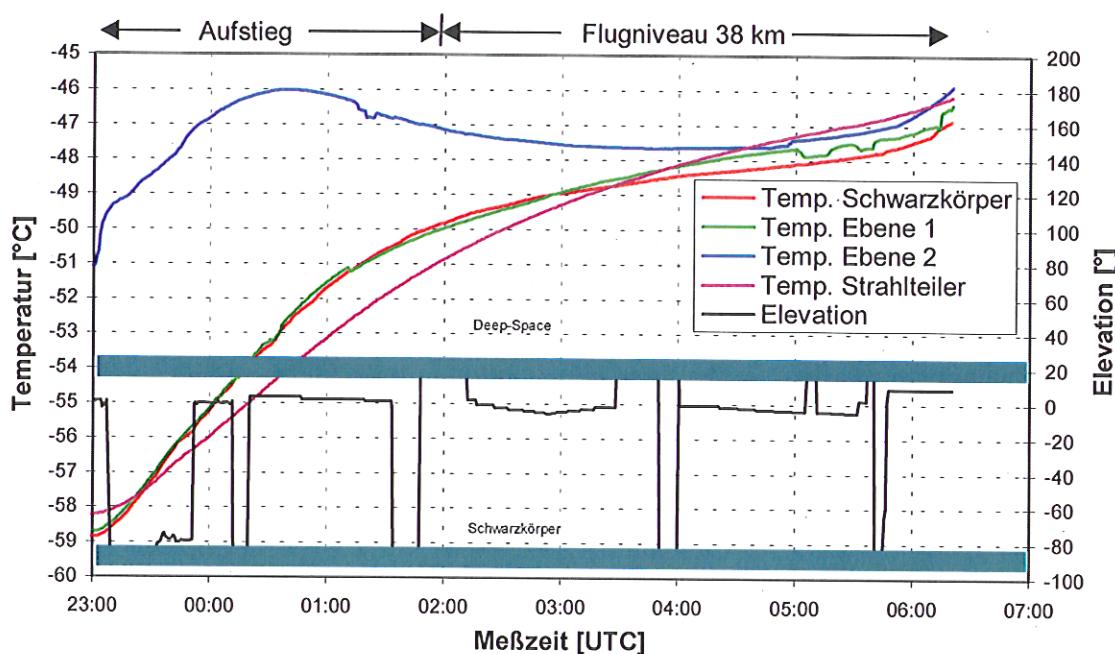


Abb. 38 Meßszenario und Temperaturgang im Inneren des Instrumentes während des Fluges am 8.5.1998. Der Elevationswinkel (rechte Ordinate) ist angegeben, um die Temperatur (linke Ordinate) den einzelnen Messungen zuordnen zu können. Deutlich ist die Übereinstimmung zwischen der Temperatur in Ebene 1 (Abb. 15) und der des Schwarzkörpers zu erkennen, der sich ebenfalls in Ebene 1 befindet und mit der Innenraumtemperatur variiert. Liegen die Elevationswinkel in den unterlegten Bereichen, so markiert dies die Zeiten der Kalibrierungsmessungen. Elevationswinkel von ungefähr -90° kennzeichnen Schwarzkörpermessungen. Bei Winkeln von $+20^\circ$ wird in den kalten Weltraum gemessen.

Der Strahlungsbeitrag eines Schwarzkörpers wird durch dessen Emissivität ϵ_{BB} und durch die Planckfunktion $B(T)$ beschrieben. Der im MIPAS-B2 integrierte zylindrische Schwarzkörper kann als optisch schwarz bezeichnet werden. Die Temperatur des Schwarzkörpers variiert

mit der Geräteinnentemperatur und liegt typischerweise bei einem Flug zwischen -60°C und -45°C (Abb. 38), wobei die Temperatur während der eigentlichen Horizontsondierung nur noch um ca. 3 K langsam ansteigt.

Die Variation der Strahlungsleistungen der einzelnen Quellen unterscheidet sich mitunter beträchtlich. Zum Erarbeiten des radiometrischen Modells sind noch alle Reflexions-, Transmissions-, Absorptions- und Emissionsvorgänge der im Gerät enthaltenen Gase und optischen Komponenten zu berücksichtigen, die auf den modulierten Anteil des Interferogramms Einfluß nehmen. Hier handelt es sich vornehmlich um

- Reflexionsverluste und dadurch bedingte Emissionen der Spiegeloberflächen,
- das Transmissions- und Reflexionsverhalten des Dewarfensters,
- Absorptions- und Emissionsvorgänge durch den ursprünglich an den Wänden ausgefrorenen Wasserdampf, der während des Aufstiegs und auf Flughöhe sublimiert,
- das verbliebene CO_2 im Gerät, das ebenfalls absorbieren oder emittieren kann.

Die Reflexionsverluste und damit einhergehenden Emissionen der Spiegeloberflächen sind vom Emissionsverhalten und der Oberflächentemperatur der Spiegel abhängig. Die Oberflächentemperaturen der Spiegel haben die Innenraumtemperatur des Instruments.

Das Dewarfenster W besteht aus einem ZnSe-Substrat, welches in dem betrachteten IR-Spektralbereich nahezu transparent ist. Aufgrund seines hohen Brechungsexponenten muß auf das Substrat eine Antireflexionsschicht aufgedampft werden. Da dadurch die Reflexionen jedoch nicht vollständig beseitigt werden, wird ein Teil der Gerätehintergrundstrahlung in den Strahlengang in Richtung des Strahlteilers reflektiert.

Die im Instrument vorhandenen Gase absorbieren und emittieren entlang des optischen Weges im Instrument. Messungen des Schwarzkörpers können jedoch nur dann Linien von Gasen im Instrument aufweisen, wenn die Strahlungstemperatur der Gase nicht im thermischen Gleichgewicht mit der Strahlungstemperatur der Quelle steht. Da der Schwarzkörper und alle mit dessen emittierten Photonen wechselwirkenden Gase vollständig im Innenraum des Gerätes liegen und somit im annähernden thermischen Gleichgewicht sind, verwundern auf den ersten Blick die in den Schwarzkörperspektren auftretenden Absorptionslinien (Abb. 41). In diesem Kapitel wird eine physikalische Erklärung für diesen Sachverhalt erarbeitet. Es soll jedoch schon vorweg genommen werden, daß für diese Linien zum einen Absorptionen zwischen Strahlteiler und Dewar und zum anderen Emissionen der Moleküle in diesem Bereich, die sich aufgrund ihrer Phase negativ abbilden, verantwortlich sind.

Bei atmosphärischen Strahlungsbeiträgen kann nicht von einem thermischen Gleichgewicht zwischen diesen und denen der Absorber bzw. Emittenten im Gerät ausgegangen werden. Von daher erwartet man Absorptions- bzw. Emissionslinien im Spektrum, die durch Gase im Instrument modifiziert werden.

Die unmodulierte Gerätehintergrundstrahlung, die über die Spiegeloberflächen zwischen Strahlteiler und Detektor und die Oberfläche des Dewarfensters in den Strahlengang eingestreut wird, geht nicht direkt in den Strahlungshaushalt des modulierten Interferogrammsignal ein. Jedoch erhöht sie den Gleichlichtanteil des Interferogramms und so das Photonenrauschen, das sich direkt in das Spektrum transformiert.

Die Strahlungsbeiträge der einzelnen Quellen überlagern sich im Instrument. Zu ihrer Trennung muß das gesamte Gerät radiometrisch verstanden werden. Dies ist auch die

Voraussetzung, um später das gemessene Spektrum kalibrieren zu können. Als grundlegende Gleichung zum Aufbau eines radiometrischen Modells gilt die allgemeine Strahlungsübertragungsgleichung (Anhang 11.3):

$$L(D) = L(0) * \tau(D) + B(T) * (1 - \tau(D)) . \quad (84)$$

Der erste Term in Gl. (84) gibt die Schwächung der einfallenden Strahlung $L(0)$ durch ein Medium der Dicke D an. Der zweite Term der Strahlungsübertragungsgleichung beschreibt die Emission des Mediums. Gl. (84) hat sowohl für durchstrahlte Medien als auch für Spiegel ihre Gültigkeit. Bei Spiegeln entspricht die Reflexion r des Spiegels der Transmission τ des durchstrahlten Mediums. Die Absorption χ bzw. Emission ε an der Spiegeloberfläche kann durch $1-r$ ausgedrückt werden. Streuprozesse an Molekülen können im infraroten Spektralbereich für diese Betrachtungen vernachlässigt werden. Bei starkem Beschlag der Spiegel können dann eventuell auftretende Streuprozesse in den Absorptionskoeffizienten integriert werden. Somit gilt für Spiegel Gl. (84) analog, nur die Transmission $\tau(D)$ wird durch die Reflexion r ersetzt.

Das MIPAS-B2 Interferometer lässt sich als eine Kette von Spiegeln mit dazwischen liegenden Gasvolumina beschreiben. In Abb. 39 sind drei Segmente exemplarisch dargestellt.

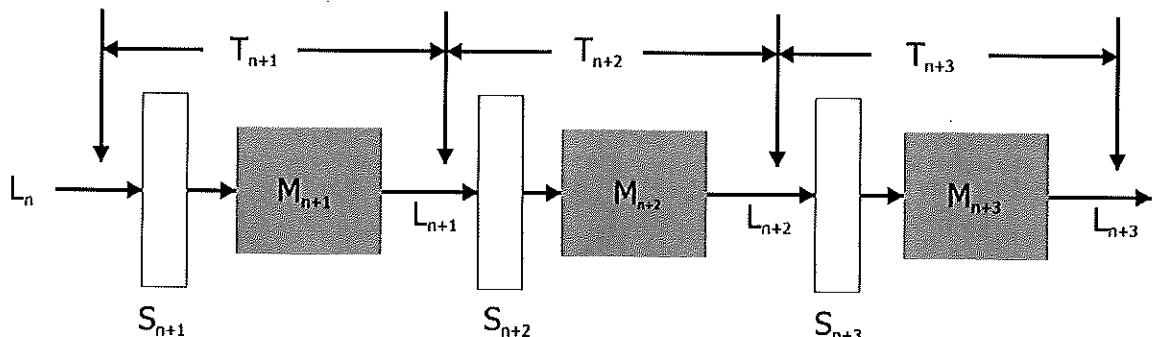


Abb. 39 Schematische Darstellung einer Kette von Spiegeln und dazwischen liegendem absorbierenden, bzw. emittierenden Medium für 3 Segmente.

L: Strahlidichte, S: Spiegel, M: Medium, T: Temperatur im angegebenen Bereich

Für die Strahlungsübertragung eines Segments bestehend aus einem Spiegel und dem darauf folgenden Medium folgt somit:

$$L_{n+1} = [L_n r_{n+1} + B(T_{n+1}) * (1 - r_{n+1})] \tau_{n+1} + B(T_{n+1}) * (1 - \tau_{n+1}) \quad (85)$$

Für eine Kette von Spiegeln und absorbierenden bzw. emittierenden Medien kann unter der Annahme, daß die Temperatur T_{nm} über alle diese Segmente annähernd gleich ist, die obige Gleichung zu¹⁸

¹⁸ Eine Reihe von m-n Spiegeln und Absorbern führt zu folgender Beziehung:

$$\begin{aligned} L_m = L_n & * \prod_{j=n+1}^m r_j \prod_{j=n+1}^m \tau_j + \sum_{j=n+1}^m B(T_j) * \prod_{k=j+1}^m r_k \prod_{k=j}^m \tau_k * \left[1 - \underline{\underline{r_j}} \right] \\ & + \sum_{j=n+1}^m B(T_j) * \prod_{k=j+1}^m r_k \prod_{k=j+1}^m \tau_k * \left[1 - \underline{\underline{\tau_j}} \right] . \end{aligned}$$

Dabei heben sich die doppelt unterstrichenen Terme weg, so daß sich die Gleichung

$$L_m = L_n * \prod_{j=n+1}^m r_j \tau_j + \sum_{j=n+1}^m B(T_j) * \prod_{k=j+1}^m r_k \tau_k * \left[1 - r_j \tau_j \right]$$

$$L_m = L_n r_{nm} \tau_{nm} + B(T_{nm}) [1 - r_{nm} \tau_{nm}] \quad (86)$$

zusammengefaßt werden. Der Index nm bezeichnet die Kette, die vom Element n bis zum Element m reicht. Mit diesem Ergebnis verhält sich eine Kette von Spiegeln und Absorbern/Streuern wie ein einzelnes absorbierendes und emittierendes Medium mit dem Reflexionskoeffizienten r_{nm} , dem Transmissionskoeffizienten τ_{nm} und der Temperatur T_{nm} .

6.2 Das radiometrische Modell des Interferometers

In folgender Abbildung sind die radiometrisch relevanten Elemente dargestellt, die für das radiometrische Verständnis von MIPAS-B2 betrachtet werden müssen.

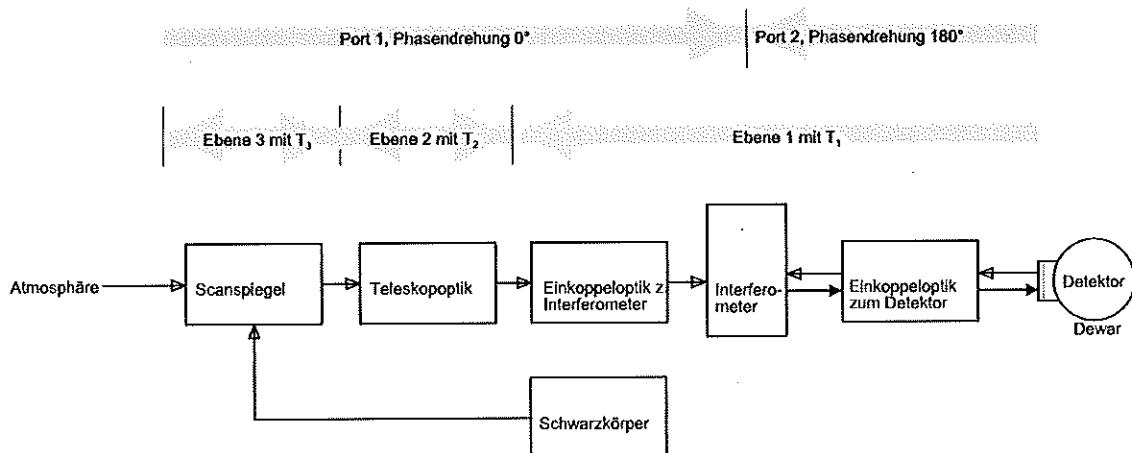


Abb. 40 Schematische Darstellung der Komponenten von MIPAS-B2, die radiometrisch zum Gesamtsignal beitragen.

Stellt man sich ein virtuelles, ideales Spektrometer an der Stelle des Interferometers in Abb. 40 vor, welches die Strahlungsbeiträge (hier mit \pm bezeichnet) aus den beiden Ports getrennt detektiert, so können die einzelnen Strahlungsbeiträge getrennt aufgeschrieben werden. Dabei wird das zusammengefaßte Reflexionsverhalten der Spiegel im Weg von der optischen Komponente A zur Komponente B mit dem Reflexionskoeffizienten r_{AB} beschrieben. Der gesamte Transmissionskoeffizient τ_{AB} wird gleichermaßen indiziert. Die vom Strahlteiler emittierte Strahlung ist nicht von Belang, da sie sich nur im Imaginärteil des Spektrums ausdrückt. Im weiteren wird ein thermisches Gleichgewicht der Gase in den Instrumentebenen eins und zwei und den Wänden des Instruments angenommen. Damit kann für die Gase im Instrument und die optischen Komponenten eine einheitliche Temperatur angegeben werden, die im folgenden durch T_{1-2} ausgedrückt wird. Entlang des optischen Weges zwischen Scanspiegel bzw. Schwarzkörper und Strahlteiler entfallen 30 bzw. 60 cm Weg auf die Ebene 3 des Scanspiegelgehäuses. Die Außentemperatur dieses

ergibt, welche sich bei homogener Temperatur $T_{nm} := T_j = \text{const.}$ zu

$$L_m = L_n \underbrace{\prod_{j=1}^{m-n} r_{n+j}}_{r_{nm}} \underbrace{\prod_{j=1}^{m-n} \tau_{n+j}}_{\tau_{nm}} + B(T_{nm}) \left[1 - \underbrace{\prod_{j=1}^{m-n} r_{n+j}}_{r_{nm}} \underbrace{\prod_{j=1}^{m-n} \tau_{n+j}}_{\tau_{nm}} \right]$$

vereinfacht.

Gehäuses ist während der Horizontsondierungssequenzen um maximal 7 K wärmer als T_{1-2} . Das in dem Scanspiegelgehäuse enthaltene Gas steht sowohl mit der Innenbewandung des Gehäuses als auch mit dem Instrument selbst in thermischem Kontakt, so daß auf diesem Teilweg mit einer erhöhten Gastemperatur gerechnet werden muß. Aufgrund des Streckenverhältnisses und des geringen Temperaturunterschieds wird dies im folgenden jedoch nicht berücksichtigt.

In der folgenden Auflistung sind die Strahlungsbeiträge + der unterschiedlichen Quellen aufgeführt, die das virtuelle Spektrometer messen würde.

Für die balancierte Strahlung (Index b) ist zwischen den folgenden Quellen zu unterscheiden:

- Der Schwarzkörper $L_{BB} = \epsilon_{BB} B(T_{1-2})$ emittiert ebenfalls mit der Temperatur T_{1-2} , da er im thermischen Gleichgewicht mit dem Instrument steht. Da die Schwarzkörperstrahlung an denselben Spiegeln wie die Strahlung aus der Atmosphäre reflektiert wird, kann die Gesamtreflexion mit $r_{SC\ ST}$ angegeben werden. Für das Schwarzkörperspektrum ergibt sich mit Gl. (86)

$$L_{b,BB} = r_{SC\ ST} \tau_{BB\ ST} \underbrace{\epsilon_{BB} B(T_{1-2})}_{L_{BB}} + (1 - r_{SC\ ST} \tau_{BB\ ST}) B(T_{1-2}) . \quad (87)$$

Die Gase zwischen dem Schwarzkörper und dem Interferometer sind ebenfalls im thermischen Gleichgewicht, so daß von der balancierten Schwarzkörperstrahlung keine Linienstrukturen, sondern ein Strahlungsbeitrag L_{BB} entsprechend der Planckfunktion bei T_{1-2} erwartet wird.

- Das 'kalte Weltraum'- Spektrum L_{DS} besitzt als Hintergrund den kalten Weltraum bei ca. 2,7 K, dessen schwarze Strahlung betragsmäßig außer acht gelassen werden kann. Es ist jedoch noch die Emission von den Molekülen H_2O , O_3 und CO_2 zu beobachten. Diese werden wiederum durch die Gase im Instrument absorbiert bzw. von deren Emissionen überlagert. So ergibt sich als Strahlungsleistung am virtuellen Spektrometer, wenn in den 'kalten Weltraum' geschaut wird:

$$L_{b,DS} = L_{DS} r_{SC\ ST} \tau_{SC\ ST} + (1 - r_{SC\ ST} \tau_{SC\ ST}) B(T_{1-2}) . \quad (88)$$

- Für die atmosphärischen Spektren L_{ATM} aus Horizontsondierungssequenzen, d.h. Messungen unter einem Beobachtungswinkel kleiner oder gleich 0° ergibt sich ein ähnliches Bild wie für die 'kalten Weltraum'-Spektren. Jedoch ist die eingestrahlte Energie weitaus höher:

$$L_{b,ATM} = L_{ATM} r_{SC\ ST} \tau_{SC\ ST} + (1 - r_{SC\ ST} \tau_{SC\ ST}) B(T_{1-2}) . \quad (89)$$

Zur unbalancierten Strahlung trägt primär das Verhalten des Dewarfensters auf einfallende Strahlung sowie das Medium zwischen Strahlteiler und Dewar bei, da die Emission aus dem mit flüssigem Helium gekühlten Dewar vernachlässigbar ist:

- Das Dewarfenster ist derartig ausgelegt, daß möglichst viel modulierte Strahlung auf die Detektoren trifft. Hierfür wird ein im infraroten Spektralbereich gering absorbierendes Material ausgewählt. ZnSe mit einem Absorptionskoeffizienten um $5 \cdot 10^{-4}$ je cm Materialstärke gewährleistet ein vernachlässigbares Absorptionsverhalten. Aufgrund des hohen Brechungsindex n_{ZnSe} von 2,4 ist jedoch eine Antireflexionsbeschichtung notwendig. Da die Absorption vernachlässigt werden kann, läßt sich die Reflexion mit $r_{ZnSe} = 1 - \tau_{ZnSe}$ angeben. Damit die modulierte Strahlung nicht in das Interferometer zurückgespiegelt wird, wird das Dewarfenster gegen die Strahlachse gekippt und gekeilt.

Somit reflektiert das Fenster breitbandig die Gerätehintergrundstrahlung mit der Temperatur $T_{Instrument}$, die nahezu T_{1-2} entspricht, und der Emissivität $\epsilon_{Instrument}$ des Gerätehintergrunds in Richtung des Strahlteilers. Diese reflektierte Strahlung wird mit L_{DE} bezeichnet und ergibt sich durch

$$L_{DE} = r_{ZnSe} \epsilon_{Instrument} B(T_{Instrument}) . \quad (90)$$

Überlagert wird die Reflexion durch Emissionen von den im Instrument enthaltenen Gasen zwischen dem Dewarfenster und dem Interferometer mit der Strahlungstemperatur von T_{1-2} . Da diese beiden Strahlungsbeiträge radiometrisch unbalanciert sind, tragen sie negativ zum Gesamtspektrum bei.

$$E_{u,DE} = - \left[L_{DE} r_{DE ST} \tau_{DE ST} + (1 - r_{DE ST} \tau_{DE ST}) B(T_{1-2}) \right] . \quad (91)$$

Die Absorptionen und Reflexionen entlang des optischen Wegs nach der Rekombination der Teilstrahlen am Strahlteiler müssen vom Strahlteiler bis zum Dewar noch näher untersucht werden (ausgefüllte Pfeile in Abb. 40). Die Transmission wird mit dem Transmissionskoeffizienten $\tau_{DE ST}$ und die Reflexion wieder mit $r_{DE ST}$ beschrieben. Jegliche Emissionen in diesem Teil des Strahlenganges werden durch das Interferometer nicht moduliert, so daß sie nur zum Gleichlichtanteil im Interferogramm beitragen und hier nicht weiter betrachtet werden müssen.

Das Modulationsverhalten des Strahlteilers sowie die Filtereigenschaften der optischen Filter und dichroitischen Strahlteiler im Dewar, die alle spektral langsam variierende Transmissions- und Reflexionsfunktionen besitzen, beeinflussen gleichermaßen alle Strahlungsanteile im Interferometer und werden durch eine Filterfunktion (FILT) beschrieben.

Das gemessene Gesamtspektrum S ergibt sich nun aus der Summe der balancierten und unbalancierten Strahlung und wird durch die Filterfunktion (FILT), den Koeffizienten $\tau_{DE ST}$ und $r_{DE ST}$ abgeschwächt. Mit der Normierungskonstanten G , die die willkürlichen Einheiten der Messung mit der radiometrischen Einheit $W/(cm^2 sr cm^{-1})$ verknüpft, schreibt sich das Gesamtspektrum S zu

$$S = \frac{FILT}{G} r_{DE ST} \tau_{DE ST} (E_{b,x} + E_{u,DE}) . \quad (92)$$

Der Index x steht für die unterschiedlichen Typen der balancierten Strahlung (Atmosphären-, Schwarzkörper- oder Weltraumstrahlung). Diese radiometrischen Summen S_{ATM} , S_{BB} und S_{DS} können nun in einen liniendominierten Anteil $S_{line,x}$ und einen langsam mit der Wellenzahl variierenden Basisanteil $S_{basis,x}$ aufgespaltet werden. Aus diesen Teilgrößen lassen sich die kalibrierten Spektren (Abschnitt 6.3) und gerätespezifische Größen ableiten.

Schwarzkörpermessungen

Bei Schwarzkörpermessungen kommen sowohl E_{BB} als E_{DE} zum Tragen. Dabei reduziert letztere das erwartete Schwarzkörperspektrum. Mit $r_{BB}=1-\epsilon_{BB}$ wird

$$S_{BB} = \frac{FILT}{G} \left[(B(T_{1-2}) - L_{DE}) r_{DE ST}^2 \tau_{DE ST}^2 - r_{BB} r_{SC ST} \tau_{BB ST} r_{DE ST} \tau_{DE ST} B(T_{1-2}) \right] . \quad (93)$$

Entsprechend den Transmissionsfaktoren τ in Gl. (93) sind nun neben dem langsam mit der Wellenzahl variierenden Anteil der Planckfunktion $B(T_{1-2})$ auch Linien zu erwarten. Abb. 41

zeigt ein typisches Schwarzkörperspektrum S_{BB} des 3. Kanals mit Wasserdampflinien aufgrund des im Instrument vorhandenen restlichen Wasserdampfes.

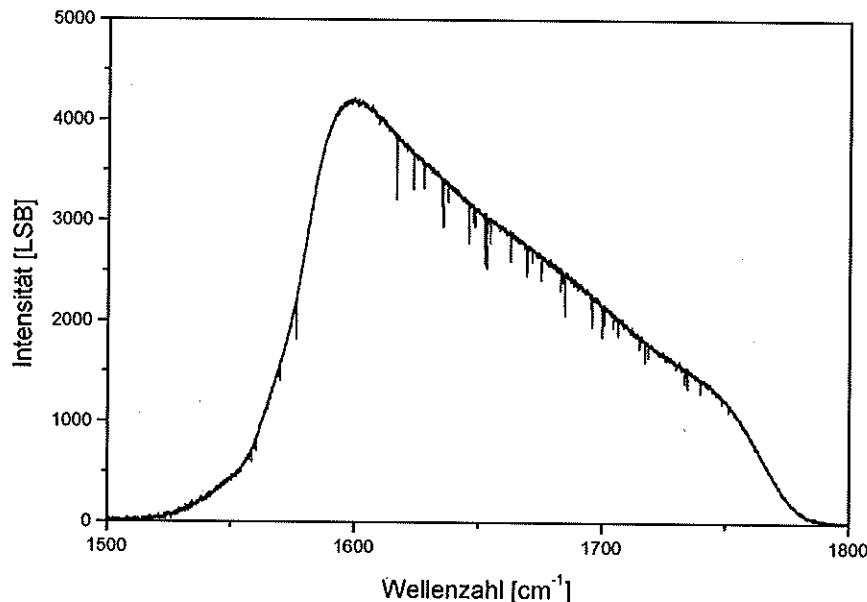


Abb. 41 Schwarzkörpermessung S_{BB} des 3. Kanals während des Fluges am 8.5.1998

Bei einem Umgebungsdruck von ca. 3,3 hPa auf 38 km Flughöhe (beim Flug am 8.5.1998) erstaunt die Stärke der H_2O -Absorptionslinien im Spektrum in Abb. 41, die bei einem H_2O -Mischungsverhältnis der Umgebungsluft von ~ 5 ppmv und der Strecke Strahlteiler/Dewar nur ca. 1 % betragen dürften [Wetzel,1999]. Während des Abkühlens des Experiments auf ca. 200 K ist jedoch auf der Innenseite der Ummantelung des Interferometers Wasserdampf ausgefroren, welcher bei dem Umgebungsdruck sublimiert. Der Sättigungsdampfdruck über

Eis $p_{H_2O} = 6.1 \cdot 10^{\frac{9.5T}{265.5+T}} \text{ hPa}$ [Möller,1973] beträgt während des Fluges bei einer Gerätetemperatur von $T = -48^\circ\text{C}$ bereits $4.9 \cdot 10^{-2} \text{ hPa}$, also das etwa 2500-fache des Wasserdampfpartialdrucks der Umgebung. Der wahre Wasserdampfgehalt im Interferometer wird aufgrund der Ausdünnung und Diffusion beträchtlich unterhalb des Sättigungsdampfdruckes liegen, jedoch erklären sich dadurch die starken Absorptionslinien.

Die gemessenen Schwarzkörperspektren lassen sich, wie auf letzter Seite erwähnt, in einen liniendominierten Anteil und einen Basisanteil aufspalten, indem die Transmission τ der Gasmoleküle im Instrument mit $\tau = 1 - \epsilon$ beschrieben wird.

$$\tau_{DEST}^2 = \left[1 - 2\epsilon_{DEST} + \underbrace{\epsilon_{DEST}^2}_{\text{reine Linienstruktur}} \right] \quad (94)$$

Da das Experiment in Höhen von 38 km fliegt, besitzen die Emissionslinien eine scharfe Liniенstruktur. D.h. der vom Schwarzkörper dominierte Anteil $S_{basis,BB}$ lässt sich durch Entfernen der Linien aus S_{BB} (Gl. (93)) gewinnen:

$$S_{basis,BB} = \frac{FILT}{G} \left[(B(T_{l-2}) - L_{DE}) r_{DEST}^2 - r_{BB} r_{SCST} r_{DEST} B(T_{l-2}) \right] \quad (95)$$

Weltraumspektrum

Das gemessene 'kalte Weltraum'-Spektrum S_{DS} (Abb. 42) setzt sich neben dem eigentlichen Weltraumspektrum E_{DS} primär aus geräteeigener Emission, Reflexion und Streuung E_{DE} zu

$$S_{DS} = \frac{\text{FILT}}{G} \left[\frac{(L_{DS} - B(T_{l-2}))r_{SC\ ST}\tau_{SC\ ST}}{(B(T_{l-2}) - L_{DE})r_{DE\ ST}\tau_{DE\ ST}} + \right] r_{DE\ ST}\tau_{DE\ ST} \quad (96)$$

zusammen. Der langsam variierende Anteil $S_{basis,DS}$ von S_{DS} ¹⁹

$$S_{basis,DS} = \frac{\text{FILT}}{G} \left[-L_{DE} r_{DE\ ST}^2 + B(T_{l-2}) \left[r_{DE\ ST}^2 - r_{DE\ ST} r_{SC\ ST} \right] \right] \quad (97)$$

ist eine Möglichkeit, die breitbandige Emission, Reflexion und Streuung des Gerätes zu ermitteln.

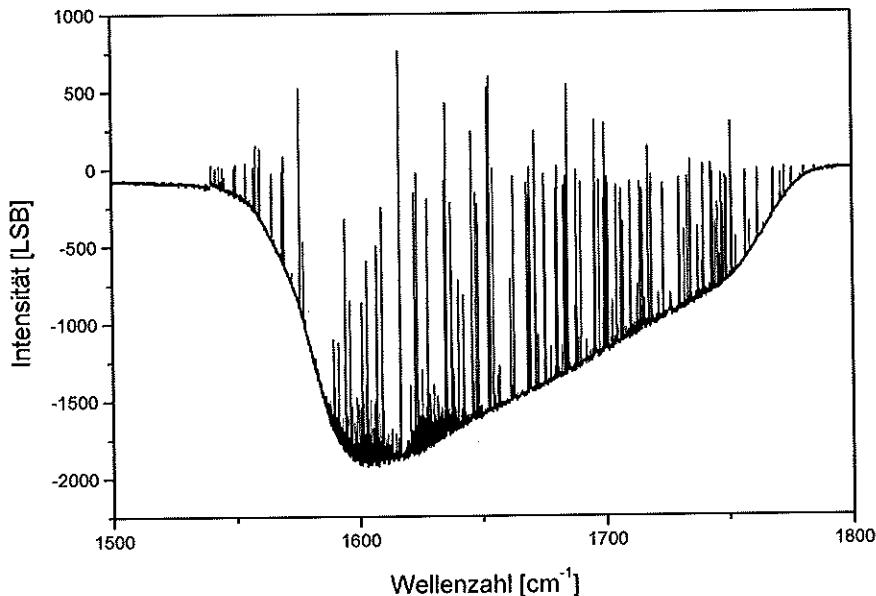


Abb. 42 Koaddierte 'kalte Weltraum'-Messung S_{DS} des 3. Kanals während des Fluges am 8.5.1998. Das Spektrum wird von Gasen oberhalb des Ballons und vom negativen Untergrund des Detektorports dominiert.

¹⁹ Gl. (96) lässt sich ebenfalls wie folgt schreiben

$$S_{DS} = \frac{\text{FILT}}{G} \left[\frac{L_{DS} r_{SC\ ST}}{\text{reine Linienstruktur}} \left[1 - \underbrace{\varepsilon_{SC\ ST}}_{\text{reine Linienstruktur}} \right] - L_{DE} r_{DE\ ST} \left[1 - \underbrace{\varepsilon_{DE\ ST}}_{\text{reine Linienstruktur}} \right] + \right. \\ \left. + B(T_{l-2}) \left[r_{DE\ ST} \left(1 - \underbrace{\varepsilon_{DE\ ST}}_{\text{reine Linienstruktur}} \right) - r_{SC\ ST} \left(1 - \underbrace{\varepsilon_{SC\ ST}}_{\text{reine Linienstruktur}} \right) \right] \right] r_{DE\ ST} \left(1 - \underbrace{\varepsilon_{DE\ ST}}_{\text{reine Linienstruktur}} \right)$$

Horizontsondierungsspektren

Für die atmosphärischen Spektren ergibt sich die Summe aus L_{ATM} und L_{DE} und den bekannten Transmission- und Reflexionsfaktoren analog zu den Weltraumspektren zu

$$S_{ATM} = \frac{FILT}{G} \left[\begin{aligned} & (L_{ATM} - B(T_{1-2})) r_{SC\ ST} \tau_{SC\ ST} + \\ & + (B(T_{1-2}) - L_{DE}) r_{DE\ ST} \tau_{DE\ ST} \end{aligned} \right] r_{DE\ ST} \tau_{DE\ ST} \quad (98)$$

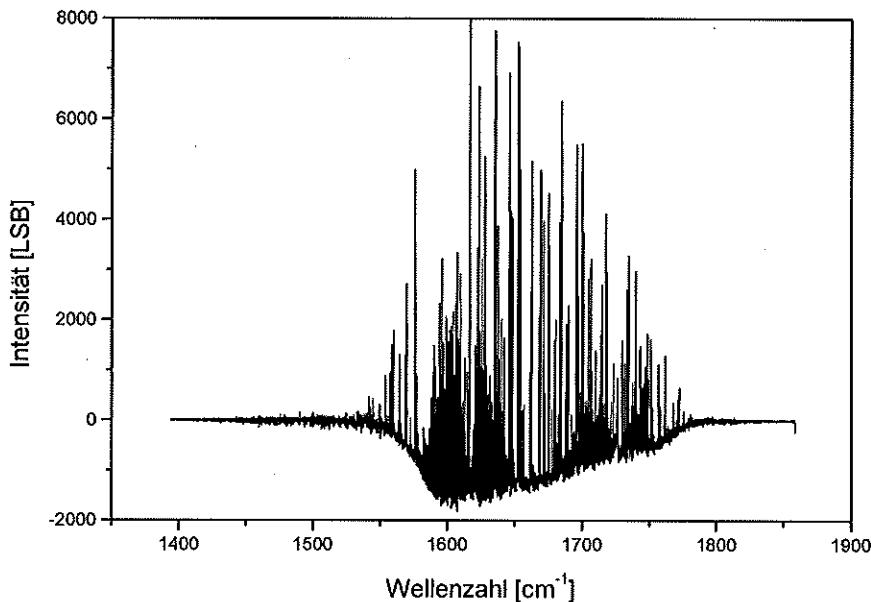


Abb. 43 Einzelmessung der Atmosphäre S_{ATM} des 3. Kanals während des Fluges am 8.5.1998 unter einem Elevationswinkel von $-0,71^\circ$. Deutlich erkennbar ist der vom Detektorport stammende negative Untergrund.

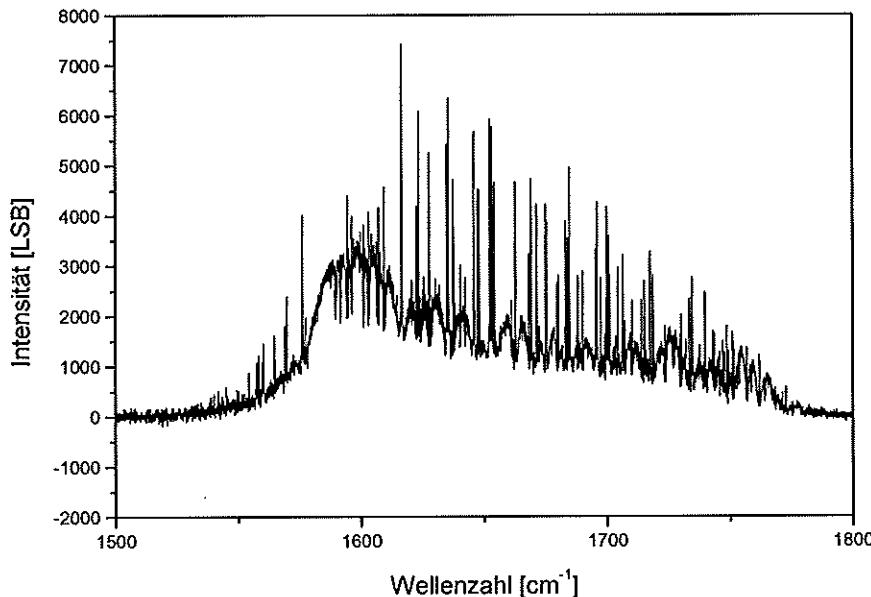


Abb. 44 Messung der Atmosphäre S_{ATM} des 3. Kanals während des Fluges am 8.5.1998 unter einem Elevationswinkel von $-5,52^\circ$.

Der Geräteuntergrund ist dem atmosphärischen Kontinuum gewichen. Die atmosphärischen Linien zeigen bereits Selbstabsorption.

6.3 Die Kalibrierungsgleichungen für die einzelnen Strahlungsquellen

Im vorangegangen Abschnitt wurden die Zusammenhänge zwischen den Strahlungsquellen L und den gemessenen Spektren S erarbeitet. Nun ist jedoch gerade die umgekehrte Abhängigkeit von Interesse: die kalibrierten Strahlungsquellen L aus den gemessenen Spektren S zu gewinnen.

Durch Kombination der Gl. (93) bis Gl. (97) lassen sich die gerätespezifischen Kenngrößen $r_{\overline{\text{SC ST}}}$, $r_{\overline{\text{DE ST}}}$, $\tau_{\overline{\text{SC ST}}}$, $\tau_{\overline{\text{DE ST}}}$ und $\frac{\text{FILT}}{G}$ errechnen. Damit können die Kalibrierungsgleichungen für die Strahldichten der Weltraumspektren L_{DS} und der Spektren aus den Horizontsondierungssequenzen L_{ATM} sowie die durch das Dewarfenster reflektierte Strahldichte L_{DE} angegeben werden.

Im Kapitel 7 wird die Anwendung dieser Kalibrierungsgleichungen auf die gemessenen Daten diskutiert. Insbesondere wird das Bestimmen der Basislinie aus den Weltraum- und Schwarzkörperspektren beschrieben, welches für die Kalibrierung unabdingbar ist.

Die oben aufgeführten Gerätekenngrößen lauten wie folgt:

- Die Kalibrierungskonstante G und die Filterfunktion FILT lassen sich durch Subtraktion von Gl. (95) und (97) mit

$$\frac{\text{FILT}}{G} = \frac{S_{\text{basis,BB}} - S_{\text{basis,DS}}}{\left(r_{\text{SC ST}} r_{\text{DE ST}} - r_{\text{BB}} r_{\text{SC ST}} r_{\text{DE ST}} \right) B(T_{l-2})} = \frac{S_{\text{basis,BB}} - S_{\text{basis,DS}}}{r_{\text{SC ST}} r_{\text{DE ST}} \epsilon_{\text{BB}} B(T_{l-2})} \quad (99)$$

bestimmen.

- Die Transmission längs der Strecke vom Dewar zum Strahlteiler $r_{\text{DE ST}}$ wird durch Division von Gl. (93) durch Gl. (95) zu

$$r_{\text{DE ST}}^2 = \frac{S_{\text{BB}}}{S_{\text{basis,BB}}} \quad (100)$$

ermittelt, wobei die Reflektivität des Schwarzkörpers r_{BB} vernachlässigt wurde und somit ϵ_{BB} für die Berechnung von $r_{\text{DE ST}}$ mit eins angenommen wurde.

- Die Transmission $r_{\text{SC ST}} = e^{-c_s a_m (\text{SC ST})}$ der Strecke vom Scanspiegel zum Strahlteiler lässt sich durch die Skalierung der Masse m bestimmen, da bei Flughöhen von über 30 km von optisch dünnen Linien ausgegangen werden kann. Mit dem Streckenverhältnis

$$a_t = \frac{\text{SC ST}}{\text{DE ST}} \quad (101)$$

folgt für die Transmission zwischen Scanspiegel und Strahlteiler

$$r_{\text{SC ST}} = e^{-c_s a_m (\text{DE ST})} = t_{\text{DE ST}}^{a_t} \quad (102)$$

Mit den Größen für MIPAS-B2 aus Tab. 1 ergibt sich $a_t = 4,29$.

- Gleiches kann der Faktor zwischen $r_{\text{SC ST}}$ und $r_{\text{DE ST}}$ angegeben werden. Da alle Spiegel bei MIPAS-B2 mit Gold bedampft sind, wird der gleiche Reflexionskoeffizient r für jeden Spiegel angenommen. Der gesamte Reflexionskoeffizient entspricht dann $r^{\text{Anzahl Spiegel im optischen Weg}}$ und das Verhältnis der Reflexionskoeffizienten

$$\frac{r_{\text{ST SC}}}{r_{\text{DE ST}}} = r^{\left(\frac{\text{Anzahl Spiegel SC ST} - \text{Anzahl Spiegel DE ST}}{a_r} \right)} = r^{a_r} \quad (103)$$

Nach Tab. 1 ist $a_r = 4$.

Nun steht ein ausreichender Satz von Gleichungen zur Verfügung, um nach der reflektierten Strahlung des Dewarfensters aufzulösen. Die reflektierte Strahldichte des Dewarfensters L_{DE} ergibt sich mit Gl. (95) und Gl. (99) zu

$$L_{\text{DE}} = B(T_{l-2}) \left[1 - r^{a_r} \left(1 + \frac{\epsilon_{\text{BB}} S_{\text{basis,DS}}}{S_{\text{basis,BB}} - S_{\text{basis,DS}}} \right) \right] \quad (104)$$

Unter Verwendung von Gl. (96) und Gl. (98) und obigen Gleichungen ermittelt man für die Strahldichten der Weltraumspektren L_{DS} und Horizontsondierungsspektren L_{ATM} die gesuchte Kalibrierungsgleichung

$$L_x = \frac{\epsilon_{\text{BB}} B(T_{l-2})}{S_{\text{basis,BB}} - S_{\text{basis,DS}}} \left[\begin{array}{l} \frac{S_x}{r_{\text{DE ST}}^{a_r+1}} - S_{\text{basis,DS}} r_{\text{DE ST}}^{1-a_r} + \\ + (S_{\text{basis,BB}} - S_{\text{basis,DS}}) \frac{(1 - r_{\text{DE ST}}^{1-a_r})}{\epsilon_{\text{BB}}} \end{array} \right], \quad (105)$$

wobei x für DS bei Weltraum- und für ATM bei Horizontsondierungsspektren steht. Es zeigt sich, daß die Kalibrierungsgleichung unabhängig von dem Reflexionskoeffizienten r ist, so daß dieser experimentell nicht ermittelt werden muß.

Können die Emissionen und Absorptionen durch Moleküle im Strahlengang vernachlässigt werden, so nähert sich $\tau_{\text{DE ST}}$ an eins an. Damit erhält man als Näherung aus Gl. (105) die bekannte 2-Punkt-Kalibrierungsfunktion für Atmosphärenmessungen

$$L_{\text{ATM}} = \frac{\epsilon_{\text{BB}} B(T_{1-2})}{S_{\text{basis, BB}} - S_{\text{basis, DS}}} (S_{\text{ATM}} - S_{\text{basis, DS}}) , \quad (106)$$

die bereits in Gl. (83) postuliert wurde.

6.4 Bemerkungen zum radiometrischen Modell

Mit dem in dieser Arbeit entwickelten radiometrischen Modell lassen sich die Strahlungsquellen im Instrument separieren und bestimmen. Es wurde Wert darauf gelegt, ohne 'a priori' Informationen, wie z.B. spektroskopische Daten der Moleküle im Instrument, die einzelnen Strahlungsbeiträge zu quantifizieren. Die im letzten Abschnitt angegebenen Kalibrierungsgleichungen für die unterschiedlichen Quellen werden im nächsten Kapitel auf atmosphärische Spektren angewendet.

Bei der Entwicklung des radiometrischen Modells sind zwei grundlegende Annahmen gemacht worden, die nochmals kurz beleuchtet werden sollen:

- Im Instrument wurde eine allgemeine Isothermie in den Ebenen eins und zwei vorausgesetzt und die Temperaturerhöhung im Scanspiegelgehäuse vernachlässigt. Während des Fluges ist das Instrument bis auf wenige Kelvin bzgl. der Temperatur ausgeglichen, so daß das beschriebene Modell in erster Näherung gültig ist. Die Auswirkungen von Temperaturschichtungen und Abweichungen von der Isothermie im Instrument auf die Kalibrierungsergebnisse bedürfen einer weiteren interessanten Untersuchung. In Bereichen, in denen keine Linien im Schwarzkörperspektrum auftreten, ist für die Gültigkeit des Modells keine Isothermie notwendig.
- Die Reflektivitäten und die Oberflächenbeschaffenheiten der Spiegel wurden einander gleichgesetzt und nicht individuell untersucht. Letzteres ist zur Kalibrierung der Horizontsondierungssequenzen nicht erforderlich, da die Kalibrierungsgleichung nicht von den Spiegelbeschaffenheiten abhängt.

Bei Störungen der Isothermie müssen zum tieferen Verständnis des Instruments die geräteinternen Quellen quantifiziert werden. Dazu sind die individuellen Oberflächenbeschaffenheiten, Temperaturen der Oberflächen, Temperaturen der Gase in den einzelnen Schichten, das Emissionsverhalten des Hintergrundes etc. zu berücksichtigen. Diese Meßgrößen sind derzeit nicht vorhanden. Der Modellansatz ist jedoch derart allgemein gewählt, daß er die besprochenen Größen integrieren kann.

7 Die spektrale und radiometrische Kalibrierung atmosphärischer Spektren

In diesem Kapitel werden die in Kap. 6 erarbeiteten Kalibrierungsgleichungen auf die Messungen von MIPAS-B2 angewandt. Dafür muß jedoch erst ein Verfahren entwickelt werden, um aus den gemessenen Spektren die Basislinien für die Kalibrierung zu extrahieren. Ebenso muß zur Rauschreduktion der kalibrierten Spektren darauf geachtet werden, daß die Kalibrierungsspektren kein Rauschen mit einbringen. Es wird gezeigt, daß die diesbezüglich kritischen Weltraum- und Schwarzkörperspektren von ihren Rauschbeiträgen befreit werden können. Letztendlich muß das radiometrisch kalibrierte Spektrum noch spektral kalibriert werden, d.h. die Abszisse muß überprüft und evtl. korrigiert werden.

Mit diesen Korrekturen können die kalibrierten Spektren vollständig charakterisiert werden. Im letzten Abschnitt wird mit diesen Informationen eine Fehlerabschätzung für die kalibrierten Spektren gegeben, welche auch für die Bewertung der Spurengasprofilbestimmung wichtig ist.

7.1 Das Bestimmen der Basislinien

In Abschnitt 6.2 f. und in der Kalibrierungsgleichung (105) wurde von der Basislinie Gebrauch gemacht. Dazu müssen die Linien in den Weltraum- und Schwarzkörperspektren entfernt werden. Das Entfernen dieser Linien wird im folgenden als 'Rasieren' bezeichnet. Das einfachste Verfahren, um zu der Basislinie zu gelangen, wäre das Spektrum niederaufgelöst zu berechnen. Dabei würden jedoch die Linien stark verbreitert und in die Basislinie eingehen. Deshalb wurde für die Kalibrierung der MIPAS-B2 Spektren ein anderes Verfahren entwickelt, bei dem jede einzelne Linie aus dem Spektrum individuell entfernt wird. Der Ablaufplan zu diesem Verfahren ist in Abb. 45 skizziert und wird im folgenden erläutert:

Da nur die Linien identifiziert werden sollen, werden die niederfrequenten Komponenten des Spektrums durch einen Hochpaßfilter eliminiert (①). Um die Linien zu identifizieren, wird das hochpaß gefilterte Spektrum mit einer Linienfunktion kreuzkorreliert²⁰ (②). Dies bewirkt eine verstärkte Darstellung der Linien des Spektrums. Die bereits erwähnte Linienfunktion orientiert sich an dem Apparateprofil des Spektrums. Für unapodisierte Spektren wird eine SINC-Funktion gewählt. Für apodisierte ist im allgemeinen eine Gaußsche Glockenkurve ausreichend²¹ (③). Die Linienbreite dieser Funktion wird an einer bekannten Position einer isolierten Linie im Spektrum durch Anpassen des gewählten Profils bestimmt (④).

²⁰ Die Kreuzkorrelation ist durch $f(x) \circ g(x) = \int_{-\infty}^{\infty} f^*(x')g(x'+x)dx'$ definiert und ist ein Maß für die

Korrelation zwischen den beiden Funktionen $f(x)$ und $g(x)$, wobei der Wert der Abszisse am Maximum der Kreuzkorrelation die Verschiebung der beiden korrelierenden Funktionen gegeneinander angibt. Im hierigen Fall wird das Spektrum mit einer zur Ordinate symmetrischen Linienfunktion kreuzkorreliert, so daß ein hoher Wert jeweils eine starke Korrelation mit einer Linie im Spektrum angibt und über den zugehörigen Abszissenwert die Position dieser Linie im Spektrum definiert wird.

²¹ Das Apodisieren von Spektren wird in Abschnitt 8.4 beschrieben.

Das Kreuzkorrelationspektrum muß noch gewichtet werden, damit kleinere Linien, die auch einen geringeren Kreuzkorrelationswert aufweisen, ebenfalls indiziert werden. Dazu wird das Kreuzkorrelationsspektrum durch die Wurzel der Betragswerte des hochpaßgefilterten Spektrums dividiert (⑤). Für die Wichtung wurde der Divisor leicht in der Auflösung reduziert (etwa um den Faktor 2), um schmale Linien stärker hervorzuheben.

Das Identifizieren der Linien erfolgt durch Differenzierung des Kreuzkorrelationsspektrums (⑥). Dabei muß die erste Ableitung einen Nulldurchgang aufweisen. Da im Kreuzkorrelationsspektrum die Linienbreite erhalten bleibt, bedeutet ein hoher Korrelationswert gleichzeitig einen erhöhten Wert für die zweite Ableitung. Das Identifikationskriterium zur Linienindizierung ergibt sich, wenn der Betrag der zweiten Ableitung an diesen Stellen über einem gewissen Schwellwert liegt. Zur Normierung wird die zweite Ableitung vor dem Schwellwertvergleich durch ihr Maximum dividiert, um ein allgemein gültiges Kriterium zu finden, wann eine Linie zum Entfernen indiziert wird (⑦).

Das Entfernen der Linien gestaltet sich weniger aufwendig als ihre Indizierung. An den jeweiligen identifizierten Linienpositionen im Spektrum wird die bereits vorher ermittelte Linienfunktion angepaßt (⑧) und vom Spektrum subtrahiert (⑨). Dies erfolgt automatisiert über eine Schleife für alle indizierten Linien individuell. Abschließend wird das linienbereinigte Spektrum zum Glätten der Basislinie mit einem Tiefpaß gefiltert (⑩), damit kein Rauschen in das Kalibrierungsergebnis propagiert.

In Abb. 46 und Abb. 47 sind Beispiele des zweiten und dritten Kanals von Weltraummessungen und deren 'Rasur' zu sehen.

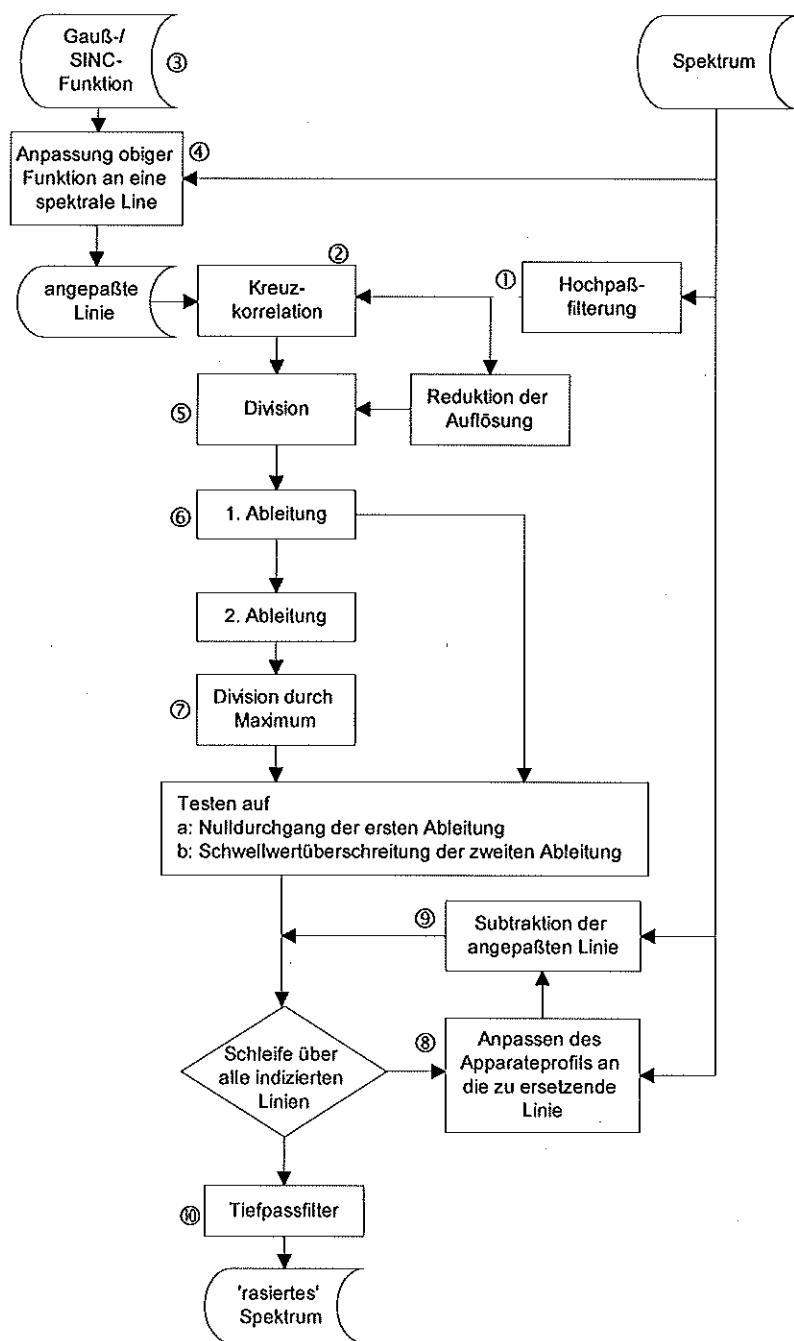


Abb. 45 Ablaufdiagramm zum Entfernen von Linien aus Weltraum- und Schwarzkörperspektren.
Siehe begleitenden Text.

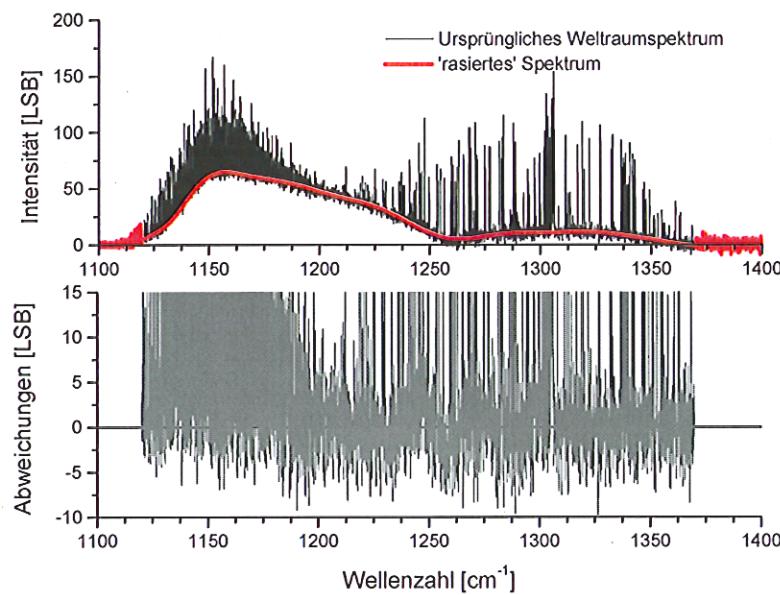


Abb. 46 Ergebnis der Linienentfernung im koaddierten Weltraumspektrum des 2. Kanals vom 11.2.1995 20:14:05.

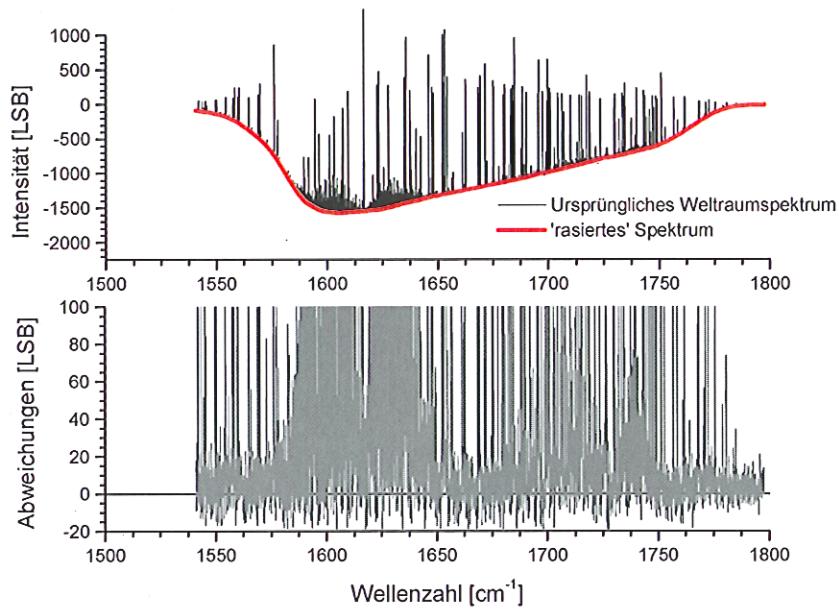


Abb. 47 Ergebnis der Linienentfernung im koaddierten Weltraumspektrum des 3. Kanals vom 8.5.1998 1:58:58.

In einzelnen Bereichen der Spektren überlagern sich die Linienflügel derart, daß eine quasi kontinuierliche Emission stattfindet. In den Bereichen um 1248 cm^{-1} und 1300 cm^{-1} in Abb. 46 sowie zwischen 1600 cm^{-1} und 1640 cm^{-1} in Abb. 47 sind solche Bereiche erkennbar. Durch die Mittelung aufgrund der niedrigen Auflösung verfälschen sie aber nicht das rasierte Weltraumspektrum.

Die Darstellung des ersten Kanals erfolgt in Abb. 48. Hier ist deutlich eine Störung der Basislinie bei 685 cm^{-1} sichtbar. Diese breite Emissionserscheinung wird durch die Rasur nicht erkannt und auch nicht ausgeglichen, sondern der unbalancierten Strahlung zugeordnet. Geht man davon aus, daß die einreflektierte und -gestreute Gerätehintergrundstrahlung vom Detektorport entsprechend dem Planckschen Gesetz strahlt, so können die sich überlagernde Linienflügel, die dann von der Planckschen Strahlungsverteilung abweichen würden, identifiziert werden.

Dazu muß zuerst die Strahlung L_{DE} aus dem Detektorport kalibriert werden. Hierfür müssen jedoch die Reflexionskoeffizienten der Spiegel im Interferometer bzw. der Reflexionskoeffizient r und das Verhältnis a_r der Spiegel bekannt sein. Das Verhältnis a_r ist bekannt, und der Reflexionskoeffizient r kann mit Gl. (90) und (104) und der Annahme, daß Schwarzkörper und Hintergrund 'schwarz' nach dem Planckschen Strahlungsgesetz emittieren, zu

$$r = \left(\tau_{ZnSe} \frac{S_{BB,basis} - S_{DS,basis}}{S_{BB,basis}} \right)^{\frac{1}{a_r}} \quad (107)$$

bestimmt werden. Der Transmissionskoeffizient τ_{ZnSe} wird durch Labormessung bestimmt. Dabei ist zu beachten, daß sich ein kleiner Skalierungsfehler bei der Messung des Transmissionskoeffizienten eklatant auf den Reflexionskoeffizienten $r_{ZnSe} = 1 - \tau_{ZnSe}$ auswirkt. Mit Hilfe des Reflexionskoeffizienten des Dewarfensters r_{ZnSe} kann nun die Gerätehintergrundstrahlung mit $L_{Hintergrund} = \frac{L_{DE}}{r_{ZnSe}}$ berechnet und an die Plancksche

Strahlungsverteilung angepaßt werden. Die Anpassung erfolgt über die Emissivität des Hintergrundes und über eine Skalierung der Transmission des Dewarfensters τ_{ZnSe} mit dem Faktor f , die einen evtl. Meßfehler in der Skalierung von τ_{ZnSe} ausgleicht. Die Emissivität wurde zwar in Gl. (107) als schwarz angenommen, eine Abweichung wirkt sich aber nicht stark auf den Reflexionskoeffizienten aus. Bei der Anpassung des gerechneten Gerätehintergrunds an die Plancksche Strahlungsverteilung ist sie jedoch zwingend notwendig. Die Anpassung erfolgt in Bereichen, die nicht durch überlagernde Linien oder Vergleichbares gestört sind, durch

$$\frac{L_{DE}}{\epsilon_{Hintergrund}(1-f\tau_{ZnSe})} = L_{Hintergrund} \xrightarrow{\text{Anpassung von } \epsilon_{Hintergrund} \text{ und } f} B(T_{1-2}) \quad (108)$$

Umgekehrt können nun eben jene gestörten Bereiche in $L_{Hintergrund}$ direkt durch $B(T_{1-2})$ ersetzt werden. Mit den angepaßten Parametern $\epsilon_{Hintergrund}$ und f läßt sich aus der korrigierten Hintergrundstrahlung die korrigierte unbalancierte Strahlung $L_{DE,korr}$ und weiter auch eine korrigierte Basislinie des Weltraumspektrums $S_{DS,basis,korr}$ berechnen (Abb. 48, grün).

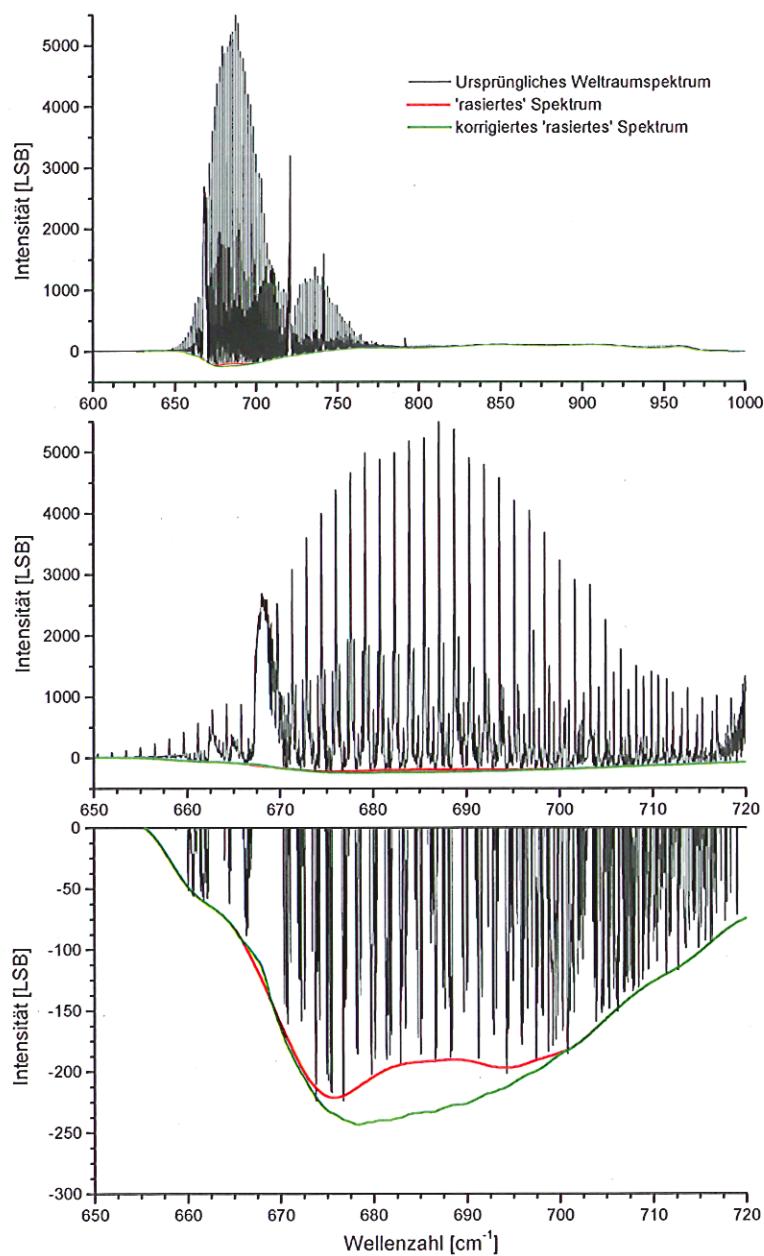


Abb. 48 Weltraumspektrum (schwarz) vom 8.5.1998. Zwischen 650 cm^{-1} und 770 cm^{-1} ist deutlich die dominierende CO₂-Bande zu erkennen.

Bei 685 cm^{-1} tritt durch überlagernde Linienflügel eine quasi kontinuierliche Emission auf, die zu einer falschen Basislinie führt (rot). Die Korrektur der Basislinie (grün) ist im Text beschrieben. Zur besseren Darstellung ist das identische Spektrum in drei unterschiedlichen Vergrößerungen gezeigt.

7.2 Die Rauschreduktion bei Schwarzkörperspektren

Neben der Basislinie des Schwarzkörperspektrums $S_{\text{basis,BB}}$ wird zum Lösen der Kalibrierungsgleichung (105) der Transmissionskoeffizient τ_{DEST} (Gl. (100)) gebraucht, der wiederum das linienbehaftete Schwarzkörperspektrum S_{BB} benötigt.

Um die Rauschanteile im Schwarzkörperspektrum zu verringern, wird die Basislinie $S_{\text{basis,BB}}$ des Schwarzkörperspektrum S_{BB} verwendet. Die Basislinie wird aus dem Schwarzkörperspektrum gewonnen, welches wie die Weltraumspektren rasiert und rauschreduziert wird. Auf die Basislinie müssen nun an den Positionen, an denen Linien rasiert wurden, genau diese wieder eingearbeitet werden um das rauschreduziertes Schwarzkörperspektrums S_{BB} zu erhalten. Dazu werden die angepaßten Linien, die im vorangegangenen Abschnitt vom Spektrum subtrahiert wurden, wieder auf das Basislinienspektrum addiert (Abb. 49).

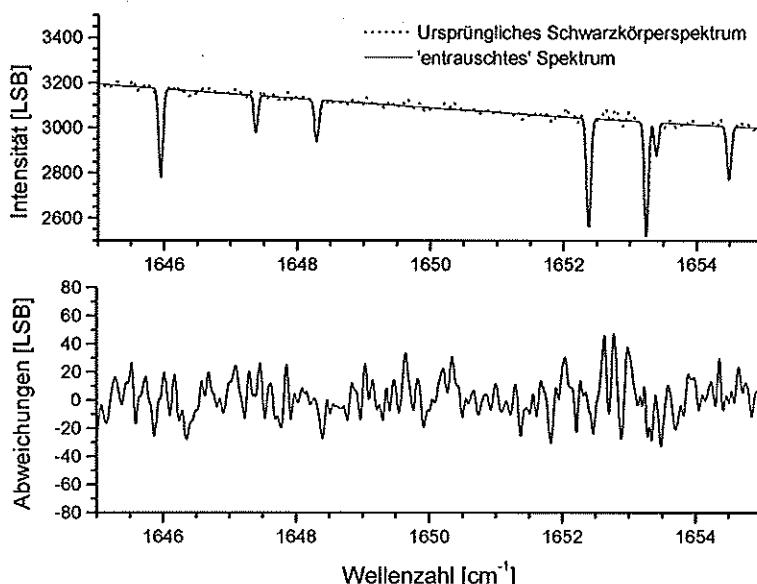


Abb. 49 Rauschreduziertes Schwarzkörperspektrum mit Linienspektren von geräteinternen Gasen.
Im unteren Teil sind die Abweichungen zwischen hoch aufgelöstem und rauschreduziertem Spektrum zu sehen. Spezifische Abweichungen zwischen hoch aufgelöstem und rauschreduziertem Spektrum an den Linienvorpositionen sind nicht sichtbar.

Die Abweichungen liegen innerhalb des Rauschens des Schwarzkörperspektrums. Demnach kann die Linienwiederherstellung als präzise erachtet werden. Die leicht erhöhten Abweichungen bei $1652,7 \text{ cm}^{-1}$ sind gegebenenfalls auf eine Reststruktur von Linien zurückzuführen und mit diesem Verfahren nicht mehr auflösbar, da sie sich nicht aus dem Rauschen hervorheben. Der Restfehler an Linienvorpositionen liegt im Bereich des Rauschens des in der Auflösung unreduzierten Spektrums.

7.3 Die spektrale Kalibrierung

Die spektrale Kalibrierung kann aus dem Digitalisierungsabstand im Interferogramm gewonnen werden (Abschnitt 3.2). Aus der Nyquistwellenzahl und der Anzahl der spektralen Punkte läßt sich für jeden Datenpunkt die zugehörige Wellenzahl ermitteln. Der

Digitalisierungsabstand im Spektrum beträgt $d\sigma = \frac{1}{Ndx}$. Die Begrenzung des Spektral-

bereichs, die durch die diskrete Fouriertransformation erfolgt, ergibt sich durch die Nyquistwellenzahl und der Position des Spektralbereichs und wurde bereits durch Gl. (34) bis (36) beschrieben. Drei Fehlerquellen treten dabei jedoch auf, die einerseits eine Wellenzahlverschiebung und andererseits auch eine Kontraktion oder Expansion des Digitalisierungsabstands im Spektralraum bewirken:

- Wie in Kapitel 8 gezeigt wird, ist die Wellenzahlzuordnung aufgrund des endlichen Gesichtsfelds zu niedrigeren Wellenzahlen verschoben.
- Eine nicht vollkommen parallele Führung des Infrarot- und des Laserstrahls bewirkt eine scheinbar größere Laserwellenlänge des Referenzlasers. Zusammen mit der
- Restungenauigkeit der Wellenlänge des Referenzlasers, die nur bis zu einem üblicherweise unzureichenden Wert bekannt ist, kommt es zu einem fehlerhaften Digitalisierungsabstand des Interferogramms und ergibt im spektralen Raum einen nicht exakten Wellenzahlabstand zweier Datenpunkte, sowie durch den Aliasing-Effekt (Abschnitt 3.2) eine lineare Verschiebung der Wellenzahlskala über den gesamten Bereich.

Anhand bekannter scharfer spektraler Linien, z.B. CO₂-Linien bei hohen Tangentenhöhen, kann die Wellenzahlskala nachträglich kalibriert werden. Dabei bieten sich drei Verfahren an:

1. Einzelne bekannte und isolierte Linien werden an modellierte Linien angepaßt, wobei insbesondere auf den Versatz der Abszisse Wert gelegt wird. Dieses Verfahren ist sensitiv auf Rauschen, auf den Einfluß benachbarter Linien und auf die Symmetrie des Apparateprofils.
2. Ähnlich der Methode unter 1 wird gleichzeitig ein ganzer Bereich von Linien angepaßt. Dies erfolgt automatisch während des Anpassens der modellierten an die gemessenen Spektren bei der Spurengasprofilauswertung. Der damit gewonnene mittlere Versatz über mehrere Linien kann zur Korrektur der Spektren herangezogen werden. Dabei entsteht ein iteratives Verfahren mit der Spurengasprofilauswertung, wobei ein Iterationsschritt auszureichen scheint.
3. Durch Kreuzkorrelationsbestimmung einzelner Linien oder kleiner Bereiche zwischen gemessenen und modellierten Spektren läßt sich der Versatz ermitteln, um den die Spektren gegeneinander verschoben sind. Der Abszissenversatz gegenüber dem modellierten Spektrum entspricht der Position der maximalen Korrelationsstärke und ist das Maß, um welches das gemessene Spektrum wellenzahlkorrigiert werden muß.

Für das Anpassen einzelner Linien spricht die Unabhängigkeit vom atmosphärischen Modell, da sich eine fehlerhafte Annahme der Spurengasverteilung zwischen unterschiedlichen Gasen und deren Linienflügelüberlagerung nicht auf das Anpassungsergebnis auswirken kann. Dahingegen mitteln mehrere Linien in einem kleinen Spektralbereich automatisch den Abszissenversatz, so daß dieser nicht entscheidend vom Rauschen beeinflußt wird. Gegen das Anpassen einzelner Linien spricht ebenfalls die Empfindlichkeit gegenüber dem Apparateprofil, dessen Breite im Vergleich zum zu korrigierenden Wellenzahlversatz nicht

vernachlässigt werden kann. Aus diesen Gründen wird für MIPAS-B2 die 2. Methode angewandt (Abb. 50). Diese ist jedoch für einen automatisierten, operationellen Einsatz zu komplex, so daß z.B. für das satellitengetragene MIPAS-ENVISAT die 1. Methode vorgesehen ist.

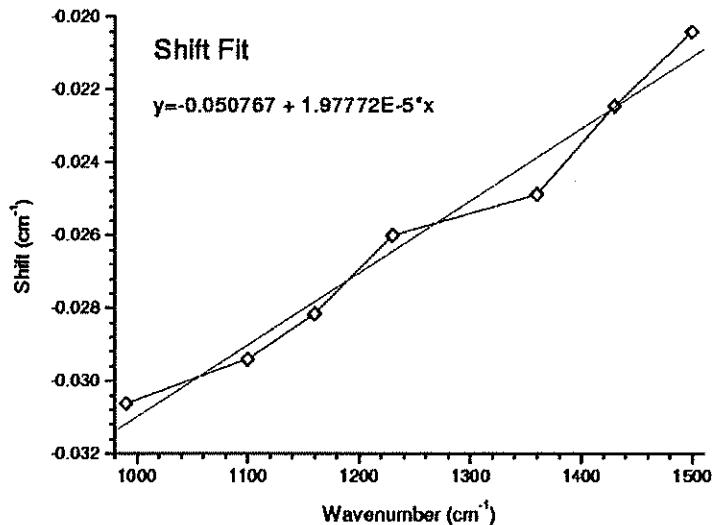


Abb. 50 Beispiel für den Abszissenfehler im Kanal 2 vom 8.5.1998.
Es wurde zur Bestimmung die 2. Methode verwendet [Wetzel,1999].

Die Korrektur der Spektren erfolgt durch Skalierung der Abszisse mit den gefundenen Fehlern $\Delta\sigma$. Um außerdem einen mit anderen Spektren identischen nominellen Stützstellenvektor der digitalisierten Spektren zu erhalten, müssen die Spektren auf diesen interpoliert werden.

Es läßt sich zeigen, daß ein Spektrum eines Fourier-Transformations-Spektrometers am besten interpoliert wird [Friedle,1993], indem es mit der SINC-Funktion der maximalen Auflösung des Spektrometers²² gefaltet wird:

$$\begin{aligned} L_{\text{resamp}}(\sigma) &= L(\sigma - \Delta\sigma) \otimes \text{SINC}(\sigma) \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} L(\sigma') \otimes \text{SINC}(\sigma - \sigma' - \Delta\sigma) d\sigma' \end{aligned} \quad (109)$$

²² Das Spektrum ergibt sich aus dem Interferogramm mit $S(\sigma) = \text{FT}^{-1}[\text{IFG}(x)]$. Die Faltung mit der SINC-Funktion bewirkt $S(\sigma) \otimes \text{SINC}(\sigma) = \text{FT}^{-1}\left[\text{IFG}(x) * \text{RECT}\left[\frac{x}{2\Lambda}\right]\right]$. Da das Interferogramm instrumentell sowieso auf $-\Lambda$ bis $+\Lambda$ eingeschränkt ist, stellt die Multiplikation mit der Rechteckfunktion im Interferogrammraum eine neutrale Operation dar.

7.4 Die Kalibrierungsergebnisse

Die Kalibrierungsergebnisse lassen sich nur durch einen Vergleich zwischen einem atmosphärischen Strahlungsmodell und den kalibrierten Spektren bewerten, da ein 'Normal' während des Fluges fehlt. In Abb. 51 ist ein typischer Vergleich für den ersten Kanal dargestellt, in einem Spektralbereich, in dem CO₂-Linien im Instrument festgestellt wurden und somit das hier vorgestellte erweiterte Kalibrierungsverfahren nach Gl. (105) angewendet werden muß. Daneben ist ein Bereich zum Vergleich dargestellt, in dem keine geräteeigenen Linien im Schwarzkörperspektrum nachweisbar sind.

Da der CO₂-Gehalt in der Atmosphäre sehr genau bekannt ist, kann mit dem in Kapitel 2 beschriebenen Druck- und Temperaturprofil das zu erwartende Spektrum simuliert werden und als 'Normal' fungieren. Lediglich die Auflösung muß an das gemessene und kalibrierte Spektrum angepaßt werden. Das Verhältnis des kalibrierten Spektrums zum 'Normal' läßt Rückschlüsse auf die Qualität des Kalibrierungsverfahrens zu. Abb. 51 (685 cm⁻¹ bis 690 cm⁻¹) zeigt deutlich den Unterschied zwischen den Ergebnissen bei einer klassischen Kalibrierung und dem hier vorgestellten Verfahren. In den CO₂-Linienzentren wirken bei dem klassischen Kalibrierungsverfahren die geräteeigenen CO₂-Moleküle wie ein schmalbandiger Absorptionsfilter. Da die umgebende Atmosphäre wärmer als die Geräteinnentemperatur war, sind die atmosphärischen CO₂-Linien stärker dopplerverbreitert als die Absorptionslinien im Instrument. Die Überlagerung der atmosphärischen Emissionslinien und der Absorptionslinien führt in diesem Fall zu einem Einschnitt im Linienzentrum. Entsprechend groß fällt auch der Restfehler aus, der bis zu 18 % des Linienmaximums beträgt.

Mit dem hier entwickelten Kalibrierungsverfahren ist die Übereinstimmung wesentlich besser. In den Linienspitzen ist keine Absorption mehr erkennbar, und der Restfehler beträgt dort weniger als 1 %. In den Linienflanken erhöht sich der Restfehler auf maximal 3,5 %, was auf eine unzureichende Übereinstimmung des Linienprofils zurückzuführen ist. Mit dem beschriebenen Kalibrierungsverfahren ist für den dargestellten Spektralbereich eine Reduktion des Kalibrierungsfehler um mehr als den Faktor 5 erreicht worden. In anderen Spektralbereichen ist ähnliches zu beobachten.

In dem linienlosen Spektralbereich von 728 cm⁻¹ bis 733 cm⁻¹ führen beide Kalibrierungsverfahren erwartungsgemäß zu einem identischen Ergebnis mit einer Restdifferenz zum modellierten Spektrum von maximal 2 % bezogen auf die Linienspitzen.

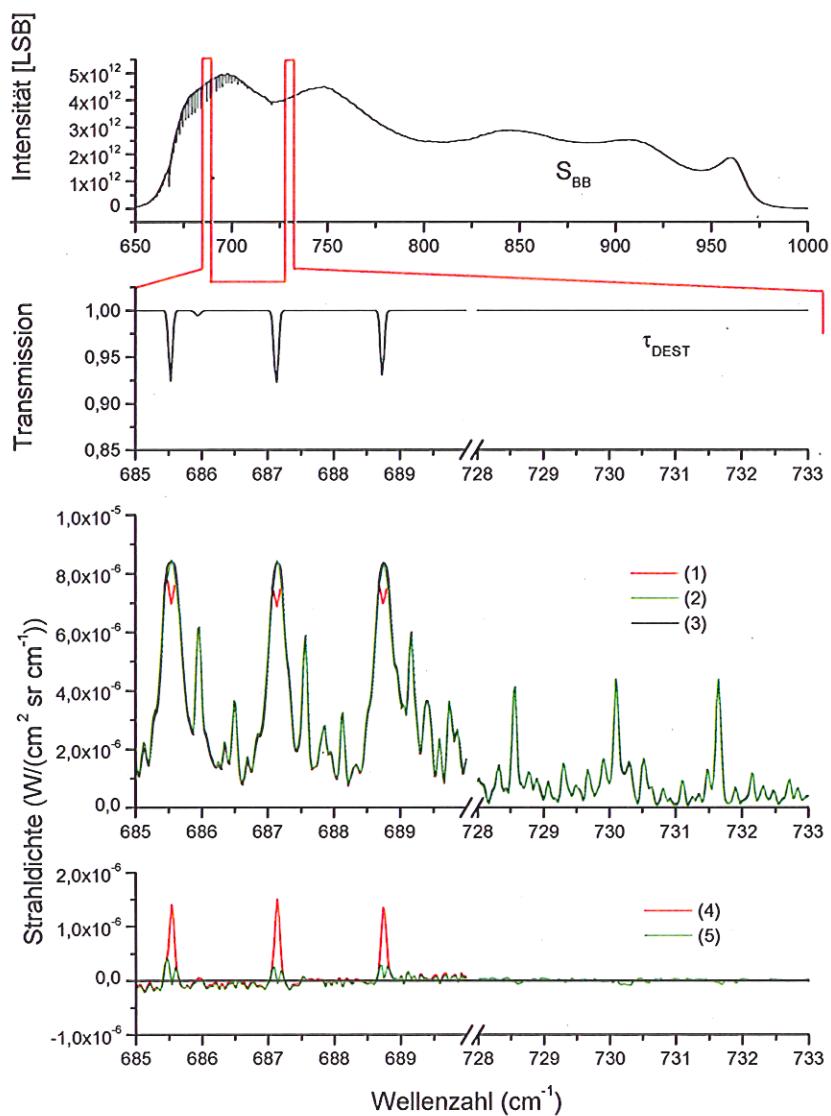


Abb. 51 Vergleich zwischen den Ergebnissen der unterschiedlichen Kalibrierungsschemata und einem angepaßten atmosphärischen Strahlungsmodell [Wetzel, 1999] für zwei kleine Spektralbereiche im ersten Kanal. Die Messung erfolgte am 8.5.1998 unter dem Elevationswinkel von $-0,71^\circ$.

- Ganz oben: In dem Schwarzkörperspektrum sind deutlich die Linien durch verbliebenes CO_2 im Instrument zu erkennen.
2. von oben: Diese Linien führen zu einer Linienstruktur in der Transmissionsfunktion τ_{DEST} , die die Kalibrierung beeinflußt.
2. von unten: Kurve (1) zeigt die Kalibrierung nach dem klassischen Verfahren (Gl. (106)) ohne Berücksichtigung der Transmissionsfunktion mit einem geglätteten Schwarzkörperspektrum. Kurve (2) demonstriert das kalibrierte Spektrum, welches entsprechend der hier vorgestellten Methode (Gl. (105)) kalibriert wurde.
- Kurve (3) gibt zum Vergleich ein modelliertes CO_2 -Spektrum an, welches das 'Normal' darstellt (siehe Text).
- Ganz unten: Residuen zwischen dem modellierten Spektrum und dem klassisch kalibrierten Spektrum (Kurve (4)) bzw. dem kalibrierten Spektrum nach dem hier vorgestellten Verfahren (Kurve (5)).

Für den dritten Kanal steht kein 'Normal' zur Verfügung. Die im Schwarzkörperspektrum auftauchenden Linien werden durch Wasserdampf verursacht, welcher in der Atmosphäre selbst äußerst variabel ist. Von daher kann das modellierte Spektrum nur an das gemessene angepaßt werden, was eine absolute Fehlerabschätzung unmöglich macht. Jedoch kann die Qualität der Anpassung Rückschlüsse auf das bessere Kalibrierungsverfahren zulassen. Wie für Kanal eins sind in Abb. 52 kalibrierte Spektren nach dem klassischen und dem hier entwickelten Verfahren gegenübergestellt. Dabei wurde jeweils an diese kalibrierten Spektren ein Modellspektrum angepaßt, wobei die Parameter für die H₂O-Konzentration und die Auflösung variiert wurden. In dem dritten Bild von oben wurde zudem ein leicht abgewandeltes klassisches Kalibrierungsverfahren gewählt (Kurve (2)), indem in der klassischen Kalibrierungsgleichung nicht die Basislinie des Schwarzkörperspektrums, sondern das originale Schwarzkörperspektrum mit den Linien verwendet wurde. Dies zeigt schon gegenüber der Kalibrierung mit der Basislinie des Schwarzkörperspektrums (Kurve (1)) eine erhöhte Linienintensität, führt jedoch noch zu keinem guten Anpassungsergebnis.

Demgegenüber führt die Anpassung (Kurve (7)) des modellierten Spektrums an das nach dem hier beschriebenen Verfahren kalibrierte Spektrum (Kurve (6)) zu einer wesentlich besseren Übereinstimmung. Die Überlagerung der Linienflügel konnte nicht korrekt modelliert werden, so daß sich bei 1653,4 cm⁻¹ eine stärkere Abweichung zwischen Modell und Experiment ergibt. Für die starken Linien konnte in diesem Kanal die Übereinstimmung mit dem Modell um den Faktor 5 verbessert werden.

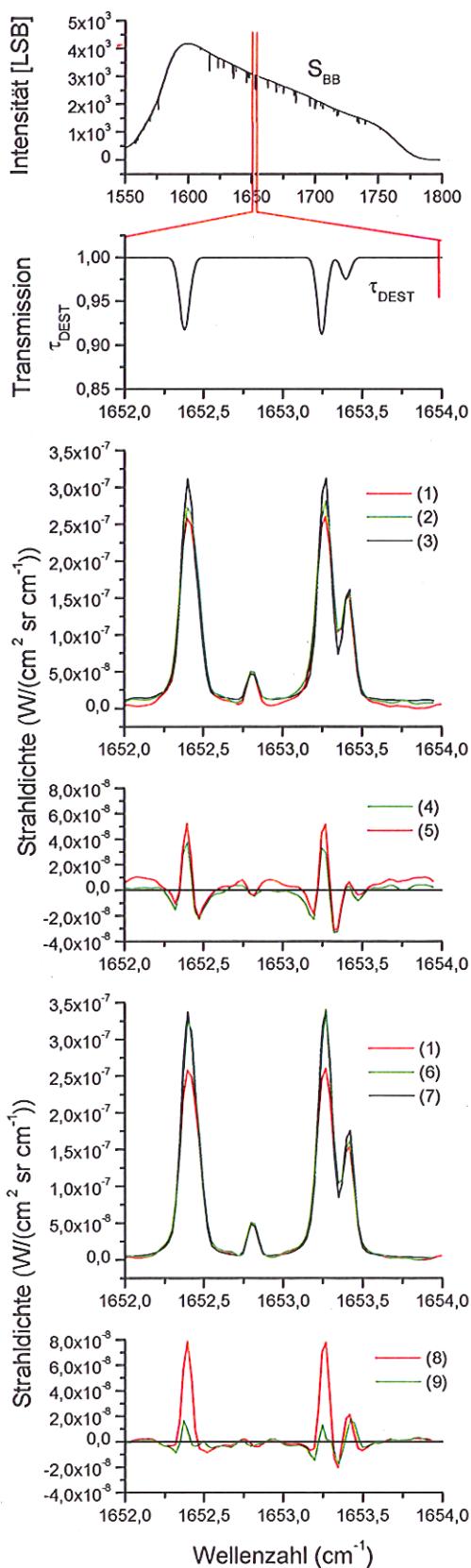


Abb. 52 wie Abb. 51; jedoch erfolgt der Vergleich zwischen den Ergebnissen der unterschiedlichen Kalibrierungsschemata und dem angepaßten atmosphärischen Strahlungsmodell [Stowasser, 1999] im Kanal 3.

- Ganz oben: In dem Schwarzkörperspektrum sind deutlich die Linien durch gasförmiges H₂O im Instrument zu erkennen.
- 2. von oben: Diese Linien führen zu einer Linienstruktur in der Transmissionsfunktion, die die Kalibrierung beeinflußt.
- 3. von oben: Kurve (1) zeigt die Kalibrierung nach dem klassischen Verfahren (Gl. (106)) ohne Berücksichtigung der Transmissionsfunktion mit einem geglätteten Schwarzkörperspektrum. Kurve (2) ist ein kalibriertes Spektrum nach dem klassischen Verfahren; jedoch wurde für das Schwarzkörperspektrum in Gl. (106) nicht die Basislinie, sondern das linienbehaftete Schwarzkörperspektrum S_{BB} verwendet. Kurve (3) gibt zum Vergleich ein an Kurve (2) angepaßtes modelliertes Spektrum an.
- 4. von oben: Residuen zwischen dem modellierten Spektrum und dem klassisch kalibrierten Spektrum, wobei für das Schwarzkörperspektrum die Basislinie (Kurve (4)) bzw. das linienbehaftete Schwarzkörperspektrum (Kurve (5)) verwendet wurde.
- 2. von unten: Kurve (1) zeigt die Kalibrierung nach dem klassischen Verfahren (Gl. (106)) ohne Berücksichtigung der Transmissionsfunktion mit einem geglätteten Schwarzkörperspektrum. Kurve (6) demonstriert das kalibrierte Spektrum, welches entsprechend der hier vorgestellten Methode (Gl. (105)) kalibriert wurde. Kurve (7) gibt zum Vergleich ein an Kurve (2) angepaßtes modelliertes Spektrum an.
- Ganz unten: Residuen zwischen dem modellierten Spektrum und dem klassisch kalibrierten Spektrum (Kurve (8)) bzw. dem kalibrierten Spektrum nach dem hier vorgestellten Verfahren (Kurve (9)).

7.5 Charakterisierung des Schwarzkörpers

Bevor im nächsten Abschnitt die Kalibrierungsfehler zusammengefaßt werden, wird in diesem Abschnitt der Schwarzkörper bezüglich seines Emissionsvermögens und Temperaturverhaltens untersucht. Der MIPAS-B2-Schwarzkörper ist als zylindrischer Hohlraum mit einem Längen-zu-Radius-Verhältnis von 4 ausgeführt und ist mit einer Spezialfarbe (Herberts 1002E [Lohrengel,Hohn,1990]) der Emissivität ε_0 von 0,965 bis 0,985 über dem gesamten Spektralbereich beschichtet. Aufgrund der Geometrie seines Hohlraumes erreicht er eine Gesamtemissivität ε_{BB} von im Mittel 0,9986 [Kohlrausch,1996]. Die Schwankungen der Emissivität der Farbe $\Delta\varepsilon_0$ führen zu einem Fehler der Gesamtemissivität $\Delta\varepsilon_{\text{BB}}$ von $\Delta\varepsilon_{\text{BB}}=0,0612*\Delta\varepsilon_0$, d.h. die Gesamtemissivität kann mit $\varepsilon_{\text{BB}}=0,9986\pm0,0006$ angegeben werden.

Die Schwarzkörperstrahlung setzt sich jedoch neben der eigentlichen Cavity-Emission $L_{\text{BB}}=\varepsilon_{\text{BB}}B(T_{1-2})$ auch aus der Rückreflexion der Eigenemission des Geräteinnenraumes zusammen. Da die Oberfläche rauh ist, kann mit einer Reflexion in den Strahlengang gerechnet werden, wenn die Emission des Schwarzkörpers nicht identisch eins und somit der Reflexionskoeffizient mit $r_{\text{BB}}=1-\varepsilon_{\text{BB}}$ ungleich null ist. Die Strahlungssumme des Schwarzkörpers lautet dann

$$L'_{\text{BB}} = \varepsilon'_{\text{BB}}B(T_{1-2}) = \varepsilon_{\text{BB}}B(T_{1-2}) + (1 - \varepsilon_{\text{BB}})\varepsilon_{\text{Instrument}}B(T_{\text{Instrument}}) . \quad (110)$$

Die Strahlungstemperatur $T_{\text{Instrument}}$ ist über den Raumwinkel der einfallenden Strahlung verschieden. Während etwa 50 % des Raumwinkels durch die Instrumentbewandlung beschrieben werden, kommen die restlichen Strahlungsanteile mit 37 % Raumwinkelanteil aus dem Scanspiegelgehäuse und mit 13 % von der Reflexion des Scanspiegel. Der Temperaturunterschied der Instrumentbewandlung zu T_{1-2} lässt sich nach Abb. 38 mit maximal +4 K und der des Scanspiegelgehäuses zu T_{1-2} mit maximal +7 K angeben. Die Strahlung vom Scanspiegel stammt primär vom Detektorport und vom Strahlteiler. Deren Gesamtstrahldichte ist mit Sicherheit kleiner als die der Bewandlung. $B(T_{\text{Instrument}})$ setzt sich nun aus drei Quellen zusammen, die prozentual gewichtet werden, wobei für eine konservative Abschätzung von L'_{BB} die reflektierte Strahlung vom Scanspiegel der Strahldichte der Bewandlung gleichgesetzt wird. Für $\varepsilon_{\text{Instrument}}$ wird für die Fehlerabschätzung der konservative Wert von eins gewählt. Um den Fehler für die Kalibrierungsgleichung (105) zu finden, bietet es sich an, den Einfluß durch die Schwarzkörperreflexion ebenfalls durch einen Fehler $\Delta\varepsilon'_{\text{BB}}$ der Emissivität ε_{BB} auszudrücken. Aus $L'_{\text{BB}} = [\Delta\varepsilon'_{\text{BB}} + \varepsilon_{\text{BB}}]B(T_{1-2})$ folgt

$$\Delta\varepsilon'_{\text{BB}} = \varepsilon' - \varepsilon_{\text{BB}} = \frac{L'_{\text{BB}}}{B(T_{1-2})} - \varepsilon_{\text{BB}} \quad (111)$$

Der Versatz des Maximums der Planckfunktion bei unterschiedlichen Temperaturen ist hier noch vernachlässigbar.

Die genaue Kenntnis der Temperatur spielt eine wesentliche Rolle zur Charakterisierung eines Schwarzkörpers, da die Plancksche Strahlung sehr sensitiv auf Temperaturschwankungen reagiert. Die Pt100-Meßfühler zum Messen der Schwarzkörpertemperatur sind bis auf eine Meßunsicherheit von $\pm 0,05$ K bei -100 °C von einem unabhängigen Eichinstitut charakterisiert worden [Schneider,1994].

Die Temperaturverteilung entlang des Zylinders beeinflußt die effektive Schwarzkörpertemperatur. Mit der empirischen Gleichung zum Beschreiben eines zylinderförmigen Schwarzkörpers [Kohlrausch,1996] kann die effektive Schwarzkörpertemperatur berechnet werden. Wird die Temperaturdifferenz zwischen Boden und Rand des Zylinders

mit 2 K abgeschätzt, welches aufgrund der Geometrie des Schwarzkörpers mit dem halben maximalen Temperaturunterschied der Instrumentebenen während eines Fluges entspräche, so ändert sich die effektive Schwarzkörpertemperatur um 0,012 K. Dieser Temperaturfehler kann gegenüber den anderen Fehlerquellen unberücksichtigt bleiben.

Die Wärmeleitfähigkeit der Farbe bewirkt einen Temperaturgradienten innerhalb der Farbschicht, wenn die Strahlungstemperatur außerhalb des Schwarzkörpers von der Schwarzkörpertemperatur verschieden ist. Der sich dadurch einstellende Temperaturunterschied zwischen Meßfühler und Emissionsfläche lässt sich mit der Wärmeleitungsgleichung zu

$$\Delta T = \frac{\Delta Pd}{A\lambda} = 0,041(P(T_{Instrument}) - P(T_{l-2})) \frac{K}{W} \quad (112)$$

mit

P: Strahlungsleistung

λ : Wärmeleitfähigkeit = 0,25 $\frac{W}{m^2 K}$

d: Schichtdicke = 360 μm

A: Wärmeaustauschfläche = 0,035 m^2

berechnen. Die Raumwinkelanteile der einfallenden Strahlung wurden wie auf der letzten Seite abgeschätzt. Für die Strahlungsleistung $P(T_{Instrument})$ muß zudem das spektrale Verhalten des Lackes berücksichtigt werden. Letztendlich stellt sich ein systematischer Temperaturgradient in der Schicht von kleiner +0,1 K ein.

Zur besseren Fehlerabschätzung der Kalibrierungsfunktion wird der Temperaturfehler in Tab. 3 wieder in einen Emissivitätsfehler umgerechnet²³.

	Absoluter Fehler $\epsilon_{Wahr} - \epsilon_{gemessen}$	
	800 cm ⁻¹	2500 cm ⁻¹
Variabilität aufgrund der Spezialfarbe Herberts 1002E	±0,0006	±0,0006
Meßfühlergenauigkeit $\Delta\epsilon_{T,BB,i}$	±0,0012	±0,0037
Temperaturgradient in der Farbschicht $\Delta\epsilon_{T,BB,2}$	+0,0026	+0,0082
Beschreiben der Reflexion des Schwarzkörpers durch einen Emissivitätsfehler $\Delta\epsilon'_{BB}$	+0,0016	+0,0023
Summe Emissivitätsfehler (Maximalwert)	+0,0042 ± 0,0018	+0,011 ± 0,0043

Tab. 3 Gesamtfehler der Schwarzkörperstrahlung bei einer nominellen Temperatur von 220 K. Alle Fehler sind durch Emissivitätsfehler ausgedrückt.

Der gesamte relative Fehler des Emissionsverhaltens des Schwarzkörpers schlägt mit maximal $+1,1 \pm 0,43$ % zu Buche. Da die Emissivität multiplikativ in der Kalibrierungsgleichung (105) steht, propagiert der Fehlerbetrag identisch in den relativen Fehler des kalibrierten Spektrums $\frac{\Delta L_{ATM,\epsilon_{BB}}}{L_{ATM}}$. Hierbei handelt es sich um keinen statistischen Fehler, der gaußverteilt von Messung zu Messung variiert, sondern um einen Unsicherheitsbereich, mit dem das kalibrierte Spektrum behaftet ist.

²³ Mit $\epsilon_{T,BB} = \frac{B(T)}{B(T_{l-2})}$ kann der Temperaturfehler mit $\Delta\epsilon_{T,BB} = \frac{\partial\epsilon}{\partial T} \Delta T \Big|_{T=T_{l-2}} = \frac{1}{B(T_{l-2})} \frac{\partial B(T)}{\partial T} \Delta T \Big|_{T=T_{l-2}}$ als Emissionsfehler dargestellt werden.

7.6 Die radiometrischen Kalibrierungsfehler

Zur Bestimmung der Unsicherheit der radiometrischen Kalibrierung muß die Kalibrierungsgleichung (105) dem Fehlerfortpflanzungsgesetz unterworfen und nach den statistisch unabhängigen Fehlergrößen entwickelt werden. Dabei ist es hilfreich, zwischen den spektralen Positionen zu unterscheiden, bei denen Linien im Schwarzkörperspektrum auftreten oder nicht. An Linienpositionen im Schwarzkörperspektrum wird der Transmissionskoeffizient τ_{DEST} (Gl. (100)) durch das Rauschen im Schwarzkörperspektrum ebenfalls verrauscht. In den Zwischenräumen ist τ_{DEST} gleich eins, so daß dort das Rauschen verschwindet.

An Positionen ohne Linien reduziert sich die Kalibrierungsgleichung auf das klassische Verfahren (Gl. (106)), so daß einige Ausdrücke aus der Kalibrierungsgleichung (105) nicht für die Fehlerabschätzung betrachtet werden müssen. Die einzelnen unabhängigen Fehlergrößen für diesen Fall sind:

1. Die absolute spektrale Rauschleistung $\Delta L_{ATM,NESR}$. Zum statistischen Photonenrauschen tritt dominant der Anteil der atmosphärischen Messung S_{ATM} bei, da die Weltraum- und Schwarzkörpermessungen koaddiert und mit einer verringerten Auflösung geglättet wurden. Ihr Beitrag ist im Vergleich zum atmosphärischen Spektrum um die Wurzel der Anzahl der Koadditionen und um die Wurzel des Verhältnisses der reduzierten zur maximalen Auflösung geringer. Das Rauschen der Atmosphärenmessungen läßt sich durch Bestimmung der Standardabweichung eines Spektralbereiches im Imaginärteil des Spektrums bestimmen. Dabei kann wieder entsprechend Abschnitt 3.3 eine Gleichverteilung des Rauschens zwischen Imaginär- und Realteil des Spektrums vorausgesetzt werden.

Die Phasenfehler der Atmosphären-, Schwarzkörper- und Weltraumspektren lassen sich in die kalibrierten Spektren fort pflanzen (Abschnitt 5.7) und führen zu folgenden Fehlern:

2. Der Restphasenfehler des Atmosphärenspektrums propagiert mit $\Delta L_{ATM,\varphi_{ATM}} = \frac{\partial L_{ATM}}{\partial S_{ATM}} \Delta S_{ATM,\varphi}$ in das kalibrierte Spektrum. Der Fehler im gemessenen Spektrum $\Delta S_{ATM,\varphi}$ wird für kleine Phasenfehler ($<5^\circ$) durch Gl. (54) mit $\Delta S_{ATM,\varphi} \approx S_v \Delta \varphi_{tot}$ beschrieben:

$$\Delta L_{ATM,\varphi_{ATM}} = \frac{\epsilon_{BB} B(T_{l-2}) S_v}{S_{basis,BB} - S_{basis,DS}} \Delta \varphi_{tot,ATM} \quad (113)$$

3. Die Auswirkungen des Restphasenfehlers des Weltraumspektrums auf das kalibrierte Spektrum $\Delta L_{ATM,\varphi_{DS}} = \frac{\partial L_{ATM}}{\partial S_{DS}} \Delta S_{DS,\varphi}$ lassen sich mit

$$\Delta L_{ATM,\varphi_{DS}} = \frac{\epsilon_{BB} B(T_{l-2}) (S_{ATM} - S_{basis,BB}) S_v}{(S_{basis,BB} - S_{basis,DS})^2} \Delta \varphi_{tot,DS} \quad (114)$$

abschätzen.

4. Die Folgen des instrumentellen Phasenfehlers des Schwarzkörperspektrums

$\Delta L_{ATM,\varphi_{BB}} = \frac{\partial L_{ATM}}{\partial S_{BB}} \Delta S_{BB,\varphi}$ ergeben sich relativ zum kalibrierten Spektrum mit

$$\frac{\Delta L_{ATM,\varphi_{BB}}}{L_{ATM}} = \frac{\Delta S_{BB,\varphi}}{S_{basis,BB} - S_{basis,DS}} = \frac{S_v}{\left(\frac{S}{N}\right)_{BB} (S_{basis,BB} - S_{basis,DS})} . \quad (115)$$

An Positionen mit Linien im Schwarzkörperspektrum müssen die noch nicht betrachteten Ausdrücke der Kalibrierungsgleichung (105) berücksichtigt werden, bei denen τ_{DEST} ungleich eins ist. Da τ_{DEST} sich nicht auf das klassische Kalibrierungsverfahren auswirkt, wird nur die Differenz von der hier vorgestellten Kalibrierungsgleichung und der klassischen Kalibrierungsgleichung auf die Fehler untersucht, die durch τ_{DEST} entstehen. Die Differenz der Kalibrierungsgleichungen ergibt sich unter der Annahme, daß $\varepsilon_{BB}=1$ ist, zu

$$L_{ATM}^A = \frac{\varepsilon_{BB} B(T_{l-2})}{S_{basis,BB} - S_{basis,DS}} [S_{ATM}(\tau^{-1-a_t} - 1) - S_{basis,BB}(1 - \tau^{1-a_t})] . \quad (116)$$

5. Daraus folgt für die Variation des kalibrierten Spektrums aufgrund der Unsicherheit des Transmissionskoeffizienten

$$\Delta L_{ATM,t}^A = \frac{\partial L_{ATM}^A}{\partial \tau_{DEST}} \Delta \tau_{DEST} = \underbrace{\frac{B(T_{l-2}) S_{basis,BB}}{S_{basis,BB} - S_{basis,DS}}}_{=L_{BB}} \left[\frac{a_t - 1}{\tau^{a_t}} - \frac{S_{ATM}}{S_{basis,BB}} \frac{a_t + 1}{\tau^{2+a_t}} \right] \Delta \tau_{DEST} . \quad (117)$$

6. Die Ungenauigkeiten der Streckenmessungen zwischen Strahlteiler und Scanspiegel \overline{SCST} bzw. Dewar \overline{DEST} werden mit max. $\Delta l=1$ cm veranschlagt. Dies bewirkt im Quotienten a_t nur einen Fehler von $(\Delta a_t)^2 = \left(\frac{1}{\overline{DEST}} \right)^2 [1 + (a_t)^2] = 9,5 * 10^{-4}$ und ist für die Fehlerbetrachtung der kalibrierten Spektren nicht relevant.

	Kanal 1	Kanal 2	Kanal 3	Kanal 4	
Strahldichte des Schwarzkörpers im jeweiligen Spektralbereich					
$L_{BB}(T=220K)$	$4,5 \cdot 10^{-6}$ - $1,9 \cdot 10^{-6}$	$1,7 \cdot 10^{-6}$ - $3,0 \cdot 10^{-7}$	$1,5 \cdot 10^{-7}$ - $6,8 \cdot 10^{-8}$	$5,6 \cdot 10^{-8}$ - $1,9 \cdot 10^{-8}$	$\frac{W}{cm^{-1} sr cm^2}$
Absolutes statistisches Rauschen der Basislinie					
1. $\Delta L_{ATM, NESR}$	$7 \cdot 10^{-9}$	$2 \cdot 10^{-9}$	$3 \cdot 10^{-9}$	$2 \cdot 10^{-9}$	$\frac{W}{cm^{-1} sr cm^2}$
2. $\Delta L_{ATM, \varphi_{ATM}}$	$\Delta\varphi_{tot, ATM} =$ $0,002 (710 cm^{-1})$ - $0,023 (1000 cm^{-1})$	$\Delta\varphi_{tot, ATM} =$ $0,0008 (1040 cm^{-1})$ - $0,012 (1600 cm^{-1})$	$\Delta\varphi_{tot, ATM} =$ $0,0095 (1641 cm^{-1})$ - $0,037 (1800 cm^{-1})$		rad
	$7,4 \cdot 10^{-10}$ - $1,4 \cdot 10^{-8}$	$3,7 \cdot 10^{-11}$ - $5,0 \cdot 10^{-10}$	$3,1 \cdot 10^{-11}$ - $7,7 \cdot 10^{-11}$	$3,7 \cdot 10^{-10}$	$\frac{W}{cm^{-1} sr cm^2}$
3. $\Delta L_{ATM, \varphi_{DS}}$	$\Delta\varphi_{tot, DS} =$ $0,003 (696 cm^{-1})$ - $0,050 (1000 cm^{-1})$	$\Delta\varphi_{tot, DS} =$ $0,003 (1037 cm^{-1})$ - $0,059 (1600 cm^{-1})$	$\Delta\varphi_{tot, DS} =$ $0,027 (1600 cm^{-1})$ - $0,086 (1800 cm^{-1})$		rad
	$8,7 \cdot 10^{-10}$ - Spektralbereichs-ende : $3,0 \cdot 10^{-8}$	$3,3 \cdot 10^{-11}$ - Spektralbereichs-ende : $1,7 \cdot 10^{-9}$	$7,6 \cdot 10^{-11}$ - $1,4 \cdot 10^{-10}$	$3,7 \cdot 10^{-10}$	$\frac{W}{cm^{-1} sr cm^2}$
geometrische Summe	$7,9 \cdot 10^{-9}$ - $3,3 \cdot 10^{-8}$	$2,0 \cdot 10^{-9}$ - $2,7 \cdot 10^{-9}$	$3,0 \cdot 10^{-9}$ - $3,0 \cdot 10^{-9}$	$2,1 \cdot 10^{-9}$	$\frac{W}{cm^{-1} sr cm^2}$
Relativer Rauschfehler der Basislinie					
4.	$S/N_{BB} = 1240$	$S/N_{BB} = 1730$	$S/N_{BB} = 235$	$S/N_{BB} = 63$	
$\frac{\Delta L_{ATM, \varphi_{BB}}}{L_{ATM}}$	$6,9 \cdot 10^{-3}$	$1,5 \cdot 10^{-3}$	$8,3 \cdot 10^{-3}$	0,047	%
Rauschen an Linienpositionen					
5. $\Delta L_{ATM, \tau}^\Delta$	$\Delta T=2K$ $\Delta\tau_{DEST}=$ $0,0047$	$\Delta T=4K$ $\Delta\tau_{DEST}=$ $0,0094$		$\Delta T=2K$ $\Delta\tau_{DEST}=$ $0,011$	$\Delta T=4K$ $\Delta\tau_{DEST}=$ $0,021$
	$3,2 \cdot 10^{-7}$	$6,3 \cdot 10^{-7}$		$2,9 \cdot 10^{-8}$	$5,9 \cdot 10^{-8}$
					$\frac{W}{cm^{-1} sr cm^2}$

Tab. 4 Gesamtdarstellung der Kalibrierungsfehler des MIPAS-B2 Instruments für den Flug vom 8.5.1998 (weitere Erläuterungen siehe begleitenden Text).

Tab. 4 gibt alle Fehlergrößen dieses Abschnitts für alle vier Kanäle des MIPAS-B2 Instruments an. Für die Auswirkungen des Phasenfehlers sind zwei Werte angegeben, da dieser sich zu den Enden des Spektralbereichs stärker auswirkt. Die hervorgehobenen Zahlen markieren die dominierenden Fehlerbeiträge.

Für alle vier Kanäle ist das Photonenrauschen (Punkt 1) ein entscheidender Rauschbeitrag. Im ersten Kanal können noch die Auswirkungen der Restphasenfehler am Ende des Spektralbereichs relevant werden. Insbesondere, wenn die unbalancierte Strahlung vergleichsweise klein gegenüber der Strahlteileremission ist, können geringe Phasenfehler merklich Anteile der Strahlteileremission auf die reelle Achse drehen (Punkt 2 und 3). Damit sind auch die beiden hohen Unsicherheitswerte im ersten und zweiten Kanal bei Weltraummessungen (Punkt 3) erklärbar. In den Zentren der Spektralbereiche ist die Unsicherheit aufgrund eines Restphasenfehlers bei allen Kanälen eine Größenordnung unter dem Photonenrauschen. Da beim vierten Kanal die Strahlteileremission nicht mehr aus dem Rauschen herausgelöst werden kann, wird die Phase klassisch bestimmt und der Phasenfehler ergibt sich analog zu dem Fehler der instrumentellen Phase.

Die Auswirkung des Fehlers aufgrund einer fehlerhaften Phasenbestimmung bei der Schwarzkörpermessung (Punkt 4) ist aufgrund des geringen Phasenfehlers für alle vier Kanäle zu vernachlässigen.

Zu beachten ist noch der Einfluß eines Fehlers von τ_{DEST} , der sich stark auf das Kalibrierungsergebnis auswirkt (Punkt 5).

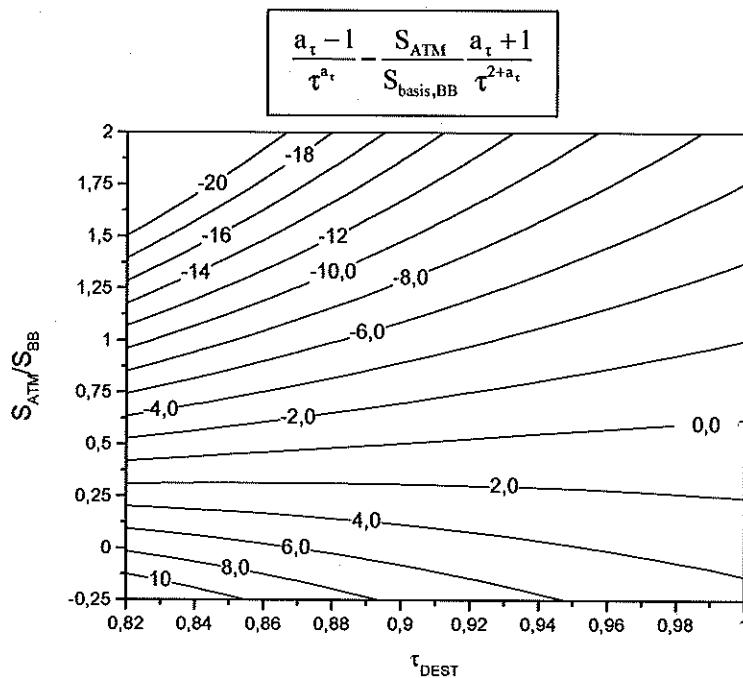


Abb. 53 Auswirkung eines Fehlers des Transmissionskoeffizienten $\Delta\tau_{\text{DEST}}$ auf den Kalibrierungsfehler $\Delta L_{\text{ATM},t}^{\Delta}$.

Die Konturlinien geben die Werte der eckigen Klammer in Gl. (117) an. Der Kalibrierungsfehler ergibt sich durch Multiplikation der Fehlers des Transmissionskoeffizienten und der Planckschen Strahlungsverteilung der Temperatur T_{1-2} mit den Werten dieser Konturlinien.

Entsprechend Gl. (117) zeigt Abb. 53 die Sensitivität des Kalibrierungsfehlers auf Unsicherheiten von τ_{DEST} . Eventuelle Temperaturgradienten im Instrument beeinflussen die Genauigkeit des Transmissionskoeffizienten. Die Abhängigkeit der emittierten Strahldichte von der Temperatur von Gasen im Instrument beträgt um 220 K zwischen 3 %/K bis 6 %/K bei Kanal 1 bzw. Kanal 4. Dies zeigt sich deutlich in einer Zunahme der Linienstärken im Schwarzkörperspektrum und in den Änderungen des Transmissionskoeffizienten $\Delta\tau_{\text{DEST}} = \tau'_{\text{DEST}} - \tau_{\text{DEST}}$ ²⁴. Wird als Temperaturunterschied +2 K und +4 K angesetzt, so ergeben sich Fehler für die in Abb. 51 (Kanal 1) und Abb. 52 (Kanal 3) gezeigten Linien, die etwa gleich bzw. größer als die gezeigten Residuen sind. Damit zeigt sich auch, wie empfindlich das Instrument auf Inhomogenitäten der Temperatur in seinem Inneren reagiert, bzw. wie empfindlich die Fehlerabschätzung $\Delta L_{\text{ATM},t}^{\Delta}$ auf Temperaturdifferenzen im Gerät reagiert. Entsprechend der guten Übereinstimmung der Residuen mit den

²⁴ Die relative Linienstärke im Schwarzkörperspektrum beträgt nach Gl. (100) $1 - \tau^2$. Nimmt diese um den Faktor x zu, so gilt umgekehrt für den neuen Transmissionskoeffizienten $1 - \tau'^2 = x(1 - \tau^2)$ und $\tau' = \sqrt{1 - x(1 - \tau^2)}$.

Fehlerabschätzungen bei einer Temperaturinhomogenität im Gerät von +2K darf angenommen werden, daß dies der effektive Wert für die Temperaturinhomogenität darstellt. Für eine Bewertung dieses Fehlers, der nur an den Linienpositionen auftritt, sollte der Fehler mit der tatsächlichen Linienhöhe in Relation gesetzt werden. Damit ergibt sich für Kanal eins ein relativer Fehler von 4 % und für Kanal drei ein Fehler von 8 %.

7.7 Bemerkungen zur Kalibrierung

Durch die hier beschriebenen Verfahren konnten die Spektren kalibriert werden, auch in Bereichen, die durch Gasabsorptionen und -emissionen gestört wurden. Der Unsicherheitsbereich mit dem die Kalibrierung behaftet ist liegt bei unter 1,1%. Die Ursache hierfür sind die Schwarzkörpercharakteristika. Des weiteren trägt das Photonenrauschen dominant zum Rauschen bei. Nur in Kanal 1 kann das Rauschen an Spektralbereichsgrenzen von Fehlern der Phasenbestimmung überdeckt werden. An spektralen Positionen, bei denen Linien im Schwarzkörper anzutreffen sind, konnte das entwickelte Kalibrierungsverfahren entscheidende Fortschritte machen. Trotzdem bleibt ein Restfehler erhalten, der stark von der individuellen Linie und dem thermischen Verhalten des Instruments bestimmt wird und über die anderen Fehler der Kalibrierung dominiert. Es zeigte sich aber auch, wie empfindlich das System auf Isothermestörungen reagiert. Es sollte von daher von experimenteller Seite entschieden Wert auf einen isothermen Betrieb des Instruments gelegt werden und auf eine ausreichende Elimination von Gasen geachtet werden, die innerhalb der empfindlichen Bereiche des Spektrometers Linien aufweisen. Genauso sollte das Ausfrieren von Wasserdampf an den Wänden verhindert werden, da dieses Eis während des Fluges sublimieren kann.

Zweifellos ist es im Interesse, den Fehlerbereich der radiometrischen Kalibrierung noch weiter einzuschränken. Hierzu bedarf es eines detaillierteren Modells, das die noch zu bestimmenden individuellen Oberflächenbeschaffenheiten, Temperaturen der Oberflächen, Temperaturen der Gase in den einzelnen Schichten, das Emissionsverhalten des Hintergrundes etc. berücksichtigt. Es ist zu wünschen, daß der entwickelte Modellansatz, der erstmals zu einem quantifizierbaren Fehler der kalibrierten Spektren führte, weiter entwickelt wird, so daß die Präzision der Spektren und damit auch die wissenschaftliche Aussagekraft weiter steigt.

Die Spektren sind nach der Phasenkorrektur radiometrisch und spektral kalibriert worden und mit der Fehlerabschätzung auch individuell bezüglich ihrer radiometrischen Eigenschaften charakterisiert. Die radiometrische Charakterisierung beschreibt das breitbandige Verhalten eines Spektralintervalls. Sie gibt jedoch keine Auskunft, wie sich das Spektrometer schmalbandig verhält, d.h. wie das Spektrometer auf im Prinzip unendlich schmale Linien reagiert und diese abbildet. Diese noch ausstehende spektroskopische Charakterisierung ist eminent wichtig zur Interpretation der Linien und wird im folgenden Kapitel behandelt.

8 Die Apparatefunktion eines Fourierspektrometers

Zur Charakterisierung eines Interferometers und seiner Justierung ist die Kenntnis seines Apparateprofils, der Abbildung einer beliebig schmalen Linie durch das Instrument, eine bedeutende Größe. Abweichungen vom nominellen Apparateprofil deuten auf ein experimentelles Problem hin. Aber auch für die Anpassung der modellierten an die gemessenen Spektren ist das Apparateprofil während der Auswertung zu Spurengasprofilen von Bedeutung. Die spektroskopischen Linieninformationen aus den Liniendatenbanken geben die Linienintensitäten, -positionen und die Verbreiterungskoeffizienten für Druck und Temperatur an. Das damit modellierte Spektrum muß jedoch an das Experiment angepaßt werden, indem das modellierte Spektrum mit dem Apparateprofil defaltet wird. Ist das Apparateprofil nicht exakt bekannt, so führt dies zu Restfehlern des Anpassungsprozesses und kann zu ungenauereren Ergebnissen der Spurengaskonzentrationen führen.

Aufgrund der angeführten Punkte ist es erstrebenswert, das Apparateprofil exakt zu beschreiben. Das ideale Apparateprofil aus Abschnitt 3.2 ist hierfür nicht ausreichend, da es z.B. die Verbreiterung durch das Gesichtsfeld nicht berücksichtigt.

Die allgemeine Definition der erreichbaren Auflösung Γ eines Fourierspektrometers gilt ausschließlich für die Strahlachse des Instrumentes. Sie impliziert, daß ein Interferogramm monochromatischer Strahlung einer unendlich ausgedehnten Kosinusschwingung entspricht und nur durch den maximalen optischen Hub Λ des Instrumentes abrupt begrenzt wird. Tatsächlich besteht die interferierende Strahlung jedoch nicht ausschließlich aus zur Strahlachse parallelen Strahlen, sondern der Detektor empfängt Strahlung aus einem Raumwinkelbereich Ω . Dies führt zu einer Änderung der Auflösung in Abhängigkeit vom Raumwinkel und wird in diesem Abschnitt behandelt.

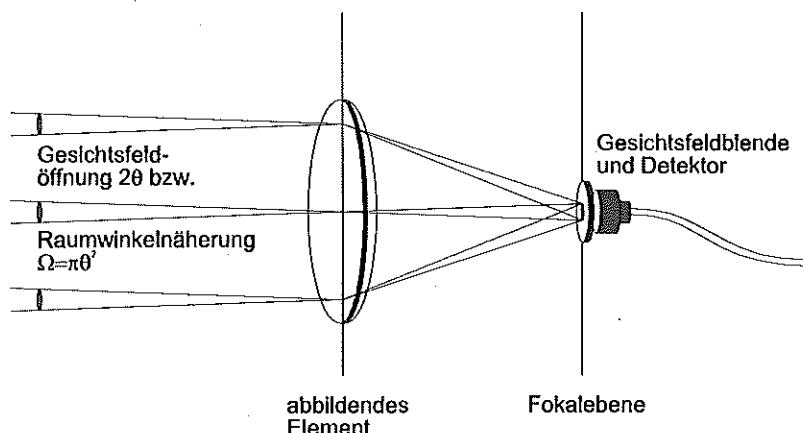


Abb. 54 Skizze zur Verdeutlichung des Zusammenhangs zwischen dem Gesichtsfeld im Interferometer und der definierenden Gesichtsfeldblende.

Der Raumwinkelbereich wird durch eine Gesichtsfeldblende im Fokus des abbildenden Elements (Kollimator) definiert und entsprechend der '*interferometrischen Raumwinkelbedingung*' begrenzt [Vanasse,Sakai,1967]. Die Raumwinkelbedingung kann folgendermaßen definiert werden:

Das Interferenzmuster einer monochromatischen Strahlung besteht aus Haidinger-Ringen in der Fokalebene, die konzentrisch um die Strahlachse angeordnet sind. Diese Ringe laufen durch Verändern des optischen Weges zum Zentrum hin, bzw. von ihm weg. Herrscht im Zentrum konstruktive Interferenz, so ist der maximal zulässige Raumwinkel durch den ersten Ring destruktiver Interferenz begrenzt.

Diese Definition der Raumwinkelbedingung führt zu einem endlichen Gesichtsfeld und damit zu einem verbreiterten Apparateprofil. Connes [Connes,1961] hat das Apparateprofil erstmals für runde Gesichtsverteilungen angegeben. Parshin [Parshin,1962] und Stewart [Stewart,1968] haben allgemeinere Ansätze gewählt. In diesem Kapitel werden die Verbreiterungsmechanismen des Apparateprofils aufgezeigt und für die effektive Gesichtsfeldverteilung von MIPAS-B2 das Apparateprofil angegeben. Mit Hilfe der das Apparateprofil bestimmenden Modulationsfunktion des Interferogramms lässt sich das Apparateprofil auf genormte Profile korrigieren. Mit dem in dieser Arbeit entwickelten Mechanismus zur Parametrisierung kann das Apparateprofil eines Fourierspektrometers analytisch angegeben werden und dann in der weiteren Verarbeitung Verwendung finden.

8.1 Die Apparatefunktion in Abhängigkeit von der Strahldivergenz und der Interferogrammlänge

Der optische Gangunterschied zwischen achsparalleler Strahlung und der unter dem Winkel θ einfallenden monochromatischen Strahlung entspricht bei kleinen Winkeln²⁵ [Hecht,1989]

$$\Delta x = x - x_0 = x - \frac{x}{\cos \theta} + x \tan \theta \sin \theta = x(1 - \cos \theta) \approx x \frac{\theta^2}{2} . \quad (118)$$

Um die Raumwinkelbedingung bei der Wellenzahl σ_0 zu erfüllen, darf die optische Phase $2\pi\sigma_0\Delta x$ zwischen den beiden Strahlen maximal den Wert π betragen. Bei der maximalen Weglängendifferenz des Interferometers von Λ ergibt sich die Bedingung

$$\theta_{\text{FOV}}^2 \leq \frac{1}{\sigma_0 \Lambda} . \quad (119)$$

Der Raumwinkel berechnet sich dann durch Integration über die Kugelfläche, die durch den Kegelwinkel θ_{FOV} begrenzt wird. Bei einer kreisförmigen Blende ergibt sich für kleine Winkel θ_{FOV} der Raumwinkel²⁶ und die Raumwinkelbedingung zu

$$\Omega_{\text{FOV}} = \pi \theta_{\text{FOV}}^2 \leq \frac{\pi}{\sigma_0 \Lambda} . \quad (120)$$

Das reale Interferogramm ist auf die Länge $-\Lambda$ bis $+\Lambda$ begrenzt und setzt sich aus allen Raumwinkellementen innerhalb des Raumwinkels Ω zusammen. Das bedeutet, daß Gl. (23) über den gesamten Raumwinkel integriert werden muß. Das Integral über σ von 0 bis ∞ fällt

²⁵ Für kleine Winkel kann $\cos(\theta) = 1 - \frac{\theta^2}{2} + \dots$ nach der zweiten Ordnung abgebrochen werden.

²⁶ Der Raumwinkel berechnet sich für kleine Winkel θ zu $\Omega = \int_{\phi=0}^{2\pi} \int_{\theta=0}^{\theta_{\max}} \sin \theta d\theta d\phi = 2\pi(1 - \cos \theta_{\max}) \rightarrow \pi \theta_{\max}^2$

weg, da es sich bei dieser Betrachtung um monochromatische Strahlung handelt. Von daher wird σ durch $\sigma_0 \cos \theta$ ersetzt.

$$\text{IFG}(x) = \text{RECT} \left[\frac{x}{2\Lambda} \right] \int_{\theta=0}^{\theta_{\max}} \int_{\phi=0}^{2\pi} I(\theta, \phi) d\phi \cos(2\pi x \sigma_0 \cos \theta) \sin \theta d\theta$$

$2\pi I(\theta)$

(121)

Das Integral aus Gl. (121) muß numerisch berechnet werden, da die Intensitätsverteilung $I(\phi, \theta)$ im Gesichtsfeld (FOV) individuell vom Experiment abhängig ist. Der Winkel ϕ ist lediglich in $I(\phi, \theta)$ enthalten, so daß das Integral über θ ebenfalls über Ringe der mittleren Ringintensität $\bar{I}(\theta)$ ausgeführt werden kann. Durch Substitution von $\sigma = \sigma_0 \cos(\theta)$ kann Gl. (121) leichter interpretiert werden: Mit wachsendem Winkel θ erscheint die einfallende Strahlung mit der Wellenzahl σ_0 im Spektrum nach $\sigma = \sigma_0 \cos(\theta)$ verschoben. D.h. die spektrale Linie jedes Rings erscheint im Spektrum bei einer verschiedenen Wellenzahl.

Mit obiger Substitution wird die Ringintensität $\bar{I}_\theta(\theta)$ somit als Funktion $\bar{I}_{\sigma_0}(\sigma)$ geschrieben:

$$\bar{I}_{\sigma_0}(\sigma) = \begin{cases} \bar{I}_0 \left(\arccos \left(\frac{|\sigma|}{\sigma_0} \right) \right) & \text{wenn } \cos(\theta_{\max}) < \frac{|\sigma|}{\sigma_0} < 1 \\ 0 & \text{sonst} \end{cases}$$
(122)

Im folgenden wird die Ringintensität stets als Funktion von σ betrachtet. Das Interferogramm ergibt sich dann zu²⁷

$$\text{IFG}(x) = \frac{2\pi}{\sigma_0} \text{RECT} \left[\frac{x}{2\Lambda} \right] \int_{\sigma=0}^{+\infty} \bar{I}_{\sigma_0}(\sigma) \cos(2\pi x \sigma) d\sigma$$
(123)

Das Integral in Gl. (123) entspricht gerade der Kosinustransformation von $\bar{I}_{\sigma_0}(\sigma)$, so daß sich das Spektrum einer monochromatischen Linie bei σ_0 sofort mit

$$S(\sigma) = \frac{2\pi\Lambda}{\sigma_0} \text{SINC}(2\pi\Lambda\sigma) \otimes \bar{I}_{\sigma_0}(\sigma)$$
(124)

angeben läßt. Gl. (124) läßt sich folgendermaßen interpretieren:

- Durch die aufgrund der Kosinustransformation geforderten Symmetrie von $\bar{I}_{\sigma_0}(\sigma)$ um $\sigma=0$ bilden sich zwei Linien bei σ_0 und $-\sigma_0$ im Spektrum heraus. Dies ist bereits in Gl. (122) vorweggenommen worden.
- Das Linienprofil bei $-\sigma_0$ ist gegenüber demjenigen bei σ_0 gespiegelt.
- Die Linienprofile entsprechen dem Apparateprofil für die jeweilige nominelle Wellenzahl σ_0 .
- die resultierende Apparatefunktion einer monochromatischen Linie ergibt sich aus der Faltung der Verteilungsfunktion $\bar{I}_{\sigma_0}(\sigma)$ mit der SINC-Funktion, die von der Begrenzung des Interferogramms definiert wird. Das Profil der monochromatischen Linie wird dabei verbreitert und
- gleichzeitig wird die Wellenzahlskala aufgrund der Breite von $\bar{I}_{\sigma_0}(\sigma)$ verschoben.

²⁷ Die Integrationsgrenzen können auf 0 bis ∞ erweitert werden, da die Intensitätsverteilung bereits auf $\sigma_0 \cos(\theta_{\max})$ bis σ_0 begrenzt ist.

Von Gl. (124) wird vorerst nur die Linie auf der positiven Wellenzahlskala betrachtet. Um die Apparatefunktion relativ zur Wellenzahl σ_0 der betrachteten Linien anzugeben, wird eine verschobene Verteilungsfunktion $\tilde{I}_{\sigma_0}(\sigma) = \overline{I_{\sigma_0}}(\sigma + \sigma_0)$ gebildet und Gl. (124) entsprechend umgeschrieben

$$S(\sigma) = \frac{2\pi\Lambda}{\sigma_0} \delta(\sigma - \sigma_0) \otimes \text{ILS}(\sigma) \quad (125)$$

mit der Definition des Apparateprofils $\text{ILS}(\sigma)$

$$\text{ILS}(\sigma) = \tilde{I}_{\sigma_0}(\sigma) \otimes \text{SINC}(2\pi\Lambda\sigma) \quad (126)$$

Umgekehrt kann jetzt ebenfalls aus dem Apparateprofil im Spektrum die sogenannte Modulationsfunktion $M(x)$ gewonnen werden. Diese gibt im Ortsraum die einhüllende Funktion des Interferogramms an und ist die Fouriertransformierte des Apparateprofils $\text{ILS}(\sigma)$:

$$M_{\sigma_0}(x) = \text{FT}^+ \left[\tilde{I}_{\sigma_0}(\sigma) \right] \text{RECT} \left[\frac{x}{2\Lambda} \right] \quad (127)$$

Die Modulationsfunktion ist eine komplexe Funktion; dies überrascht auf den ersten Blick. Sie ist aufgrund der Verschiebung an dieser Stelle für einseitige Spektren definiert, d.h. für Spektren, die nur auf der positiven Wellenzahlskala ungleich Null sind. Würde hingegen für die Linie auf der negativen Wellenzahl bei $-\sigma_0$ ebenfalls das Interferogramm gebildet und mit dem Interferogramm aus Gl. (127) addiert, so verschwinden alle imaginären Anteile. Dieser an sich realistischere Ansatz bietet allerdings weniger Interpretationsmöglichkeiten, da die Phaseninformation verschwindet.

Die Phase der Modulationsfunktion läßt sich nur interpretieren, wenn einige 'a priori' Informationen verwendet werden:

- Die nominelle Wellenzahl σ_0 wird als bekannt vorausgesetzt. Sie zeichnet sich dadurch aus, daß sie der Wellenzahl entspricht, die von einer vollkommen strahlachsenparallelen Strahlung gemessen wird. D.h. alle Verschiebungen beziehen sich auf das Signal der Strahlachse.
- Wird die Modulationsfunktion durch Betrag und Phase dargestellt $M_{\sigma_0}(x) = |M_{\sigma_0}(x)| * e^{i2\pi x \Delta\sigma(x)}$, so ist die Steigung der Phase der komplexen Modulationsfunktion im Ursprung ein Maß für die Verschiebung $\Delta\sigma$ des Schwerpunkts der Linie vom nominellen Zentrum. Da sich eine komplexe Exponentialfunktion in eine Deltadistribution fouriertransformiert, ergibt sich im Spektralraum der Zusammenhang zwischen Verschiebung und der Steigung der Phase mit

$$\text{FT}^- \left[|M_{\sigma_0}(x)| * e^{i2\pi x \Delta\sigma(x)} \right] = \text{FT}^- \left[|M_{\sigma_0}(x)| \right] \otimes \delta(\sigma - \Delta\sigma(x)) \quad (128)$$

Die Verschiebeoperation um $\Delta\sigma(x)$ wird durch die Deltadistribution ausgeführt. Der Zusammenhang zwischen Steigung der Phase im Ursprung und der Verschiebung des Schwerpunktes lautet damit

$$\Delta\sigma = \frac{1}{2\pi} \frac{\partial}{\partial x} \text{Phase}(x) \Big|_{x=0} \quad (129)$$

- Jegliche Abweichungen von einem linearen Phasenverlauf der Modulationsfunktion charakterisieren die Asymmetrien des Apparateprofils. Die Abweichungen vom linearen Phasenverlauf werden nur deshalb als Asymmetrien im Spektrum interpretiert, weil man

jede einzelne Linie in sich als symmetrisch annimmt und nicht nur die Symmetrie zum Ursprung des Spektrums fordert.

Im folgenden werden zwei exemplarische Fälle betrachtet, nämlich für ein homogen ausgeleuchtetes Gesichtsfeld und für einen gaußverteilten Strahlquerschnitt. Die Apparatefunktion für das MIPAS-B2 wird im übernächsten Abschnitt modelliert. Sowohl für den homogenen als auch für den gaußverteilten Strahlquerschnitt wird als Gesichtsfeldbegrenzung die Halbwertsbreite nach der Raumwinkelbedingung angenommen.

Homogene Ausleuchtung des gesamten Gesichtsfeldes

Eine Abschätzung für den Fall eines homogen ausgeleuchteten, kreisförmigen Gesichtsfeldes, entsprechend der interferometrischen Raumwinkelbedingung mit

$$\theta_{\max} = \theta_{\text{FOV}} = \sqrt{\sigma_0 \Lambda}^{-1}, \quad (130)$$

ergibt aus Gl. (122) eine rechteckförmige Verteilungsfunktion $\hat{I}_{\sigma_0}(\sigma)$

$$\begin{aligned} \hat{I}_{\sigma_0}(\sigma) &= \begin{cases} \hat{I}_0 & \text{wenn } \cos(\theta_{\max}) \approx 1 - \frac{\theta_{\max}^2}{2} < \frac{\sigma}{\sigma_0} + 1 < 1 \\ 0 & \text{sonst} \end{cases} \\ &= \hat{I}_0 * \text{RECT} \left[\frac{\sigma + \frac{\theta_{\max}^2 \sigma_0}{4}}{\frac{\theta_{\max}^2 \sigma_0}{2}} \right] \end{aligned} \quad (131)$$

Die Apparatefunktion errechnet sich dann nach Gl. (126). Sie entspricht bei einem solch ausgeleuchteten Gesichtsfeld einer SINC-Funktion, die mit einer Rechteckfunktion verschmiert bzw. gefaltet wird (siehe auch [Hase,1995]). Da die Verteilungsfunktion $\hat{I}_{\sigma_0}(\sigma)$ konstant ist, ergibt sich daraus mit Gl. (130) direkt die Verschiebung der Apparatefunktion mit der Hälfte der Breite der Verteilungsfunktion, also

$$\Delta\sigma = -\sigma_0 \frac{\theta_{\max}^2}{4} = -\frac{1}{4\Lambda}. \quad (132)$$

Für die Einhüllende des Interferogramms $\text{IFG}(x)$, die Modulationfunktion $M(x)$, folgt schließlich durch Fouriertransformation von Gl. (131)

$$M_{\sigma_0}(x) = \hat{I}_0 \frac{i(e^{-ix/\Lambda} - 1)}{2\pi x} \text{RECT} \left[\frac{x}{2\Lambda} \right]. \quad (133)$$

Sie sinkt am Ende des Interferogramms bei $x = \Lambda$ mit dem Realteil auf Null ab.

Gaußförmiges Strahlprofil über dem Gesichtsfeld

Einen weiteren Grenzfall stellt ein Gaußsches Strahlenbündel dar. Definiert man die Gesichtsfeld-Grenze θ_{FOV} als den Punkt, bei dem das Gaußprofil auf den Faktor $1/e$ abgesunken ist, lassen sich die Apparate- und Modulationsfunktion angeben. Für die Verteilungsfunktion gilt dann:

$$\tilde{I}_{\sigma_0}(\sigma) = \begin{cases} I_0 e^{-\pi^2 \arccos\left(\frac{\sigma+\sigma_0}{\sigma_0}\right)/\theta_{\max}^2} & \text{wenn } \cos(2\theta_{\max}) < \frac{\sigma+\sigma_0}{\sigma_0} < 1 \\ 0 & \text{sonst} \end{cases} \quad (134)$$

Zum Berechnen der Apparatefunktion entsprechend Gl. (126) wird die untere Integrationsgrenze auf $\sigma' = \sigma_0(\cos 2\theta_{\max} - 1)$ ausgeweitet, um noch einen Teil des auslaufenden Gaußprofils mit zu integrieren.

Gegenüberstellung der beiden Verteilungen

In Abb. 55 sind die einzelnen Gesichtsfeld-Verteilungsfunktionen dargestellt, mit denen die SINC-Funktion gefaltet wird, um das Apparateprofil zu erhalten. Die breite Verteilung aufgrund des Gaußprofils des Gesichtsfeldes lässt auf eine breite Apparatefunktion schließen. Ebenso wird sich die Asymmetrie der Verteilungsfunktion auf das Ergebnis fortpflanzen.

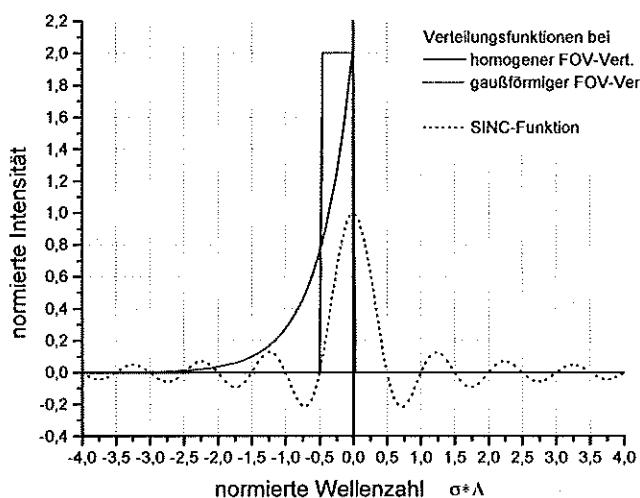


Abb. 55 Das Apparateprofil entsteht aus der Faltung der gezeigten Verteilungsfunktionen $\tilde{I}_{\sigma_0}(\sigma)$ mit der dargestellten SINC-Funktion.
Die Verteilungsfunktionen spiegeln das Intensitätsverhalten über dem Gesichtsfeld wieder. Ihre Flächen sind auf eins normiert.

Das Faltungsprodukt der Apparatefunktion $ILS(\sigma)$, die Modulationsfunktion $M(x)$ sowie die Verschiebung werden numerisch bestimmt. Abb. 56 zeigt die resultierenden Apparateprofile bei einem homogen ausgeleuchteten Gesichtsfeld sowie bei einem gaußförmig verteilten Gesichtsfeld. Vergleichsweise ist in Abb. 56 die ideale SINC-Funktion als Referenz dargestellt.

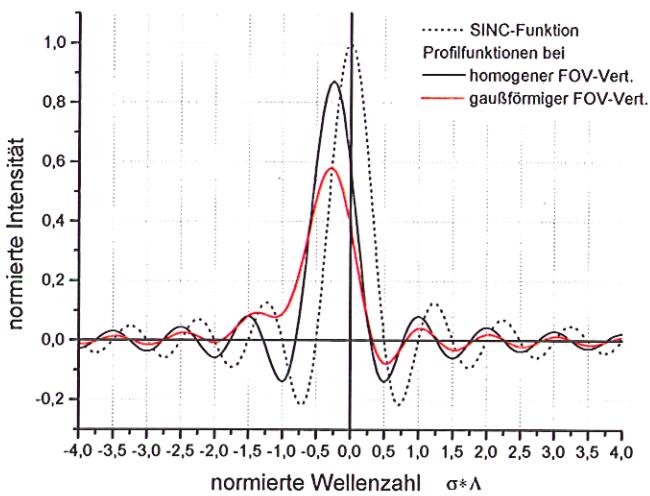


Abb. 56 Vergleich zwischen idealem (SINC-Funktion) und durch unterschiedliche Gesichtsfeldverteilungen verbreiterten Apparateprofilen für $\sigma_0=1000 \text{ cm}^{-1}$.

Um unabhängig vom optischen Hub Λ die Apparatefunktion angeben zu können, ist die Abszisse mit Λ normiert.

Deutlich sind die Verbreiterungen gegenüber einem idealen SINC-förmigen Apparateprofil zu erkennen. Bei der Apparatefunktion des gaußförmigen Gesichtsfelds tritt zudem erwartungsgemäß eine starke Asymmetrie in Erscheinung.

Neben den Maxima sind die Nebenschwingungen zu erkennen. Die Nebenschwingungen röhren in erster Linie von den Unstetigkeiten am Ende der Modulationsfunktion her, wo die Interferogrammaufnahme abgebrochen wird und somit das Interferogramm nicht kontinuierlich gegen Null gehen kann. Die Interpretation einzelner Linien im Spektrum wird durch die Nebenschwingungen erschwert. Das Problem tritt sowohl bei einer visuellen Interpretation der Daten als auch bei numerischer Interpretation²⁸ auf, sofern der Spektralbereich eingeschränkt ist und nicht alle Nebenschwingungen mit berücksichtigt werden können.

Interessant ist auch das Verhalten der Modulation (Abb. 57). Der schnellere Abfall bei einem gaußförmigen Gesichtsfeld führt zu einer stärkeren Verbreiterung des Apparateprofils im Vergleich zur homogenen Ausleuchtung. Die deutlichen Abweichungen von einer linearen Phase begründen die Asymmetrien im Apparateprofil.

²⁸ Die Überlagerung der Nebenschwingungen benachbarter Linien führt theoretisch zu keinem Interpretationsfehler, da die Fouriertransformation orthogonale Zerlegungsfunktionen ergibt. Der Informationsgehalt muß dann jedoch vollständig sein, und die Nebenschwingungen dürfen nicht durch eine Begrenzung des Spektralbereichs beschränkt werden.

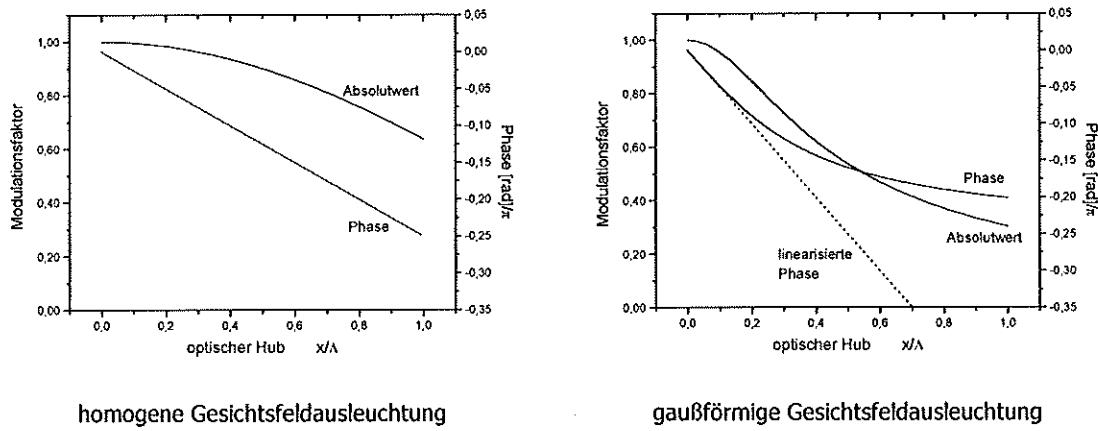


Abb. 57 zeigt die Modulationsfunktionen der Interferogramme aufgrund unterschiedlicher Verteilungen der Strahlungsintensität über dem Gesichtsfeld.
Die Funktionen sind symmetrisch. Daher ist nur die positive Abszisse dargestellt.

Für die Verschiebungen der Apparatefunktionen kann ein relativer Wert aus der Phasensteigung am Nullpunkt abgelesen werden. In Tab. 5 sind einige charakteristische Größen aufgeführt, mit denen das Apparateprofil eines Fourierspektrometers spezifiziert wird.

	Auflösung $\Gamma^*\Lambda$	Halbwertsbreite $\text{FWHM}^*\Lambda$	Rel. Änderung der FWHM %	Versatz des Maximums $\Delta\sigma^*\Lambda$	Versatz des Schwerpunkts $\Delta\sigma^*\Lambda$
Infinitesimal kleines Gesichtsfeld, $\theta \rightarrow 0$	0,5	0,603	0	0,0	0,0
Homogen ausgeleuchtetes Gesichtsfeld mit einem Öffnungswinkel entsprechend der geometrischen Raumwinkelbedingung	0,55	0,65	7	0,25	0,25
Gesichtsfeld mit einem gaußförmigen Strahlungsprofil. Der Punkt, an dem die Intensität auf $1/e$ abgesunken ist, entspricht der Raumwinkelbegrenzung	nicht definierbar	0,76	26	0,27	0,5

Tab. 5 Die wichtigen Kenngrößen des Apparateprofils sind für die speziellen Gesichtsfeldverteilungen einer homogenen und gaußförmigen Ausleuchtung angegeben. Alle Größen sind mit dem optischen Hub Λ normiert.

8.2 Die Apparatefunktion des MIPAS-B2

Im vorangegangenen Abschnitt wurden bereits eingehend die Auswirkungen eines endlichen Gesichtsfelds (FOV) mit exemplarischen Intensitätsverteilungen auf die Auflösung und die Wellenzahlzuordnung untersucht. Im folgenden sollen nun anhand der spezifischen Optik von MIPAS-B2 diese Größen für das Experiment quantifiziert werden. Dazu ist zuerst das Gesichtsfeld der Detektoroptik zu bestimmen. Einflüsse des Teleskops und des Interferometers auf das Gesichtsfeld des Dewars können unberücksichtigt bleiben, weil die

Apertur im optischen Weg nicht eingeschränkt wird. Messungen des Gesichtsfelds waren mit dem vorhandenen experimentellen Aufbau jedoch nur für einen meridionalen und einen sagittalen Schnitt möglich [Friedl-Vallon,1998]. Aus diesen Daten wird eine gesamte Gesichtsfeldverteilung interpoliert, um Gl. (125) bzw. (127) lösen zu können. Die Mitten der Halbwertsbreiten des meridionalen und sagittalen Schnittes definieren die sagittale bzw. die meridionale Achse des Gesichtsfelds; deren Schnittpunkt wird als Strahlachse definiert.

Nach dem Übergang in Kugelkoordinaten wurden für die Kreisringe des Gesichtsfelds mit $\theta=\text{const.}$ die Punkte $I(\theta, \varphi)$ zwischen den gemessenen Punkten bei $\varphi=0, \pi/2, \pi, 3\pi/2$ mit Hilfe einer Spline-Interpolation [Press et al.,1986] entlang des Kreisrings gefunden. Als Randbedingung muß die geschlossene Ringfunktion überall stetig und differenzierbar sein. Abb. 58 zeigt die mit diesem Verfahren gewonnenen Gesichtsfeldverteilungen für alle 4 Kanäle von MIPAS-B2. Der auffällige Unterschied zwischen dem ersten und den Kanälen 2 bis 4 begründet sich in der unterschiedlichen Optik im Dewar für die einzelnen Kanäle. Während für die Kanäle zwei bis vier eine konventionelle Linsenoptik zur Anwendung kommt, muß für den ersten Kanal ein Konus zur Konzentration der Strahlung auf den Detektor eingesetzt werden²⁹.

²⁹ Durch plane reflektierende Flächen in den Detektorelementen entstehen sogenannte 'parasitäre- oder Geisterinterferogramme', die durch Überlagerung von Strahlung mit unterschiedlichen Einfallswinkel reduziert werden kann. Je niedriger die Wellenzahl der einfallenden Strahlung ist, desto größer muß der Einfallswinkelbereich zur Unterdrückung der Geisterinterferogramme sein. Der Einstrahlwinkel einer Linsenoptik, würde in dem langwellenlängigen ersten Kanal die Geisterinterferogramme nicht ausreichend unterdrücken. Da in einem Konus aufgrund von internen Vielfachreflexionen der Einstrahlwinkel auf den Detektor im Vergleich zu einer Linsenoptik einen weitaus größeren Bereich annimmt, können damit diese parasitären Interferogramme auch für den ersten Kanal reduziert werden (z.B. [Gulde,Trieschmann,1990]).

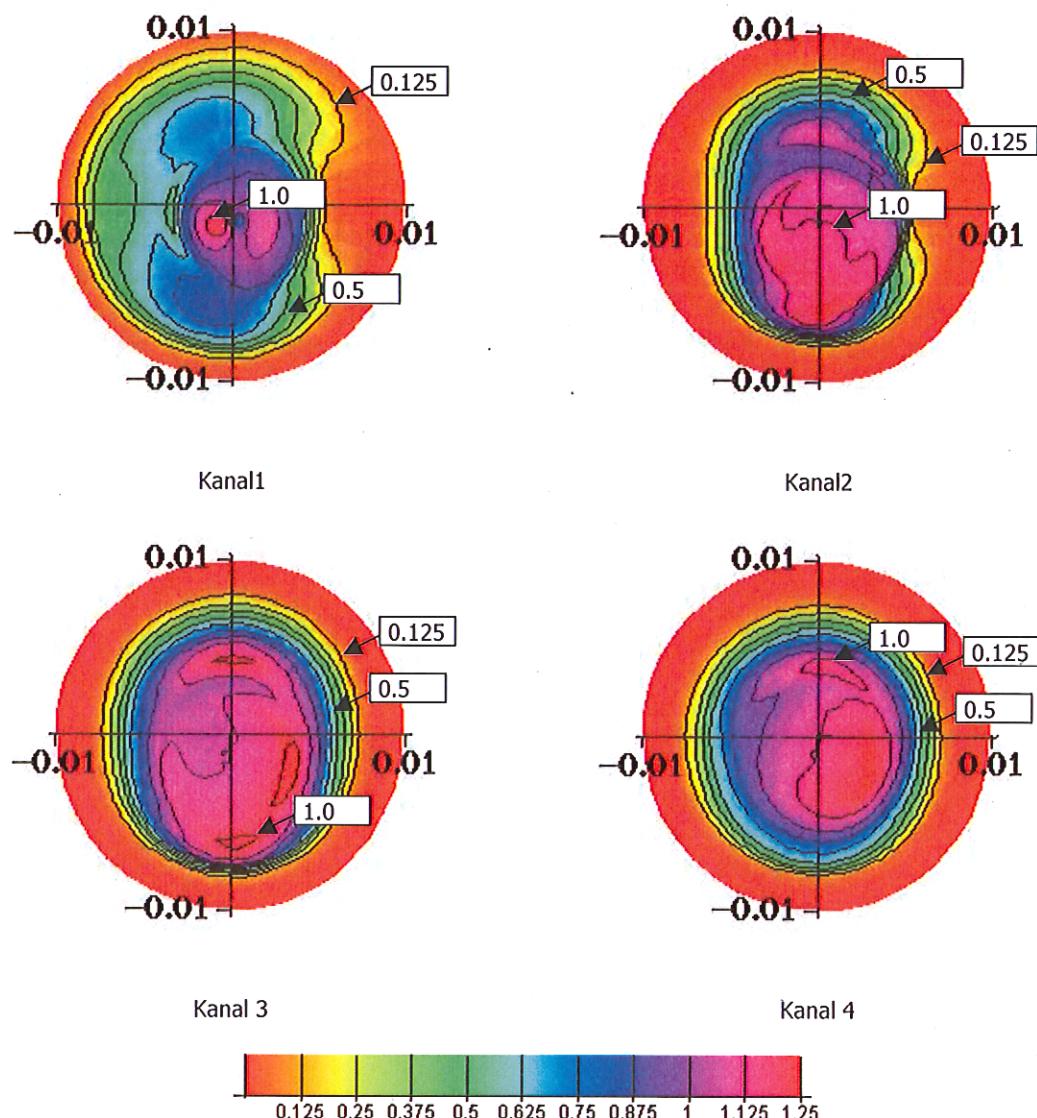


Abb. 58 Modellierte instrumentelle Gesichtsfeldverteilungen für die vier Detektorkanäle.
 Die Farbendarstellung gibt den Intensitätsverlauf im Gesichtsfeld wieder. Die sagittalen bzw. meridionalen Achsen sind in Bogenmaß Auslenkung θ skaliert angegeben. Die Darstellung ist entsprechend dem Gesichtsfeld am Teleskop orientiert, d.h. die senkrechten Achsen der Darstellung entsprechen den senkrechten Gesichtsfeld-Profilen am Teleskop. Die Modellierung erfolgte nach den Ausführungen in diesem Kapitel.

Aus diesen Gesichtsfeldverteilungen ergibt sich für jeden Kanal eine spezifische Verteilungsfunktion $\tilde{I}_{\sigma_0}(\sigma)$, mit der das nominelle Apparateprofil verschmiert wird (Abb. 59).

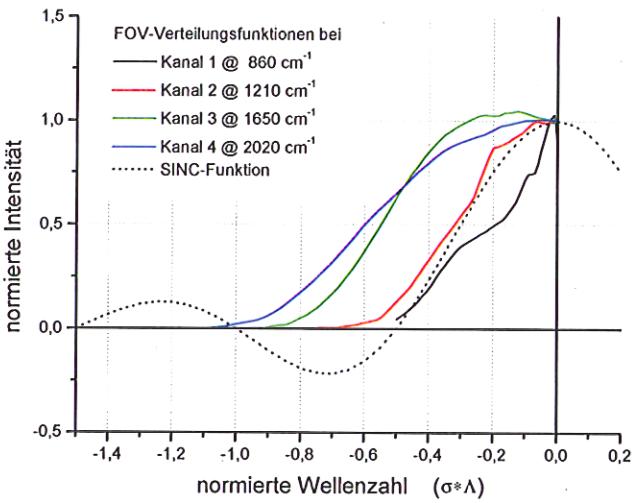


Abb. 59 Verteilungsfunktion $\tilde{I}_{\sigma_0}(\sigma)$ der vier Kanäle von MIPAS-B2.

Die Strahlachse ist auf eins normiert.

Deutlich ist die Verbreiterung der Verteilungsfunktion zu größeren Wellenzahlen σ_0 sichtbar, welches auch eine stärkere Verschiebung des Maximums der Apparatefunktion mit sich bringt. Die äußerst unsymmetrische, jedoch schmale Gesichtsfeldverteilung von Kanal 1 bildet sich auch in der Verteilungsfunktion ab. Die aus der Verteilungsfunktion resultierenden Apparateprofile sind in Abb. 60 dargestellt. Wie erwartet ist der Versatz $\Delta\sigma$ bei Kanal 3 und 4 größer als bei Kanal 1 und 2. Die Halbwertsbreite und die Asymmetrie des Apparateprofils nehmen mit der Wellenzahl erwartungsgemäß zu. In Tab. 6 sind diese Größen zusammengefaßt aufgeführt.

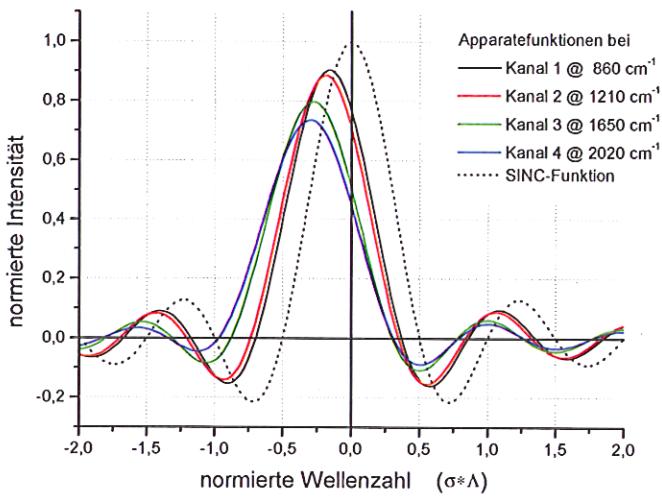


Abb. 60 Modellierte Apparatefunktion für alle vier Kanäle von MIPAS-B2. Deutlich ist die Verbreiterung der Halbwertsbreite zu größeren Wellenzahlen hin sichtbar.

Lengel [Lengel et al., 1998] hat mit Hilfe eines Entfaltungsverfahrens aus einem Satz von Linien innerhalb eines kleinen Spektralbereiches von 10 cm^{-1} bis 30 cm^{-1} eines koaddierten Spektrums das Linienprofil aus experimentellen Daten gewonnen. Die Übereinstimmung der

Halbwertsbreite FWHM mit dem hier vorgestellten Modell für die Profilfunktionen ist besser als 97 % in den Kanälen eins bis drei. Im Kanal 4 ist ein Vergleich aufgrund des höheren Rauschens im Spektrum schwieriger, da sich das Rauschen auf das Entfaltungsverfahren auswirkt. Die Übereinstimmung beträgt in diesem Kanal noch 94 %. Interessant sind die Modulationsfunktionen (Abb. 61), bei denen die beschriebenen Phänomene sichtbar sind. Der Modulationsrückgang zum Ende des Interferogramms bewirkt eine Verbreiterung des Apparateprofils, die Steigung der Phase bestimmt den Versatz des Schwerpunktes des Apparateprofils, und die Abweichung von einem linearen Phasenverlauf ist ein Maß für die Asymmetrie des Apparateprofils. Die drei Effekte nehmen zu höheren Wellenzahlen zu.

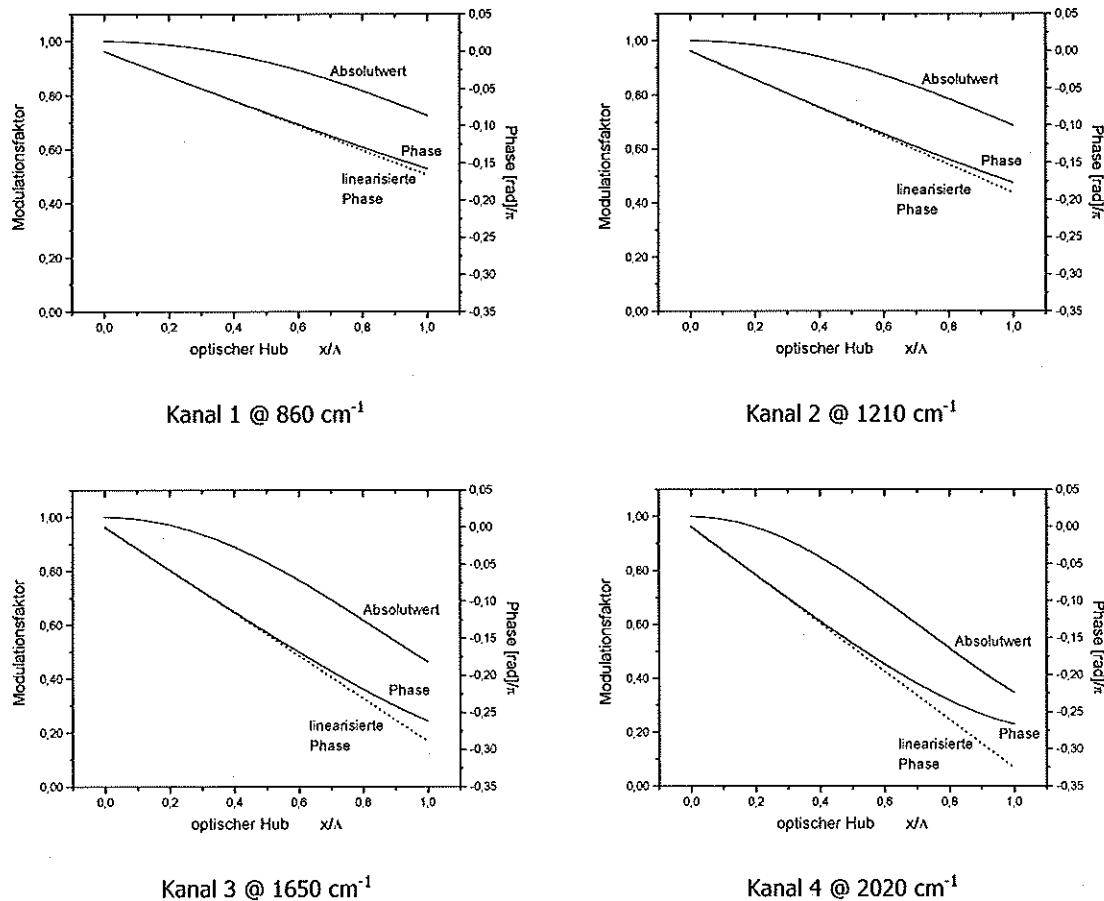


Abb. 61 Die Modulationsfunktionen der vier Kanäle

In folgender Tabelle sind abschließend für alle 4 Kanäle die charakteristischen Größen der Apparateprofile für die jeweils mittlere Wellenzahl des Spektralbereichs aufgelistet.

	Halbwertsbreite FWHM [cm ⁻¹]	Normierte Halbwertsbreite FWHM*Λ	Versatz des Schwerpunkts Δσ [cm ⁻¹]	Normierter Versatz des Schwerpunkts Δσ*Λ
SINC-Funktion	0,0416	0,603	0,0	0,0
Kanal 1 @ 860 cm ⁻¹	0,044	0,64	-0,0123	-0,178
Kanal 2 @ 1210 cm ⁻¹	0,044	0,64	-0,0131	-0,190
Kanal 3 @ 1650 cm ⁻¹	0,047	0,68	-0,0199	-0,289
Kanal 4 @ 2020 cm ⁻¹	0,049	0,71	-0,0224	-0,325

Tab. 6 Charakteristische Größen der Apparateprofile für die vier Kanäle von MIPAS-B2.

8.3 Die Korrektur des Apparateprofils

Um ein nominelles Apparateprofil zu erhalten, kann das reale mit dem Wissen der Abweichung vom nominellen korrigiert werden. Die Abweichung drückt sich im realen Apparateprofil bzw. in der Modulationsfunktion aus. Entsprechend einer Entfaltung kann nun die Fouriertransformierte des einseitigen Spektrums³⁰ durch Division mit der Modulationsfunktion

$$S_{\text{korr}}(\sigma) = \text{FT}^{-1} \left[\frac{\text{FT}^+ [S_{\text{einseitig}}(\sigma)]}{|M_{\sigma_0}(x)|^* e^{i2\pi x \Delta\sigma(x)}} \right] \quad (135)$$

zurück verschoben und in der Halbwertsbreite verschmälert werden. Dies ist allerdings exakt nur für den Wellenzahlbereich um σ_0 herum gültig, für den die Modulationsfunktion ermittelt wurde. Durch die Entfaltung ergibt sich für das Spektrum das ideale Apparateprofil, also die SINC-Funktion.

Durch die Division mit dem Betrag der Modulationsfunktion werden die Interferogrammenden stärker gewichtet und damit das hochfrequente Rauschen im Spektrum verstärkt. Da das Gesamtrauschen ungefähr mit der Potenz der relativen Auflösungsverbesserung zunimmt [Despain,Bell,1970], wird i. allg. von einer Entfaltung des Spektrums abgeraten. Diese Korrektur bietet sich primär in Verbindung mit einer folgenden Apodisation (Abschnitt 8.4) an, bei der das Interferogramm wiederum, aber definiert, in der Auflösung degradiert wird. So gewinnt man letztendlich ein um die Störungen korrigiertes, jedoch nicht stärker rauschbehaftetes Spektrum, bei dem das Apparateprofil exakt bekannt ist.

8.4 Das Apodisieren von Spektren

Die Information einer Linie in den Spektren erstreckt sich über die gesamte Ausdehnung des Apparateprofils. Bei dem idealen Apparateprofil, der SINC-Funktion, müssen zur Beschreibung einer spektroskopischen Linie alle Nebenschwingungen berücksichtigt werden. Insbesondere bei der Spurengasanalyse, die in kleinen Spektralbereichen [Echle et

³⁰ Auch hier muß die Fouriertransformation auf ein einseitiges komplexes Spektrum angewendet werden, um die gleichen Konditionen wie beim Bilden der Modulationsfunktion zu haben. Nur dann kann die Modulationsfunktion zur Korrektur herangezogen werden. Deshalb ist hier auch ausdrücklich von der Fouriertransformierten des Spektrums die Rede und nicht von dem ursprünglichen Interferogramm, welches durch Fouriertransformation ein symmetrisches Spektrum erzeugt.

al.,1994] erfolgt, gehen durch die Begrenzung des Spektralbereichs Informationen einzelner Linien verloren. D.h. die Linien lassen sich auch nicht mehr ausreichend trennen, da Überlagerungen der Nebenschwingungen auftreten. Eine Abhilfe gegen die Überschwingungen des Apparateprofils bietet die sogenannte Apodisation, bei der die Höhe der Nebenschwingungen I_n bis auf ein bestimmtes Maß reduziert werden, allerdings unter Inkaufnahme einer Verbreiterung der Apparatefunktion bzw. einer Verschlechterung der Auflösung.

Die Apodisation reduziert die Sprünge an den Unstetigkeitsstellen, die aufgrund der Begrenzung des Interferogramms $IFG(x)$ auftreten, durch Multiplikation des Interferogramms mit einer Apodisationsfunktion $APOD(x)$. Dadurch nimmt die Modulation zum Ende des Interferogramms hin ab. Norton und Beer [Norton,Beer,1976] untersuchten für unterschiedlichste Apodisationsfunktionen deren Verhalten bezüglich der hervorgerufenen Verbreiterung der ILS in Abhängigkeit von der Höhe der Nebenschwingungen. In dieser Veröffentlichung wurde ein empirisches Gütekriterium gefunden, nach dem die auf eine SINC-Funktion normierten Größen Halbwertsbreite FWHM und absolute Höhen I_{n1} der ersten Nebenschwingung folgendem Kriterium möglichst nahe kommen sollten:

$$\log_{10} \left(\frac{I_{n1}}{I_{SINC}} \right) = 1.939 - 1.401 \left(\frac{\text{FWHM}}{\text{FWHM}_{SINC}} \right) - 0.597 \left(\frac{\text{FWHM}}{\text{FWHM}_{SINC}} \right)^2 . \quad (136)$$

Wird durch die Apodisationsfunktion die Höhe der ersten Nebenschwingung reduziert, so erhöht sich unweigerlich die Halbwertsbreite mindestens entsprechend dem angegebenen Kriterium aus Gl. (136). Es konnte empirisch gezeigt werden, daß alle untersuchten Apodisationsfunktionen eine größere Verbreiterung der Apparatefunktion bei gleicher Reduktion der ersten Nebenschwingung aufwiesen als das Gütekriterium definiert, einige diesem Kriterium jedoch äußerst nahe kamen. Es ist also bei der Auswahl der entsprechenden Apodisationsfunktion darauf zu achten, daß diese Grenze des Gütekriteriums möglichst erreicht wird. Norton und Beer haben in ihrer Veröffentlichung [Norton,Beer,1976] den allgemeinen Ansatz einer Apodisationsfunktion als symmetrisches Polynom n-ter Ordnung vorgeschlagen und auf die 8. Ordnung begrenzt, da höhere Potenzen vernachlässigt werden konnten.³¹

$$APOD(x) = \sum_{i=0}^4 \alpha_i \left[1 - \left(\frac{x}{\Lambda} \right)^2 \right]^i \quad ; \quad \sum_{i=0}^4 \alpha_i = 1 \quad (137)$$

	Strong	Medium	Weak	Connes
α_0	0.045335	0.152442	0.384093	0.0
α_1	0.0	-0.136176	-0.087577	0.0
α_2	0.554883	0.983734	0.703484	1.0
α_3	0.0	0.0	0.0	0.0
α_4	0.399782	0.0	0.0	0.0

In folgender Abbildung sind die Apparateprofile dargestellt, die aus den Apodisationsfunktionen nach Gl. (137) resultieren.

³¹ Eine Auswahl weiterer Apodisationsfunktionen für die Fourierspektroskopie, die in der Literatur erwähnt werden:

$$APOD(x) = \begin{cases} 1 - \frac{x}{\Lambda} \text{sign}(x) & \text{Dreieck} \\ \cos\left(\frac{\pi x}{2\Lambda}\right) + \alpha \cos\left(\frac{3\pi x}{2\Lambda}\right) & \text{Filler D mit } \alpha = 0.18 \quad [\text{Filler,1964}] \\ 1 + (1 + \alpha) \cos\left(\frac{\pi x}{\Lambda}\right) + \alpha \cos\left(\frac{2\pi x}{\Lambda}\right) & \text{Filler E mit } \alpha = 0.18 \quad [\text{Filler,1964}] \end{cases}$$

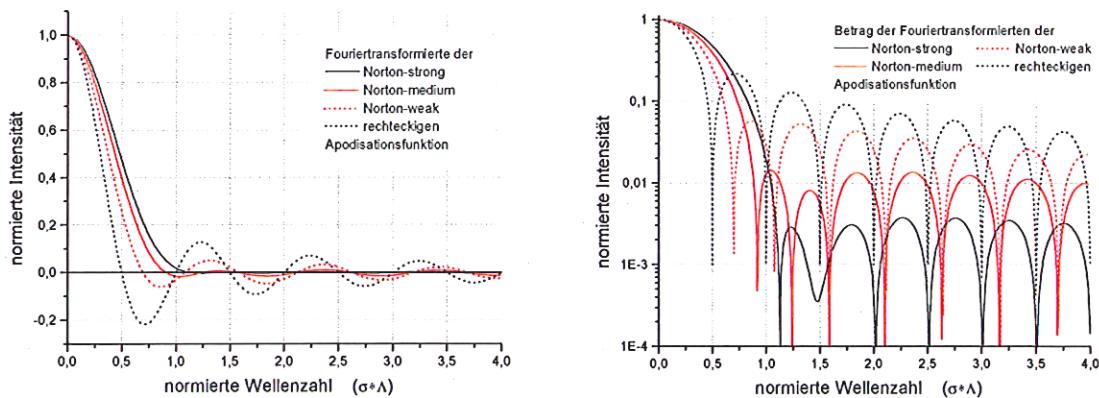


Abb. 62 Auswirkungen der Apodisationsfunktionen von Norton und Beer [Norton,Beer,1976] auf das Apparateprofil.

Das veränderte Apparateprofil gewinnt man durch Fouriertransformation der Apodisationsfunktion. Um die Abnahme der Nebenschwingungen zu verdeutlichen, ist rechts der Betrag des Ergebnisses logarithmisch aufgetragen. Zum Vergleich ist in beiden Abbildungen das SINC-Profil eingezeichnet, das einer rechteckförmigen Apodisationsfunktion entspricht.

Wie in Abb. 62 (rechts) ersichtlich, nehmen die Überschwingungen bei den Norton/Beer-Apodisationsfunktionen schnell ab. In den Linienflügeln ist ihre Abnahme aber nur noch gering. Bislang sind jedoch noch keine besseren Apodisationsfunktionen beschrieben worden, so daß für MIPAS-B2 und für diese Arbeit im Fall einer Apodisation die Funktion 'strong' nach Norton und Beer Anwendung fand.

Die in diesem Kapitel bereits besprochene Verbreiterung der Halbwertsbreite und die Verzerrung des Apparateprofils durch die Gesichtsfeldverteilung wird durch die Apodisation teilweise überdeckt, so daß das Apparateprofil weder durch die Gesichtsfeldverteilung, noch durch die Apodisationsfunktion allein bestimmt werden kann. Um dennoch ein definiertes Apparateprofil zu erhalten, bietet sich eine vorhergehende Korrektur, wie in Abschnitt 8.3 beschrieben, an.

8.5 Die Parametrisierung von Apparatefunktionen

Die Apparatefunktionen werden üblicherweise als explizite Kurven für eine bestimmte Wellenzahl σ_0 bzw. einen kleinen Wellenzahlbereich in Form einer Tabelle angegeben. Dies bedeutet, daß nur für spezifische Wellenzahlen eine Apparatefunktion existiert und für die dazwischen liegenden Wellenzahlen σ_0 das Apparateprofil interpoliert werden muß. Eine präzisere und allgemeinere Beschreibung der Apparatefunktion könnte durch eine Parametrisierung gewonnen werden, so daß die Apparatefunktion für jede Wellenzahl modelliert werden kann. Insbesondere erübrigts sich die tabellierte Form des Apparateprofils, die nur bedingt für analytische Verfahren zum Angleichen eines modellierten Spektrums an ein gemessenes verwendet werden kann. Versuche in diese Richtung, das Apparateprofil zu parametrisieren, hat es bereits mit Hilfe von Besselfunktionen gegeben [Chamberlain,1979, Lengel et al.,1998]. Dieser Funktionensatz ermöglicht aber nur die Darstellung symmetrischer Apparateprofile. Hase hat in [Hase et al.,1999] eine stückchenweise definierte reelle Modulationsfunktion zum Modellieren des Apparateprofils von einseitigen Interferogrammen vorgeschlagen. Das Apparateprofil einer derart gestalteten Modulationsfunktion konnte Hase mit einer semi-analytischen diskreten

Fouriertransformation gewinnen. Von wissenschaftlichem Interesse [Camy-Peret,1999] ist aber insbesondere eine Parametrisierung asymmetrischer Apparateprofile zweiseitiger Interferogramme, die eine komplexe Modulationsfunktion berücksichtigen müssen.

In dieser Arbeit wird eine Parametrisierung der Modulationsfunktion vorgeschlagen, mit der auch asymmetrische Apparatefunktionen von zweiseitigen Interferogrammen, wie im Fall von MIPAS-B2, modelliert werden können. Es konnte gezeigt werden, daß sich symmetrische und asymmetrische Apparatefunktionen durch einen Satz von Kummerfunktionen [Bronstein,Semendjajew,1981; Abramowitz,Stegun,1965], auch confluent hypergeometrische Reihen genannt, parametrisieren lassen. Die Funktionensätze ergeben fouriertransformiert begrenzte Polynome um den Ursprung. Diese Eigenschaft kann man sich zunutze machen, indem man die komplexe Modulationsfunktion nach diesen Polynomen entwickelt. Die Polynomkoeffizienten der Modulationsfunktion sind dann gleichzeitig die Koeffizienten für den Satz der Kummerfunktionen, so daß sich das Apparateprofil ILS(σ) direkt aus den Polynomkoeffizienten und den Kummerfunktionen ergibt. Eine Fouriertransformation ausgedehnter Datensätze ist somit nicht mehr nötig, um das Apparateprofil zu gewinnen.

Zurückgehend auf die spektrale Verteilungsfunktion $I_{\sigma_0}(\sigma)$ des vorangegangenen Abschnittes wird aus dieser eine komplexwertige Modulationsfunktion gewonnen. Dazu wird die Verteilungsfunktion um σ_0 in den Ursprung verschoben, um die hochfrequente Oszillation unter der Modulationsfunktion zu unterdrücken, und anschließend fouriertransformiert. Da die Modulationsfunktion im Realteil achsensymmetrisch und im Imaginärteil punktsymmetrisch ist, tragen nach der Entwicklung die Polynomkoeffizienten gerader Ordnung zum Realteil und die ungerader Ordnung zum Imaginärteil bei. Die Begrenzung des Interferogramms führt zu einer Multiplikation der Modulationsfunktion mit einer Rechteckfunktion von $-\Lambda$ bis $+\Lambda$ entsprechend

$$M_{\sigma_0}(x) = \text{RECT}\left[\frac{x}{2\Lambda}\right] \mathbf{FT}^+ [I^*(\sigma)] = \text{RECT}\left[\frac{x}{2\Lambda}\right] \sum_{j=0}^{j_{\max}} i^{j \text{mod} 2} a_j(\sigma_0) x^j . \quad (138)$$

Sowohl der Real-, als auch der Imaginärteil der Modulationsfunktion lassen sich üblicherweise durch ein Polynom bis maximal 12. Grades darstellen. Die Apparatefunktion ergibt sich nun durch Fouriertransformation, wobei die Kummerfunktionen (KUM) verwendet werden:

$$\begin{aligned} \text{ILS}(\sigma) &= \frac{1}{2\Lambda} \sum_{j=0}^{j_{\max}} a_j(\sigma_0) \mathbf{FT}^- \left[i^{j \text{mod} 2} x^j \text{RECT}\left[\frac{x}{2\Lambda}\right] \right] \\ &= \sum_{j=0}^{j_{\max}} a_j(\sigma_0) \frac{\Lambda^j}{j+1} \text{Re} \left[(-i)^{j \text{mod} 2} \text{KUM}(j+l; j+2; -i2\pi\sigma\Lambda) \right] . \end{aligned} \quad (139)$$

Die Kummerfunktionen und deren Reihenentwicklung sind im Anhang 11.4 dargestellt. Für das jeweilige Experiment und dessen spezifischer Auflösung bietet es sich an, die Kummerfunktionen zu tabellieren. Da die Modulationsfunktion $M_{\sigma_0}(x)$ von $a_j(\sigma_0)$ wellenzahlabhängig ist, gilt gleiches auch für die Koeffizienten $a_j(\sigma_0)$. Es hat sich gezeigt, daß die Koeffizienten nur leicht mit der Wellenzahl variieren und selbst als Polynom zweiter Ordnung darstellbar sind. Um das Apparateprofil vollständig über dem gesamten Spektralbereich eines Kanals, d.h. einer spezifischen Gesichtsfeldverteilung, bestimmen zu können, wird also nur ein Satz von Polynomen $a_j(\sigma_0) = a_{j,0} + a_{j,1}\sigma_0 + a_{j,2}\sigma_0^2$ angegeben.

Abschließend sei noch erwähnt, daß die Kummerfunktionen in mathematischen Programmbibliotheken häufig vertreten sind und somit leicht angewendet werden können.

8.6 Bemerkungen zum Modell des Apparateprofils

Das hier vorgestellte Modell bestimmt aus zwei Schnitten das vollständige Gesichtsfeld. Die dabei notwendige Interpolation ist ein Versuch, das Gesichtsfeld möglichst realitätsnah abzubilden. Es wäre hilfreich, wenn in Zukunft mehr Schnitte gemessen würden, um somit das Gesichtsfeld präziser zu bestimmen. Dabei sollte die Verschmierung an den Kanten der Gesichtsfeldblende minimiert werden, da die Gesichtsfeldanteile proportional ihres Abstandsquadrats von der Strahlachse zur Verbreiterung des Apparateprofils beitragen. Die Verschmierung kann durch Abbilden der IR-Quelle auf einen ausreichend kleinen Meßpunkt reduziert werden. Bei einer Gesichtsfeldblende von 5 mm Radius sollte der Radius des Meßpunkts nicht mehr als 0,5 mm betragen. Mit der Verbesserung der Beschreibung des Gesichtsfelds steigt sich auch die Genauigkeit des Modells zum Apparateprofil. Das Modell kann ebenso bei Modulationsfunktionen angewandt werden, die nicht nur durch die maximale optische Wegdifferenz Δ und das Gesichtsfeld definiert sind, sondern in denen Justierungsfehler, Oberflächenunebenheiten der optischen Komponenten, Spiegelverkippungen, etc. Berücksichtigung finden. Als Beispiel seien die Untersuchungen zum MIPAS-Satellitenexperiment genannt, die einen detaillierten Satz von Effekten aufführen, die Einfluß auf das Apparateprofil ausüben. Im Gegensatz zu den Modellen, die auf theoretischen Gesichtsfeldverteilungen beruhen, bietet das hier vorgestellte Modell ein realitätsnäheres Abbild des zu erwartenden Apparateprofils, da es reale Gesichtsfeldmessungen zugrunde legt.

Wie in Abschnitt 8.2 bereits erwähnt, stimmen die so modellierten Apparateprofilfunktionen mit den gemessenen Apparateprofilen derart überein, daß die angesprochenen Störungen nicht einzeln quantifizierbar sind. Umgekehrt kann das Modellergebnis in Form des Apparateprofils oder der Modulationsfunktion als Referenz und zur Charakterisierung der Justierung dienen. Die Modulationsfunktion eignet sich hierfür, da sie am Ende des Interferogramms sehr empfindlich auf hochaufgelöste Fehler reagiert.

9 Schlußbemerkungen

Nachdem nun der Weg vom Interferogramm zum kalibrierten Spektrum eingehend dargestellt wurde und die dazu notwendigen Schritte charakterisiert wurden, soll im folgenden ein kurzes Resümee gezogen werden.

Das Verhalten eines Interferometers bezüglich der Phasenlagen der unterschiedlichen Quellen ist verstanden worden. Damit konnte eine sichere Methode zur Phasenbestimmung etabliert werden, die den Fehler des endgültigen kalibrierten Spektrums aufgrund von Phasenbestimmungsfehlern auf die Größenordnung des Photonenrauschens selbst oder geringer reduziert. Interessant ist vor allem, daß für jedes individuelle Spektrum die Qualität der Phasenbestimmung angegeben werden kann und somit ein Mittel zur Qualitätssicherung bereitgestellt wurde. Von daher sollten für dieses Experiment die Fragen zur Phasenbestimmung gelöst sein, ohne damit ausdrücken zu wollen, daß die Phasenproblematik für andere Experimente keine neuen Fragen aufwerfen wird.

Mit Hilfe des in dieser Arbeit entwickelten radiometrischen Modells konnten unverstandene Linien in Schwarzkörperspektren erklärt und zu einem großen Teil während der Kalibrierung eliminiert werden. Das radiometrische Modell soll als Grundlage dienen, um das Instrument bezüglich seiner optischen Komponenten und seines Temperaturverhaltens besser verstehen und darauf aufbauend ein verfeinertes Modell entwickeln zu können. Hierfür ist jedoch noch viel Laborarbeit nötig, um die dazu nötigen Größen zu quantifizieren. An dieser Stelle sollte nochmals wiederholt werden, daß während des operationellen Betriebs des Experiments größter Wert auf eine isotherme Temperaturverteilung im Instrument gelegt und auf eine Eliminierung spektroskopisch störender Gase geachtet werden sollte.

Nach der radiometrischen Charakterisierung soll noch die spektroskopische Charakterisierung erwähnt werden. Zu diesem Thema existiert bereits eine breite Literaturpalette. Neben den vielen Modellen, die Apparatefunktion zu charakterisieren, muß sie jedoch für jedes Instrument experimentell und individuell erfolgen. Dann ist es aber auch wichtig, diese entsprechend parametrisieren zu können, damit diese Information den weiteren Verarbeitungsschritten zugänglich gemacht werden kann. Das dargestellte Verfahren ermöglicht, auch asymmetrische Apparateprofile zu beschreiben.

Nicht diskutiert wurde der Einfluß der Justierung auf das Verhalten des Interferometers. Hierzu existiert schon eine Vielzahl von Untersuchungen und Veröffentlichungen. Der Einfluß den die Justierung auf die Spektren ausübt sollte aber spezifisch für jedes Interferometer untersucht werden, so daß diesbezüglich noch interessante Arbeiten ausstehen.

Zum Schluß sei noch kurz auf die Datenverarbeitung eingegangen. Bei diesen vielen beschriebenen Einzelprozessen fallen eine große Menge unterschiedlicher Zwischenprodukte an. Zum Verifizieren des Auswertungsprozesses ist es nötig, diese Zwischenprodukte zu verwahren oder deren Erzeugung genau zu dokumentieren. Dazu gehört zum einen die Parametrisierung der Prozesse und zum anderen das Auflisten der Quelldaten. Da diese Quelldaten wiederum Zwischenprodukte darstellen können, muß gewährleistet sein, daß nur solche Produkte entfernt werden können, die für keinen Prozeß eine Eingangsgröße darstellen oder die exakt wieder rekonstruiert werden können. Dies stellt einen erheblichen

Verwaltungsaufwand dar, der sich sinnvollerweise am besten in einer Datenbank realisieren lässt, die die erforderlichen Abhängigkeiten selbständig überprüfen und die Prozeßparametrisierungen zuordnen kann [Trieschmann et al.,1997]. Für das MIPAS-B2 Experiment wurde hierfür ein entsprechendes Datenmodell entwickelt [Kapetanios et al.,1996] und auf einem relationalen Datenbanksystem implementiert [Lorenz, Trieschmann,1995]. Aufbauend auf dieses Datenhaltungssystem konnten die erforderlichen Programme entwickelt werden, die zur Berechnung und Visualisierung der Spektren notwendig sind. Hilfreich ist dabei die einheitliche Datenschnittstelle, die ein relationales Datenbanksystem anbietet.

10 Literaturverzeichnis

[Abramowitz,Stegun,1965]

Abramowitz,M., Stegun,I., *Handbook of Mathematical Functions with formulas, graphs and mathematical tables*, Dover Publications Inc., New York, 1987

[Brault,1990]

Brault,J.-W., *Fourier Transform Spectroscopy*, National Solar Observatory, Tucson, Arizona, 1990

[Bronstein,Semendjajew,1981]

Bronstein,I., Semendjajew,K., *Taschenbuch der Mathematik*, Teubner Verlagsgesellschaft, Leipzig, 1981

[Blom et al.,1996]

Blom,C.E., Höpfner,M., Weddigen,Ch., *Correction of phase anomalies of atmospheric emission spectra by the double-differencing method*, Applied Optics, 35 (1996), 2649-2652

[Burkert et al.,1983]

Burkert,P., Fergg,F., Fischer,H., *A compact high resolution Michelson interferometer for passive atmospheric sounding (MIPAS)*, IEEE Trans. Geosci. Remote Sensing GE-21,345, 1983

[Camy-Peret,1999]

Camy-Peret,C., Persönliche Mitteilung

[Chamberlain,1979]

Chamberlain, *The Principles of Interferometric Spectroscopy*, Hrsg. G.W. Chantry und N.W.B. Stone, John Wiley & Sons, Chichester, 1979

[Champeney,1973]

Champeney,D.C., *Fourier Transforms and their Physical Application*, Academic Press Inc., New York, 1973

[v. Clarmann,1994]

v. Clarmann,T., *RAT: A computational tool for the retrieval of atmospheric trace gas profiles from infrared spectra*, Rep. KfK 5423, Kernforschungszentrum Karlsruhe GmbH, Karlsruhe, Germany, 1994.

[v. Clarmann et al.,1997]

v. Clarmann,T., Wetzel,G., Oelhaf,H., Friedl-Vallon,F., Linden,A., Maucher,G., Seefeldner,M., Trieschmann,O., Lefèvre,F., *ClONO₂ vertical profile and estimated mixing ratios of ClO and HOCl in the winter Arctic stratosphere from MIPAS limb emission spectra*, J. Geophys. Res.,102, 16157-16168, 1997.

[Clough et al.,1986]

Clough,S. A., Kneizys,F. X., Shettle,E. P., Anderson, G. P., *Atmospheric radiance and transmittance: FASCOD2*, Proceedings of the 6th Conference on Atmospheric Radiation, May 1986, p. 141, Am. Meteorol. Soc., Boston, Mass., 1986.

[Connes,1961]

Connes,J., *Recherches sur la spetroscopie par transformation de fourier*, Revue d'Optique, Année 40, No. 2, Februar 1961

[Despain,Bell,1970]

Despain,A.M., Bell,J.W., *Increased Spectral Resolution from Fixed Length Interferograms*, Aspen Intern. Conf. On Fourier Spectroscopy 1970, AFCRL-71-0019, Special Reports No. 114, 1971

[Echle et al.,1994]

Echle,G., Oelhaf,H., Wegner,A., *On the potential of IR limb emission spectroscopy for the measurement of the stratospheric composition*, J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer, 52, 253-265, 1994

[Fellgett,1951]

Felgett,P.B., Thesis, University of Cambridge, 1951

[Filler,1964]

Filler,A.S., *Apodization and Interpolation in Fourier-Transform Spectroscopy*, Journ. of the Optical Society of America, Vol. 54, No. 6, S. 762 ff., June 1964

- [Fischer et al.,1983]
Fischer,H., Fergg,F., Oelhaf,H., Rabus,D., Völker,W., *Simultaneous Detection of Trace Constituents in the Middle Atmosphere with a small He-cooled, High Resolution Michelson Interferometer (MIPAS)*, Beitrag Phys. Atmosph., Vol. 56, No.2, Page 260-275, 1983
- [Fischer,Oelhaf,1996]
Fischer,H., Oelhaf,H., *Remote Sensing of vertical profiles of atmospheric trace constituents with MIPAS limb emission spectrometers*, Applied Optics, Vol. 35, Page 2787-2796, 1996
- [Forman et al.,1966]
Forman,M.L., Steel,W.H., Vanasse,G., *Correction of Asymmetric Interferograms Obtained in Fourier Spectroscopy*, Journ. of the Optical Society of America, Vol. 56, No. 1, Page 59-63, January 1966
- [Friedl-Vallon,1998]
Friedl-Vallon,F., *Messungen der Gesichtsfeldes von MIPAS-B2*, Persönliche Mitteilung
- [Friedl-Vallon et al.,1999]
Friedl-Vallon,F., Maucher,G., Oelhaf,H., Trieschmann,O., Wetzel,G., Fischer,H., *The balloon-borne Michelson interferometer for passive atmospheric sounding (MIPAS-B2). Instrument and results*, Larer, A.M. [Hrsg.], Optical Spectroscopic Techniques and Instrumentation for Atmospheric and Space Research III: Proc. of SPIE's 44th Annual Meeting, Denver, Colorado, July 19-21, 1999, SPIE Proceedings Series 3756, S. 9-16, Bellingham, Washington, 1999
- [Friedle,1993]
Friedle,A., *Fehleranalyse der Interferogrammaufnahme des Fourierspektrometers MIPAS-LM*, Diplomarbeit im Fach Physik, Institut für Meteorologie und Klimaforschung, Universität Karlsruhe, 1993
- [Fritzsche,1998]
Fritzsche,Ch., *Interferenzfeld und Übertragungseigenschaften eines Fourierspektrometers: Theorie, experimentelle Verifikation und Anwendung*, Dissertation der Fakultät für Physik der Ludwigs-Maximilian-Universität München, 1998
- [Gradstein,Rhyzik,1981]
Gradstein,I.S., Rhyzik,I.M., *Summen, Produkt- und Integraltafeln*, Verlag Harri Deutsch, Thun und Frankfurt am Main, 1981
- [Gulde,Trieschmann,1989]
Gulde,T., Trieschmann,O., *Systemanalyse und Weiterentwicklung eines Doppelpendel-Fourierspektrometers zur Messung atmosphärischer Spurengase*, Diplomarbeit im Fach Physik, Institut für Meteorologie und Klimaforschung, Universität Karlsruhe, 1989
- [Hase,1995]
Hase,F., *Messung des Apparateprofils eines hochauflösenden FTIR-Spektrometers*, Diplomarbeit im Fach Physik, Institut für Meteorologie und Klimaforschung, Universität Karlsruhe, 1995
- [Hase et al.,1999]
Hase,F., Blumenstock,T., Paton-Walsh,C., *Analysis of the instrumental line shape of high-resolution Fourier transform IR spectrometers with gas cell measurements and new retrieval*, Applied Optics, Vol. 38, No. 15, Page 3417-3422, 1999
- [Hernandez,1986]
Hernández,G., *Fabry-Perot Interferometers*, Cambridge Studies in Modern Optics, Vol.3, Press syndicate of the University of Cambridge, Cambridge, England, 1986
- [Hecht,1989]
Hecht,E., *Optik*, Addison-Wesley, Bonn, 1989
- [Höpfner,1994]
Höpfner,M., *Das flugzeuggetragene Fernerkundungsexperiment MIPAS-FT: Auswertung und Interpretation der arktischen Meßkampagnen 1991/92 und 1992/93*, Dissertation der Fakultät für Physik des Institut für Meteorologie und Klimaforschung, Universität Karlsruhe und Kernforschungszentrum Karlsruhe, Rep. KfK 5438, Kernforschungszentrum Karlsruhe GmbH, Karlsruhe, Germany, 1994

[Höpfner et al.,1998]

Hoepfner,M., v. Clarmann,T., Echle,G., Funke,B., Glatthor,N., Hase,F., Kemnitzer,H., Kuntz,M., Stiller,G.P., Zorn,S., *The Karlsruhe optimized and precise radiative transfer algorithm (KOPRA)*. 21st Annual Review Conf.of Atmospheric Transmission Models, Hanscom, Mass., June 8-11, 1998

[Jaqueinot,1954]

Jaqueinot,P., *Journal of the Optical Society of America*, 44, 761, 1954

[Kapetanios et al.,1996]

Kapetanios,E., Schneider,L., Trieschmann,O., *A conceptual framework for the definition and implementation of a metadata (knowledge) base for atmospheric research*, 1st IEEE Metadata Conf., Silver Spring, Md., April 16-18, 1996,
<http://www.computer.org/conferen/meta96/nondas/IEEE-metadata-paper.html>

[Keyes,1980]

Keyes,R.J., *Optical and Infrared Detectors*, Topics in applied physics, Vol. 19, 2nd and updated Edition, Springer-Verlag, Berlin, 1980

[Kleinert,1998]

Kleinert,A., *Charakterisierung des IR-Detektorsystems der MIPAS-Emissionsexperimente*, Diplomarbeit im Fach Physik, Institut für Meteorologie und Klimaforschung, Universität Karlsruhe, 1998

[Kohlrausch,1996]

Kohlrausch, *Praktische Physik*, 24. Auflage, B.G.Teubner Verlag, Stuttgart, 1996

[Lengel et al.,1998]

Lengel,A., Hase,F., Höpfner,M., Trieschmann,O., *Multiline deconvolution of MIPAS-B2 high altitude spectra as a method to characterize its ILS*, 8th int. Workshop on Atmospheric Science from Space using Fourier Transform Spectroscopy, Meteo-France,Toulouse,1998

[Lohrengel,Hohn,1990]

Lohrengel,J., Hohn,R., *Gesamtemissionsgrad von zwei neuartigen schwarzen Beschichtungen*, PTB-Mitteilungen 100 5/90, Physikalisch Technische Bundesanstalt, Braunschweig, 1990

[Lorenz,Trieschmann,1995]

Lorenz,H.P., Trieschmann,O., *Hoch hinaus. Auswertung und Erfassung von Stratosphärenmessungen mit Interbase*, IX Multiuser-Multitasking Magazine, 11(1995) S.130-39

[Maucher,1999]

Maucher,G., *Das Sternreferenzsystem von MIPAS-B2: Sichtlinien-Bestimmung für ein ballongetragenes Spektrometer zur Fernerkundung atmosphärischer Spurengase*, Dissertation der Fakultät für Physik des Institut für Meteorologie und Klimaforschung, Universität Karlsruhe und Kernforschungszentrum Karlsruhe, Rep. FZKA 6227, Forschungszentrum Karlsruhe GmbH, Karlsruhe, Germany, 1999.

[Mertz,1965]

Mertz,L., *Transformations in optics*, Wiley, New York, 1965

[Michelson,1902]

Michelson,A. A., *Light Waves and Their Uses*, Univ. Of Chicago Press, 1902

[Mildenberger,1986]

Mildenberger,O., *Grundlagen der statistischen Systemtheorie*, Verlag Harri Deutsch, Frankfurt am Main, 1986

[Molina,Rowland,1974]

Molina,M.J., Rowland,F.S., *Stratospheric sink for chlorofluoromethanes: chlorine atom-catalyzed destruction of ozone*, Nature 249, 810-812, 1974

[Möller,1973]

Möller,F., *Einführung in die Meteorologie*, BI Hochschultaschenbücher, Band 276, Bibliographisches Institut AG, Mannheim, 1973

- [Norton,Beer,1976]
Norton,R.H., Beer,R., New Apodization functions for Fourier Spectroscopy, Journ. of the Optical Society of America, Vol. 66, No. 3, S. 259-264, June 1976
- Norton,R.H., Beer,R., Erratum to New Apodization functions for Fourier Spectroscopy, Journ. of the Optical Society of America, Vol. 67, No. 3, S. 419, March 1977**
- [Oelhaf et al.,1996]
Oelhaf,H., Wetzel,G., Clarmann,T.von, Schmidt,M., Renard,J.B., Pirre,M., Lateltin,E., Aimedieu,P., Phillips,C., Goutail,F., Pommereau,J.P., Kondo,Y., Sugita,T., Nakajima,H., Koike,M., Williams,W.J., Murcay,F.J., Sullivan,P., Engel,A., Schmidt,U., Lee,A.M., Correlative balloon measurements of the vertical distribution of N_2O , NO , NO_2 , NO_3 , HNO_3 , N_2O_5 , $ClONO_2$ and total reactive NO_x inside the polar vortex during SESAME, Pyle, J.A. [Hrsg.] Polar Stratospheric Ozone : Proc.of the 3rd European Workshop, Schliersee, September 18-22, 1995 Luxembourg : Office for Official Publications of the European Communities, 1996 S.187-92 (Air Pollution Research Report ; 56)
- [Parshin,1962]
Parshin,P.F., Apodization in Fourier spectroscopy, Optics and Spectroscopy, Nat. Bureau of Standards, Washington, Vol. 13, S. 418-421, 1962
- [Press et al.,1986]
Press,W.H., Flannery,B.P., Teukolsky,S.A., Vetterling,W.T., Numerical Recipes, Cambridge University Press, 1986
- [Revercomb et al.,1988]
Revercomb,H.E., Buijs,H., Howell,H.B., LaPorte,D.D., Smith,W.L., Sromovsky,L., Radiometric calibration of IR Fourier transform spectrometers: solution to a problem with the High-Resolution Interferometer Sounder, Applied Optics, Vol. 27, No. 15, 3210-3218, 1988
- [Rutten,1999]
Rutten, J.R., Radiative Transfer in Stellar Atmospheres, Sterrekundig Instituut Utrecht, Holland, 1999, <http://www.fys.ruu.nl/~rutten>
- [Schneider,1994]
Schneider, Ludwig Messtechnik GmbH, DKD Zertifikat zu Pt100-Kalibrierungsmessungen, 1994
- [Seefeldner et al.,1995]
Seefeldner,M., Keim,C., The pointing and the star reference system of the MIPAS-B2 gondola, Part 1: the pointing system, Proc. of the 12th ESA Symposium on Rocket & Balloon Programes and Related Research, Lillehammer, Norway, May 29 – June 1, 1995, ESA SP-370 (September 95) S. 505-510
- [Stowasser,1999]
Stowasser,M., persönliche Mitteilung
- [Stewart,1968]
Stewart,J.E., Field of View and Resolution of a Polarization Fourier Spectrometer, Journal of the Optical Society of America, Lancaster, Vol. 58, S. 434, 1968
- [Trieschmann,Friedl-Vallon,1998]
Trieschmann,O., Friedl-Vallon,F., Parameterisation of MIPAS-B2 non-linearity and calibration scheme, 8th int. Workshop on Atmospheric Science from Space using Fourier Transform Spectroscopy, Meteo-France, Toulouse, 1998
- [Trieschmann et al.,1996]
Trieschmann,O., Kapetanios,E., Lorenz,H.P., A Database Design and Implementation for Scientific Data Related to the MIPAS-Balloon-Spectrometer, In: Lautenschlager,M. and Reinke,M. (ed.): Climate and Environmental Database Systems, Kluwer Academic Publishers, Boston, ISBN-07923-9832-7, S. 57-72, Nov. 1996
- [Trieschmann,Weddigen,1999]
Trieschmann,O., Weddigen,Ch., Thermal Emission from Dielectric Beamsplitters in Michelson Interferometers: A Schematic Analysis, In Vorbereitung
- [Vanasse,Sakai,1967]
Vanasse,G., Sakai,H., Progress in Optics: Fourier Spectroscopy, Edited by E.Wolf, North Holland Publishing Company, Amsterdam, Vol. 6, S. 261, 1967

[Walraven,1984]

Walraven,R., *Digital Filters*, Proceedings of the Digital Equipment User's Society, Fall, 1984, Department of Applied Science, University of California, Davis, CA 95616, 1984

[Weddigen et al.,1993]

Weddigen,Ch., Blom,C.E., Höpfner,M., *Phase correction for the emission sounder MIPAS-FT*, Applied Optics, Vol. 32, Nr. 24, 4586-4589, August 1993

[Wetzel et al.,1995]

Wetzel,G., Clarmann,T.von, Oelhaf,H., Fischer,H., *Vertical profiles of N₂O₅ along with CH₄, N₂O, and H₂O in the late Arctic winter retrieved from MIPAS-B infrared limb emission measurements*, J. Geophys. Res., 100, 23173-23181, 1995

[Wetzel et al.,1997]

Wetzel,G., Oelhaf,H., Clarmann,T.von, Fischer,H., Friedl-Vallon,F., Maucher,G., Seefeldner,M., Trieschmann,O., Lefèvre,F., *Vertical profiles of N₂O₅, HO₂NO₂, and NO₂ inside the Arctic vortex, retrieved from nocturnal MIPAS-B2 infrared limb emission measurements in February 1995*, J. Geophys. Res., 102, 19177-19186, 1997

[Wetzel,1999]

Wetzel,G., persönliche Mitteilung

[Zachor,1977]

Zachor,A. S., *Drive nonlinearities: their effects in Fourier spectroscopy*, Applied Optics, Vol. 16, Nr. 5, S. 1412-1424, Mai 1977

11 Anhang

11.1 Das Strahlteilerdiagramm

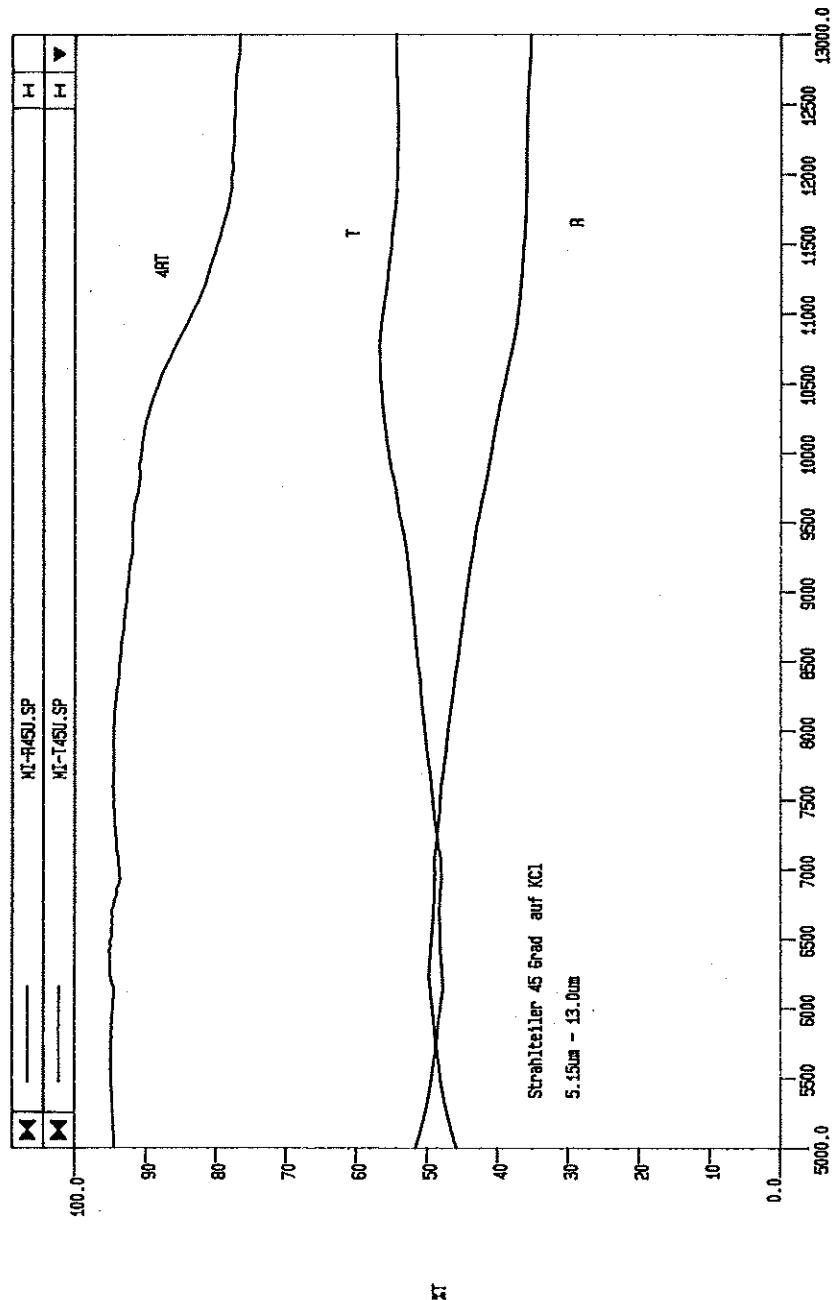


Abb. 63 Transmissions- (T) und Reflexionsverhalten (R) des Strahlteilers von MIPAS-B2.
Die Größe 4RT gibt die Modulationsfähigkeit des Strahlteilers an. Bei einem Interferometer wirkt diese vergleichbar einem Filter auf das Spektrum.

11.2 Das Bestimmen der Geradengleichung für die statistische Phasenbestimmung

11.2.1 Das Nullsetzen der Korrelation

Entsprechend den Ausführungen in Abschnitt 5.4 wird zum Nullsetzen der Korrelation nur der Achsenabschnitt a_0 optimiert. Die Steigung a_1 wird gleich 0 gesetzt. Summiert wird in folgenden Gleichungen über alle Stützstellen i des Spektrums.

$$\begin{aligned}\mu &= \sum_i [\operatorname{Re}(S^{\text{HP}}(\sigma_i)) - a_0 \operatorname{Im}(S^{\text{HP}}(\sigma_i))] [\operatorname{Im}(S^{\text{HP}}(\sigma_i)) + a_0 \operatorname{Re}(S^{\text{HP}}(\sigma_i))] \\ &= \underbrace{\sum_i [\operatorname{Re}(S^{\text{HP}}(\sigma_i)) \operatorname{Im}(S^{\text{HP}}(\sigma_i))]}_{c_1} \\ &\quad + a_0 \underbrace{\sum_i [\operatorname{Re}(S^{\text{HP}}(\sigma_i))^2 - \operatorname{Im}(S^{\text{HP}}(\sigma_i))^2]}_{c_2} \\ &\quad - a_0^2 \underbrace{\sum_i [\operatorname{Re}(S^{\text{HP}}(\sigma_i)) \operatorname{Im}(S^{\text{HP}}(\sigma_i))]}_{c_1}\end{aligned}\tag{140}$$

Es ergeben sich zwei Lösungen für a_0 , von denen die betragskleinere verwendet wird:

$$a_0 = \min \left[\frac{1}{2} \frac{c_2}{c_1} \mp \sqrt{1 + \left(\frac{1}{2} \frac{c_2}{c_1} \right)^2} \right] \text{ und } a_1 = 0.\tag{141}$$

Fehlerbestimmung des Korrelationsverfahrens

Da der Fehler von a_0 für den Konvergenzfall angegeben werden soll, verschwindet die iterative Änderung von a_0 , d.h. a_0 geht gegen Null; eine Lösung für Gl. (140) wird nur mit der negativen Wurzel und für $c_2 \gg c_1$ gefunden. Der Fehler von a_0 ergibt sich nach dem Fehlerfortpflanzungsgesetz zu

$$(\Delta a_0)^2 = \sum_i \left[\left(\frac{\partial a_0}{\partial \operatorname{Re}(S^{\text{HP}}(\sigma_i))} \Delta \operatorname{Re}(S^{\text{HP}}(\sigma_i)) \right)^2 + \left(\frac{\partial a_0}{\partial \operatorname{Im}(S^{\text{HP}}(\sigma_i))} \Delta \operatorname{Im}(S^{\text{HP}}(\sigma_i)) \right)^2 \right],\tag{142}$$

wobei die Beziehung aus Gl. (81) gilt, so daß sich

$$(\Delta a_0)^2 = (\Delta S^{\text{HP}})^2 \sum_i \left[\left(\frac{\partial a_0}{\partial c_1} \frac{\partial c_1}{\partial \operatorname{Re}(S^{\text{HP}}(\sigma_i))} + \frac{\partial a_0}{\partial c_2} \frac{\partial c_2}{\partial \operatorname{Re}(S^{\text{HP}}(\sigma_i))} \right)^2 + \left(\frac{\partial a_0}{\partial c_1} \frac{\partial c_1}{\partial \operatorname{Im}(S^{\text{HP}}(\sigma_i))} + \frac{\partial a_0}{\partial c_2} \frac{\partial c_2}{\partial \operatorname{Im}(S^{\text{HP}}(\sigma_i))} \right)^2 \right].\tag{143}$$

ergibt.

Mit den partiellen Ableitungen $\frac{\partial a_0}{\partial c_1} \geq -\frac{2}{c_2}$ und $\frac{\partial a_0}{\partial c_2} \leq -\frac{2c_1}{c_2}$, die die Entwicklung der Wurzel ausnutzen³², und den partiellen Ableitungen nach dem Real- und Imaginärteil, die sich direkt ergeben, kann der Fehler des Achsenabschnitts wie

$$(\Delta a_0)^2 = (2\Delta S^{HP})^2 \sum_i \left[\frac{1}{c_2^2} + \underbrace{\frac{4c_1^2}{c_2^4}}_{\text{vernachlässigbar}} \right] \underbrace{[\operatorname{Re}(S^{HP}(\sigma_i))^2 + \operatorname{Im}(S^{HP}(\sigma_i))^2]}_{d_1} \quad (144)$$

beschrieben werden. Mit der Vernachlässigung des Bruchs reduziert sich der Fehler auf

$$(\Delta a_0)^2 = \left(\frac{2\Delta S^{HP}}{c_2} \right)^2 d_1 \quad (145)$$

11.2.2 Minimierung der vierten Potenz κ

Die vierte Potenz des Imaginärteils vom hochpaßgefilterten Spektrum

$$\kappa = \sum_i [\operatorname{Im}(S^{HP}(\sigma_i)) + a_0 \operatorname{Re}(S^{HP}(\sigma_i)) + a_1 \Delta \sigma_i \operatorname{Re}(S^{HP}(\sigma_i))]^4 \quad (146)$$

wird ausgeschrieben und nach den quadratischen Termen von a_0 und a_1 abgebrochen:

$$\kappa = \sum_i \left[\begin{aligned} & \operatorname{Im}(S^{HP}(\sigma_i))^4 + 4a_0 \operatorname{Im}(S^{HP}(\sigma_i))^3 \operatorname{Re}(S^{HP}(\sigma_i)) \\ & + 4a_1 \Delta \sigma_i \operatorname{Im}(S^{HP}(\sigma_i))^3 \operatorname{Re}(S^{HP}(\sigma_i)) \\ & + 6a_0^2 \operatorname{Im}(S^{HP}(\sigma_i))^2 \operatorname{Re}(S^{HP}(\sigma_i))^2 \\ & + 6a_1^2 \Delta \sigma_i^2 \operatorname{Im}(S^{HP}(\sigma_i))^2 \operatorname{Re}(S^{HP}(\sigma_i))^2 \\ & + 12a_0 a_1 \Delta \sigma_i \operatorname{Im}(S^{HP}(\sigma_i))^2 \operatorname{Re}(S^{HP}(\sigma_i))^2 + \dots \end{aligned} \right]. \quad (147)$$

Die Minimierung erfolgt durch Finden der lokalen Minima mit

$$d\kappa = 0 \Rightarrow \frac{\partial \kappa}{\partial a_0} = \frac{\partial \kappa}{\partial a_1} = 0 \quad (148)$$

und aufgelöst:

³² Die Entwicklung der Wurzel lautet $\sqrt{1 + \left(\frac{c_2}{2c_1}\right)^2} \approx \frac{c_2}{2c_1} \left(1 + \frac{1}{2} \left(\frac{c_2}{2c_1}\right)^2\right)$.

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial \kappa}{\partial a_0} &= \underbrace{\sum_i 4 \operatorname{Im}(S^{\text{HP}}(\sigma_i))^3 \operatorname{Re}(S^{\text{HP}}(\sigma_i))}_{c_3} + a_0 \underbrace{\sum_i 12 \operatorname{Im}(S^{\text{HP}}(\sigma_i))^2 \operatorname{Re}(S^{\text{HP}}(\sigma_i))^2}_{c_5} \\
 &\quad + a_1 \underbrace{\sum_i 12 \Delta \sigma_i \operatorname{Im}(S^{\text{HP}}(\sigma_i))^2 \operatorname{Re}(S^{\text{HP}}(\sigma_i))^2}_{c_6} = 0 \\
 \frac{\partial \kappa}{\partial a_1} &= \underbrace{\sum_i 4 \Delta \sigma_i \operatorname{Im}(S^{\text{HP}}(\sigma_i))^3 \operatorname{Re}(S^{\text{HP}}(\sigma_i))}_{c_4} \\
 &\quad + a_0 \underbrace{\sum_i 12 \Delta \sigma_i \operatorname{Im}(S^{\text{HP}}(\sigma_i))^2 \operatorname{Re}(S^{\text{HP}}(\sigma_i))^2}_{c_6} \\
 &\quad + a_1 \underbrace{\sum_i 12 \Delta \sigma_i^2 \operatorname{Im}(S^{\text{HP}}(\sigma_i))^2 \operatorname{Re}(S^{\text{HP}}(\sigma_i))^2}_{c_7} = 0
 \end{aligned} \tag{149}$$

Die Lösung für a_0 und a_1 ergibt sich durch Lösen des Gleichungssystems

$$\begin{aligned}
 c_3 + a_0 c_5 + a_1 c_6 &= 0 \\
 c_4 + a_0 c_6 + a_1 c_7 &= 0
 \end{aligned} \tag{150}$$

zu

$$a_0 = \frac{c_3 c_7 - c_4 c_6}{c_6^2 - c_5 c_7} \quad \text{und} \quad a_1 = \frac{c_4 c_5 - c_3 c_6}{c_6^2 - c_5 c_7} \tag{151}$$

Fehlerbestimmung bei der Minimierung

Da wieder der Fehler für a_0 und dieses Mal auch für a_1 im Konvergenzfall angegeben werden soll, sind a_0 und a_1 klein. Das bedeutet mit Gl. (149) und (150), daß c_3 und c_4 klein gegenüber c_5 bis c_7 sein müssen. Beim Lösen von

$$(\Delta a_x)^2 = \sum_i \left[\left(\frac{\partial a_x}{\partial \operatorname{Re}(S^{\text{HP}}(\sigma_i))} \Delta \operatorname{Re}(S^{\text{HP}}(\sigma_i)) \right)^2 + \left(\frac{\partial a_x}{\partial \operatorname{Im}(S^{\text{HP}}(\sigma_i))} \Delta \operatorname{Im}(S^{\text{HP}}(\sigma_i)) \right)^2 \right], \tag{152}$$

bleiben dann nur

$$(\Delta a_x)^2 = (\Delta S^{\text{HP}})^2 \sum_i \left[\left(\frac{\partial a_x}{\partial c_3} \frac{\partial c_3}{\partial \operatorname{Re}(S^{\text{HP}}(\sigma_i))} + \frac{\partial a_x}{\partial c_4} \frac{\partial c_4}{\partial \operatorname{Re}(S^{\text{HP}}(\sigma_i))} \right)^2 + \left(\frac{\partial a_x}{\partial c_3} \frac{\partial c_3}{\partial \operatorname{Im}(S^{\text{HP}}(\sigma_i))} + \frac{\partial a_x}{\partial c_4} \frac{\partial c_4}{\partial \operatorname{Im}(S^{\text{HP}}(\sigma_i))} \right)^2 \right] \tag{153}$$

als bedeutende Terme übrig. Damit löst sich Δa_0 und Δa_1 entsprechend

$$\begin{aligned} (\Delta a_0)^2 &= \left(\frac{4\Delta S^{\text{HP}}}{c_6^2 - c_5 c_7} \right)^2 \left[c_6^2 d_3 - 2c_6 c_7 d_4 + c_5^2 d_5 \right] \\ (\Delta a_1)^2 &= \left(\frac{4\Delta S^{\text{HP}}}{c_6^2 - c_5 c_7} \right)^2 \left[c_7^2 d_3 - 2c_5 c_6 d_4 + c_6^2 d_5 \right] \end{aligned} \quad (154)$$

mit

$$\begin{aligned} d_3 &= \sum_i \left[\text{Im}(S^{\text{HP}}(\sigma_i))^4 \left(9 \text{Re}(S^{\text{HP}}(\sigma_i))^2 + \text{Im}(S^{\text{HP}}(\sigma_i))^2 \right) \right] \\ d_4 &= \sum_i \left[\Delta \sigma_i \text{Im}(S^{\text{HP}}(\sigma_i))^4 \left(9 \text{Re}(S^{\text{HP}}(\sigma_i))^2 + \text{Im}(S^{\text{HP}}(\sigma_i))^2 \right) \right] \\ d_5 &= \sum_i \left[\Delta \sigma_i^2 \text{Im}(S^{\text{HP}}(\sigma_i))^4 \left(9 \text{Re}(S^{\text{HP}}(\sigma_i))^2 + \text{Im}(S^{\text{HP}}(\sigma_i))^2 \right) \right] \end{aligned} \quad (155)$$

auf (der Ausdruck $\Delta \sigma_i$ entspricht hier nicht einem Fehler, sondern der Abweichung von der Mitte des Spektralbereichs: $\Delta \sigma_i = \sigma_i - \sigma_0$).

Gleichermaßen lässt sich die Auswirkung des Rauschens auf die Phase berechnen. Den Restphasenfehler erhält man mit

$$\begin{aligned} (\Delta \varphi(\sigma))^2 \Big|_{\sigma'} &= \left[\left(\frac{\partial \varphi(\sigma)}{\partial \text{Re}(S^{\text{HP}}(\sigma_i))} \Delta \text{Re}(S^{\text{HP}}(\sigma_i)) \right)^2 \right. \\ &\quad \left. + \left(\frac{\partial \varphi(\sigma)}{\partial \text{Im}(S^{\text{HP}}(\sigma_i))} \Delta \text{Im}(S^{\text{HP}}(\sigma_i)) \right)^2 \right] \\ &= (\Delta S^{\text{HP}})^2 \sum_i \left[\left(\frac{\partial a_0}{\partial \text{Re}(S^{\text{HP}}(\sigma_i))} + \sigma' \frac{\partial a_1}{\partial \text{Re}(S^{\text{HP}}(\sigma_i))} \right)^2 \right. \\ &\quad \left. + \left(\frac{\partial a_0}{\partial \text{Im}(S^{\text{HP}}(\sigma_i))} + \sigma' \frac{\partial a_1}{\partial \text{Im}(S^{\text{HP}}(\sigma_i))} \right)^2 \right] \end{aligned} \quad (156)$$

und konsequentem Ausrechnen zu

$$(\Delta \varphi(\sigma))^2 \Big|_{\sigma'} = \left(\frac{4\Delta S^{\text{HP}}}{c_6^2 - c_5 c_7} \right)^2 \begin{bmatrix} (\sigma' c_6 - c_7)^2 d_3 \\ -2(\sigma' c_6 - c_7)(\sigma' c_5 - c_6)d_4 \\ +(\sigma' c_5 - c_6)^2 d_5 \end{bmatrix}. \quad (157)$$

11.2.3 Konvergenzergebnisse der statistischen Phasenbestimmung

Für die unterschiedlichen Elevationswinkel $+20^\circ$ (Weltraumspektren), $-0,71^\circ$ und $-5,52^\circ$ sind in Abb. 64 die Entwicklungen der Phasenparameter a_0 und a_1 über die Iterationen aufgetragen.

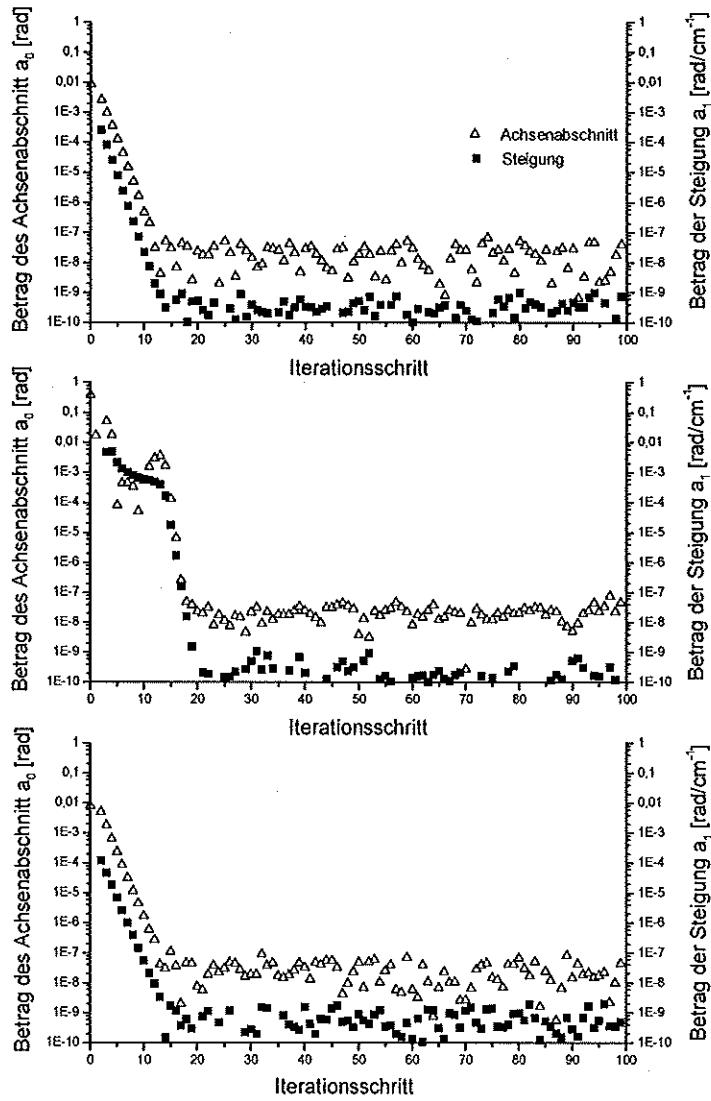


Abb. 64 Entwicklung der statistischen Phasenbestimmung für den 3. Kanal vom 8.5.1998 bzgl. der Parameter $a_{0,m}$ und $a_{1,m}$ während der Iteration.

Deutlich ist wieder die Konvergenz der Parameter mit den Iterationsschritten zu sehen, die nach 20 Iterationsschritten abgeschlossen ist.

	+20,0°	-0,71°	-5,52°
Fehler im konvergenten Zustand aus Einzelspektren			
Δa_0	$4,0 \cdot 10^{-2}$	$1,1 \cdot 10^{-2}$	$3,8 \cdot 10^{-2}$
Δa_1	$8,0 \cdot 10^{-4}$	$2,3 \cdot 10^{-4}$	$6,4 \cdot 10^{-4}$
Fehler im konvergenten Zustand aus der Variation von a_0 und a_1 über eine Sequenz von Spektren			
Δa_0	$1,6 \cdot 10^{-2}$	$2,1 \cdot 10^{-2}$	$1,1 \cdot 10^{-2}$
Δa_1	$3,4 \cdot 10^{-4}$	$2,1 \cdot 10^{-4}$	$3,6 \cdot 10^{-4}$

Tab. 7 Zusammenstellung der Fehlerbeiträge der statistischen Phasenbestimmung einer Einzelmessung des dritten Kanals am 8.5.1998.

Die Auflistung (Tab. 7) der Restfehler, die aus den Einzelspektren nach Gl. (154) gewonnen wurden, sind wie in Abschnitt 5.7 eine konservative Angabe im Vergleich zu den Variationen, die sich aus der Parameterbestimmung unterschiedlicher Spektren der gleichen Sequenz ergaben.

11.3 Die Strahlungsübertragungsgleichung

Die Strahlungsübertragungsgleichung ergibt sich aus der Kontinuitätsbetrachtung (z.B. [Rutten,1999]) über den Weg s:

$$\frac{dL_\sigma}{ds} = (B_\sigma(T,s) - L_\sigma) \sum_g \xi_{\sigma,g} m_s \quad (158)$$

mit der Lösung

$$L_\sigma(D) = L_\sigma(0) * e^{-t_\sigma(D)} + \int_0^{t_\sigma(D)} B_\sigma(T(s)) * e^{-(t_\sigma(D)-t)} dt \quad , \quad (159)$$

wobei $t_\sigma(D) = \int_0^D ds \sum_g \xi_{\sigma,g} m_s$

- und $\xi_{\sigma,g}$ der monochromatische Massenabsorptionskoeffizient des Gases g,
 $\tilde{\tau}_\sigma(D)$ die monochromatische optische Dicke,
 $T(s)$ die Temperatur an der Stelle s,
 $B_\sigma(T(s))$ die spektrale Strahldichte eines schwarzen Körpers (Planckfunktion),
 D die Gesamtdicke des Mediums und
 m_s die spezifische Masse des Gases g entlang des optischen Weges

ist.

Für homogene und isotherme Medien (B_σ ist konstant), welche für die Gase im Instrument angenommen werden können, vereinfacht sich obige Gleichung zu:

$$L_\sigma(D) = L_\sigma(0) * \tau_\sigma(D) + B_\sigma(T) * (1 - \tau_\sigma(D)) \quad (160)$$

mit $\tau_\sigma(D) = e^{-t_\sigma(D)}$ Transmissionskoeffizient des gesamten homogenen Mediums.

Es wird allgemein vorausgesetzt, daß alle radiometrischen Größen monochromatisch zu interpretieren sind. Deshalb wird i. allg. auf den Index σ verzichtet.

11.4 Die Kummerfunktion

Die Kummerfunktion ist folgendermaßen definiert (hier entspricht Γ der Gammafunktion):

$$\text{KUM}(a; c; y) = \frac{\Gamma(c)}{\Gamma(a)\Gamma(c-a)} \int_0^1 t^{a-1} (1-t)^{c-a-1} e^{yt} dt = \sum_{r=0}^{\infty} \frac{(a)_r}{(c)_r r!} y^r$$

gilt für $c > a > 0$ mit $(a)_0 = 1$ und $(a)_r = a(a+1)(a+2)\dots(a+r-1)$.

(161)

Mit $c = j+2$, $a = j+1$, $y = \pm i2\pi\sigma\Lambda$, $\Gamma(1)=1$ und der Beziehung $\Gamma(x+1)=x\Gamma(x)$ erhält man

$$\begin{aligned} \text{KUM}(j+1; j+2; \pm i2\pi\sigma\Lambda) &= (j+1) \int_0^1 t^j e^{\pm i2\pi\sigma\Lambda t} dt \\ &= (j+1) \sum_{r=0}^{\infty} \frac{(\pm 2i\pi\sigma\Lambda)^r}{(j+1+r)r!} \quad \text{für } j \geq 0 \end{aligned}$$
(162)

Das Integral in Gl. (162) lässt sich mit der Kummerfunktion lösen. Erfolgt noch die Substitution $t = x/\Lambda$, so ergibt sich

$$\begin{aligned} \int_0^\Lambda x^j e^{\pm i2\pi\sigma x} dx &= \frac{\Lambda^{j+1}}{j+1} \text{KUM}(j+1; j+2; \pm i2\pi\sigma\Lambda) \\ \int_{-\Lambda}^\Lambda x^j e^{\pm i2\pi\sigma x} dx &= \begin{cases} \frac{2\Lambda^{j+1}}{j+1} \operatorname{Re}[\text{KUM}(j+1; j+2; \pm i2\pi\sigma\Lambda)] & \text{wenn } j \text{ gerade} \\ \mp i \frac{2\Lambda^{j+1}}{j+1} \operatorname{Im}[\text{KUM}(j+1; j+2; \pm i2\pi\sigma\Lambda)] & \text{wenn } j \text{ ungerade} \end{cases} \\ &= i^{j \bmod 2} \frac{2\Lambda^{j+1}}{j+1} \operatorname{Re}\left[(\pm i)^{j \bmod 2} \text{KUM}(j+1; j+2; \pm i2\pi\sigma\Lambda)\right] \end{aligned}$$
(163)

Wie Gl. (163) zeigt, lässt sich die Kummerfunktion zur Fouriertransformation eines begrenzten Polynoms verwenden.

$$\text{FT}^\pm \left[x^j \text{RECT} \left[\frac{x}{2\Lambda} \right] \right] = \int_{-\Lambda}^\Lambda x^j e^{\pm i2\pi\sigma x} dx = \dots$$
(164)

In Abb. 65 sind die ersten Ordnungen $\text{KUM}(j+1; j+2; i2\pi\sigma\Lambda)$ dargestellt. Entgegen den üblichen Darstellungen der Kummerfunktion treten Schwingungen durch den komplexen Ausdruck in der Variable y auf.

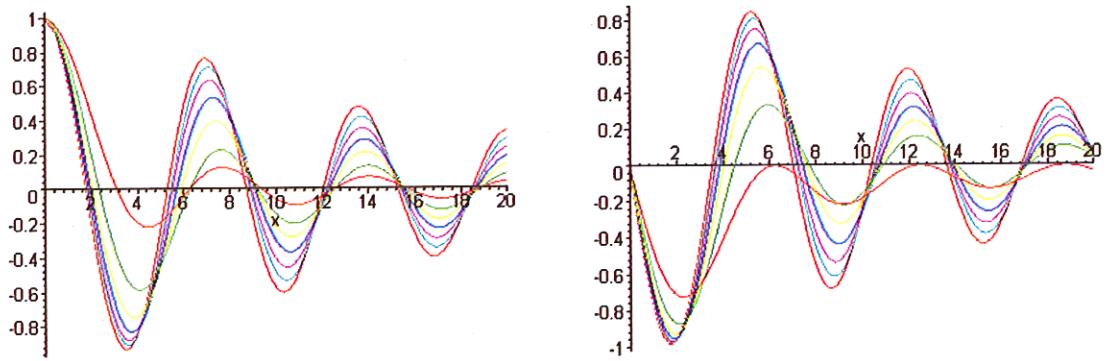


Abb. 65 Die ersten Ordnungen ($j=1 \dots 7$) der Kummerfunktionen $\text{KUM}(j+1; j+2; ix)$.

Links ist der Realteil und rechts der Imaginärteil dargestellt. Die Intensität der Nebenschwingungen steigt mit der Ordnung an.

11.5 Spezielle Funktionen

SINC-Funktion:

$$\text{SINC}(x) = \frac{\sin(x)}{x}$$

RECT-Funktion:

$$\text{RECT}[x] = \begin{cases} 1 & \text{wenn } |x| < \frac{1}{2} \\ 0 & \text{sonst} \end{cases}$$

wobei in dieser Arbeit meist die erweiterte Definition Anwendung findet:

$$\text{RECT}\left[\frac{x}{2\Lambda}\right] = \begin{cases} 1 & \text{wenn } |x| < \Lambda \\ 0 & \text{sonst} \end{cases}$$

COMB-Distribution:

$$\text{COMB}_D(x) = \sum_{m=-\infty}^{\infty} \delta(x - mD)$$

Erweiterter Arkustangens:

$$\text{arctan} 2(x) = \begin{cases} \arctan\left[\frac{\text{Im}(x)}{\text{Re}(x)}\right] & \text{wenn } \text{Re}[x] > 0 \\ \arctan\left[\frac{\text{Im}(x)}{\text{Re}(x)}\right] + \pi & \text{wenn } \text{Re}[x] < 0 \text{ und } \text{Im}[x] > 0 \\ \arctan\left[\frac{\text{Im}(x)}{\text{Re}(x)}\right] - \pi & \text{wenn } \text{Re}[x] < 0 \text{ und } \text{Im}[x] < 0 \end{cases}$$

Varianz:

$$v(f(x)) = \sum_{i=0}^c (f_i(x) - \bar{f}(x))^2$$

Vierte Potenz der Abweichungen:

$$\kappa(f(x)) = \sum_{i=0}^c (f_i(x) - \bar{f}(x))^4$$

Korrelation:

$$\mu(f(x), g(x)) = \int_{-\infty}^{\infty} f(x) * g(x) dx$$

bzw.

$$\mu(f_i, g_i) = \sum_{i=0}^N f_i * g_i$$

Plancksche Strahlungsverteilung als Funktion über die Wellenzahlen:

$$B_\sigma(T) = \frac{2hc^2\sigma^3}{e^{\frac{hc\sigma}{kT}} - 1}$$

11.6 Wichtige Zusammenhänge zur Fouriertransformation

Im folgenden sind einige für diese Arbeit wichtige Beziehungen zwischen Orts- und Frequenzraum zusammengetragen, die über eine Fouriertransformation miteinander verknüpft sind. Eine anschauliche Darstellung dieser Beziehungen ist auch in Champeney [Champeney,1973] enthalten³³.

Ortsraum	Frequenzraum
$f(x) = \int_{-\infty}^{\infty} F(\sigma) * e^{i2\pi x\sigma} d\sigma = FT^+[F(\sigma)]$	$F(\sigma) = \int_{-\infty}^{\infty} f(x) * e^{-i2\pi x\sigma} dx = FT^-[f(x)]$
Rechteckfunktion: $A * \text{RECT}\left[\frac{x}{2L}\right]$	SINC-Funktion: $2AL * \text{SINC}(2\pi L\sigma)$
Gaußfunktion: $A * e^{-a^2 x^2}$	Gaußfunktion: $\frac{A\sqrt{\pi}}{a} * e^{-\pi^2 \sigma^2/a^2}$
Kosinusfunktion: $A * \cos(2\pi\sigma_0 x)$	Symmetrische δ -Distribution: $\frac{A}{2} * [\delta(\sigma + \sigma_0) + \delta(\sigma - \sigma_0)]$
Sinusfunktion: $A * \sin(2\pi\sigma_0 x)$	Asymmetrische δ -Distribution: $\frac{iA}{2} * [\delta(\sigma + \sigma_0) - \delta(\sigma - \sigma_0)]$
Kammdistribution: $A * \text{COMB}_D(x)$	Kammdistribution: $A * \text{COMB}_{\frac{1}{2D}}(\sigma)$
Komplexe e-Funktion: $A * e^{i2\pi\sigma_0 x}$	δ -Distribution: $A * \delta(\sigma - \sigma_0)$
Faltungssatz:	
$f_1(x) \otimes f_2(x) = \int_{-\infty}^{\infty} f_1(x - x') * f_2(x') dx'$	$F_1(\sigma) * F_2(\sigma)$
Differentiation nach x	
$\left(\frac{d}{dx}\right)^n f(x)$	$(i2\pi\sigma)^n * F(\sigma)$
Differentiation nach σ	
$(-ix)^n * f(x)$	$\left(\frac{d}{d\sigma}\right)^n F(\sigma)$
Parseval Theorem:	
$\int_{-\infty}^{\infty} f(x) ^2 dx = \int_{-\infty}^{\infty} F(\sigma) ^2 d\sigma$	

Tab. 8 Wichtige Zusammenhänge der Fouriertransformation.

³³ Im Vergleich zu Champeney ist in dieser Arbeit y durch $2\pi\sigma$ substituiert.

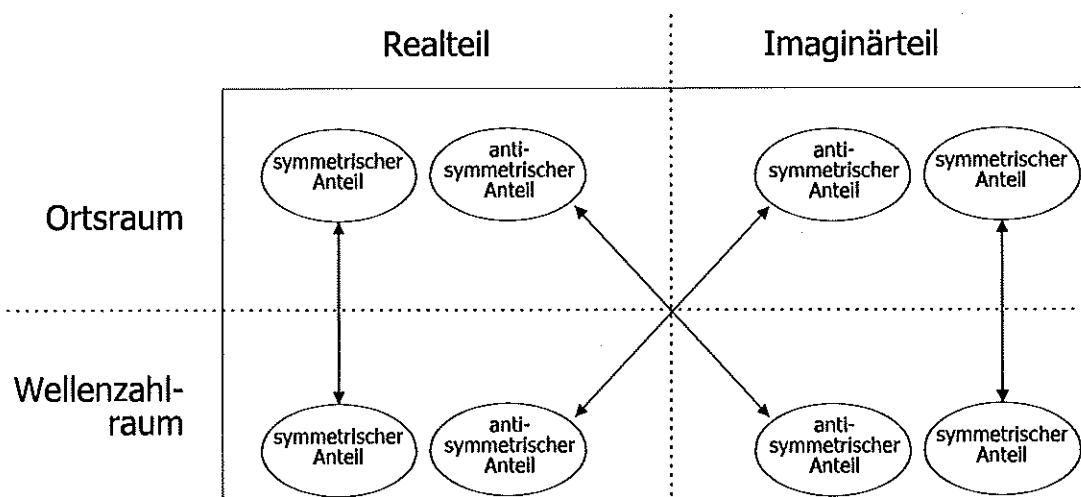


Abb. 66 Symmetrien der Fouriertransformation.

Jede komplexe Funktion kann sowohl im Real- als auch im Imaginärteil in einen symmetrischen und einen antisymmetrischen Anteil zerlegt werden. Die Abbildung gibt die Symmetrieeigenschaften dieser vier Anteile nach der Fouriertransformation an.

11.7 Nomenklatur

Physikalische und mathematische Größen, Variablen und Konstanten:

a_l	Polynomkoeffizienten ($y=a_0+a_1*x+a_2*x^2+\dots$)
a_r	Differenz der Anzahl Spiegel vor und nach dem Strahlteiler
a_t	Streckenverhältnis des Bereichs vor und nach dem Strahlteiler
A	Fläche
APOD	Apodisationsfunktion
B	Strahldichte eines Schwarzkörpers; Planckfunktion
<u>BBST</u>	Strecke zwischen Schwarzkörper und Strahlteiler
c	Lichtgeschwindigkeit $c=2,997925*10^8 \text{ m/s}$
C	Anzahl der Koadditionen
N	Menge der ganzen Zahlen
\mathbb{R}	Menge der reellen Zahlen
\mathbb{C}	Menge der komplexen Zahlen
d	Schichtdicke
d_x	Stützstellenabstand im Interferogramm
d_σ	Stützstellenabstand im Spektrum
<u>DEST</u>	Strecke zwischen Dewar und Strahlteiler
f	Korrekturfaktor
F_{samp}	Funktion des elektrischen Filters
FILT	Filter
FWHM	Halbwertsbreite
$g_{a0,a1}$	Geradengleichung
G	Kalibrierungskonstante
h	Plancksches Wirkungsquantum $h=6,626*10^{-34} \text{ Js}$
i	Imaginäre Einheit $= \sqrt{-1}$
\bar{I}	Intensitätsverteilung der Ringe des Gesichtsfeldes als Funktion der Wellenzahl
\bar{I}^*	Wie \bar{I} , jedoch um die nominelle Wellenzahl in den Ursprung verschoben
I_0	Intensität der einfallenden Strahlung
IFG	ungestörtes Interferogramm
IFG _{b/u/v}	Interferogramm der <u>balancierten</u> , <u>unbalancierten</u> Strahlung oder der Strahlteileremission (v)
IFG _{digit}	Digitalisiertes Interferogramm
IFG _{kont}	Kontinuierliches Interferogramm
IFG _{rau}	Rauschanteil im Interferogramm
IFG _{gest}	Asymmetrisches Interferogramm
ILS	Apparatefunktion (Instrumental Line Shape function)
k_B	Boltzmannkonstante $k_B=1,381*10^{-23} \text{ J/K}$
L	Radiometrisch kalibriertes Spektrum
$L_{\text{ATM/BB/DE/DS}}$	Radiometrisch kalibriertes Spektrum der Strahlungsquellen Atmosphäre (ATM), Schwarzkörper (BB), Dewar (DE) oder Weltraum (DS)

$L_{\text{Hintergrund}}$	Radiometrisch kalibriertes Spektrum der Gerätehintergrundstrahlung
L_{resamp}	Spektral und radiometrisch kalibriertes Spektrum
$L_{\text{b/u,ATM/BB/DE/DS}}$	Spektrale Anteile in radiometrischen Einheiten der <u>balancierten</u> oder <u>unbalancierten</u> Strahlung der Strahlungsquellen Atmosphäre (<u>ATM</u>), Schwarzkörper (<u>BB</u>), Dewar (<u>DE</u>) oder Weltraum (<u>DS</u>) an der Position des Strahlteilers
M	Modulationsfunktion
n	Brechungsindex
N	Anzahl Punkte eines Datensatzes
$OP_{\text{b/u},1/2}$	Gesamter optischer Weg des <u>balancierten</u> , <u>unbalancierten</u> Anteils der Teilstrahlung <u>1</u> oder <u>2</u> im Interferometer
$OP_{v,1/2/3/4/5/6}$	Gesamter optischer Weg der Teilstrahlung <u>1</u> bis <u>6</u> der Strahlteileremission im Interferometer
p_x	Partialdruck des Gases x
P	Leistung
\tilde{P}	Verteilungsfunktion
r	Amplituden-Reflexionskoeffizient
$r_{\overline{\text{BBST}}/\overline{\text{DEST}}/\overline{\text{SCST}}}$	Summen-Amplituden-Reflexionskoeffizient auf der Strecke vom Schwarzkörper (<u>BBST</u>), Dewar (<u>DEST</u>) oder Scanspiegel (<u>SCST</u>) zum Strahlteiler
r_{BB}	Amplituden-Reflexionskoeffizient des Schwarzkörpers
r_{ZnSe}	Amplituden-Reflexionskoeffizient des Dewarfensters
\tilde{r}	Reflexionskoeffizient des elektrischen Feldes
R_a	Reflexionskoeffizient des elektrischen Feldes bei Vielstrahlinterferenzen mit der Strahlungsquelle außerhalb der Grenzschicht
R_i	Reflexionskoeffizient des elektrischen Feldes bei Vielstrahlinterferenzen mit der Strahlungsquelle innerhalb der Grenzschicht
s	Strecke
S	Nicht normiertes Spektrum
$S_{\text{b/u/v}}$	Spektrum der <u>balancierten</u> , <u>unbalancierten</u> Strahlung oder der Strahlteileremission (<u>v</u>)
$S_{\text{b/u/v},1/2}$	Spektrum der <u>balancierten</u> , <u>unbalancierten</u> Strahlung oder der Strahlteileremission (<u>v</u>). Aufgeteilt in den unmodulierten (<u>1</u>) oder modulierten (<u>2</u>) Anteil.
$S_{\text{basis,x}}$	Basislinie des Spektrums x
$S_{\text{ATM/BB/DE/DS}}$	Spektrum der Strahlungsquellen Atmosphäre (<u>ATM</u>), Schwarzkörper (<u>BB</u>), Dewar (<u>DE</u>) oder Weltraum (<u>DS</u>)
S_{bu}	Spektrum aus der Summe der <u>balancierten</u> und <u>unbalancierten</u> Strahlung
$S_{\text{einseitig}}$	Spektrum auf der positiven Wellenzahlskala
S_{gest}	Phasengestörtes Spektrum
S_{korr}	ILS-korrigiertes Spektrum
S_{monochr}	Ideales Spektrum einer monochromatischen Quelle
S_{rau}	Rauschanteil im Spektrum
S_{Γ}	Spektrum von maximaler Auflösung eines längenbegrenzten Interferogramms
S^{HP}	Hochpaßgefiltertes Spektrum
$S^{\text{HP}}_{\text{iter,m}}$	Phasenkorrigiertes, hochpaßgefiltertes Spektrum nach dem m-ten Iterationsschritt
$\frac{S}{N}$	Signal-zu-Rauschen-Verhältnis
<u>SC ST</u>	Strecke vom Scanspiegel zum Strahlteiler
T	Temperatur
T_{1-2}	Temperatur in den Ebenen eins und zwei des Instruments
T_a	Transmissionskoeffizient des elektrischen Feldes bei Vielstrahlinterferenzen mit der Strahlungsquelle im optisch dünneren Medium
T_i	Transmissionskoeffizient des elektrischen Feldes bei Vielstrahlinterferenzen mit der

	Strahlungsquelle im optisch dichteren Medium
\tilde{t}_i	Transmissionskoeffizient des Feldes vom optisch dichten zum optisch dünnen Medium
x	Optische Wegdifferenz zwischen den Interferometerarmen
x_1	Optischer Weg zwischen Strahlteiler und Retroreflektor 1
x_2	Optischer Weg zwischen Strahlteiler und Retroreflektor 2
x_D	Optischer Weg zwischen Strahlteiler und erster Sphäre in Richtung des Detektors
x_p	X-Komponente des Emissionsortes im Strahlteiler
X	Koordinatenachse
y_p	Y-Komponente des Emissionsortes im Strahlteiler
Y	Koordinatenachse
z_p	Z-Komponente des Emissionsortes im Strahlteiler
Z	Koordinatenachse
$\epsilon_{b/u,v,0}$	Elektrisches Feld des <u>balancierten</u> , <u>unbalancierten</u> Anteils oder des Strahlteilers (<u>v</u>) vor dem Durchgang durch das Interferometer
$\epsilon_{b/u,v,1/2}$	Elektrisches Feld des <u>balancierten</u> , <u>unbalancierten</u> Anteils oder des Strahlteilers (<u>v</u>) zwischen Strahlteiler und Retroreflektor <u>1</u> oder <u>2</u> am der ersten Sphäre in Richtung des Detektors
γ	Filterfaktor, der die Position des Spektralbereichs des Spektrums definiert
α	Resultierende Phase bei Vielstrahlinterferenzen; definiert durch Gl. (1)
α_i	Parameter der Apodisationsfunktion nach Norton und Beer
Δx	Fehler der Größe x
Δx_{NESR}	Rauschbetrag der Größe x
ϵ	Emissivität
$\epsilon_{1/2}$	Geometrischer Weg in der strahlteilenden Schicht (<u>1</u>) oder zwischen zwei Ordnungen der Vielstrahlinterferenz außerhalb der strahlteilenden Schicht (<u>2</u>)
$\epsilon_{x,t/2}$	Ortsfehler, zeitlich konstant (<u>1</u>) oder variabel (<u>2</u>)
ϵ_{BB}	Emissivität des Schwarzkörpers
$\epsilon_{\text{Hintergrund}}$	Emissivität des Gerätehintergrunds
ϕ	Phasenwinkel des komplexen Vektors
ϕ_s	Natürlicher Phasenwinkel
$\Phi_{R/T,a/i}$	Resultierender Phasenwinkel bei Vielstrahlinterferenzen mit erster Reflexion (<u>R</u>) oder Transmission (<u>T</u>) außerhalb (<u>a</u>) oder innerhalb (<u>i</u>) des optisch dichteren Mediums
$\Phi_{\text{inst/diff/stat}}$	Instrumentelle/differentielle/statistische Phasenfehler
$\Phi_{\text{iter},m}$	Während der m-ten Iteration bestimmter Phasenfehler
Φ_{lin}	Linearer Phasenfehler
Φ_{tot}	Totaler Phasenfehler
γ	Optische Phase zwischen zwei Durchgängen durch die strahlteilende Schicht
Γ	spektrale Auflösung des Interferometers
ϑ	Winkel
κ	Vierte Potenz der Abweichungen, vergleichbar der Kurtosis
λ	Wellenlänge
Λ	Maximale Weglängendifferenz des Interferometers
μ	Korrelationskoeffizient
ν	Varianz, Quadrat der Abweichungen
π	Ludolphsche Zahl (3,14159...)
θ	Winkel zur optischen Achse
$\theta_{1/2}$	Winkel gegen das Lot im optisch dünnern (<u>1</u>) oder optisch dichteren (<u>2</u>) Medium
σ	Wellenzahl

$\sigma_{1/2}$	Untere (1) und obere (2) Bereichsgrenze des Spektralbereichs
σ_{Nyquist}	Nyquistwellenzahl
$\tilde{\sigma}_{\text{koadd}}$	Rauschen im koaddierten Spektrum
$\tilde{\sigma}(x)$	Standardabweichung der Verteilung von x
ξ	Monochromatischer Massenabsorptionskoeffizient
τ	Amplituden-Transmissionskoeffizient
$\tau_{\text{BBST/DEST/SCST}}$	Summen-Amplituden-Transmissionskoeffizient auf der Strecke vom Schwarzkörper (BBST), Dewar (DEST) oder Scanspiegel (SCST) zum Strahlteiler
$\tilde{\tau}$	Optische Dicke
Ω	Raumwinkel
Ω_{FOV}	Raumwinkel des Gesichtsfeldes
ζ	Elevationswinkel

Einheiten:

$^\circ$	Grad
cm^{-1}	Wellenzahl
m	Meter
$\text{W}/(\text{cm}^2 \text{ sr cm}^{-1})$	Spektrale Strahldichte
W	Watt
$(1\sigma), (3\sigma)$	Genauigkeitsangabe durch Standardabweichung einer Gaußverteilung

Abkürzungen:

AHRS	<u>A</u> ttitude and <u>H</u> eading <u>R</u> eference <u>S</u> ystem
BB	Schwarzkörper; <u>B</u> lack <u>b</u> ody
BLIP	<u>B</u> ackground <u>L</u> imited <u>I</u> nfrared <u>P</u> hotodetector
DPI	<u>D</u> oppelpendel- <u>I</u> nterferometer
$E_{1,2}$	Teilstrahlen im Michelson-Interferometer
EA	<u>E</u> intrittsaperturblende
EASOE	<u>E</u> uropean <u>A</u> rctic <u>S</u> tratospheric <u>O</u> zone <u>E</u> xperiment
ECMWF	<u>E</u> uropean <u>C</u> entre for <u>M</u> edium- <u>R</u> ange <u>W</u> eather <u>F</u> orecasts (http://www.ecmwf.int)
F_x	Planspiegel x
FASCODE	<u>F</u> ast <u>A</u> tmospheric <u>S</u> ignature <u>C</u> ode
FOV	<u>F</u> ield <u>o</u> f <u>V</u> iew, Gesichtsfeld
FS_x	<u>F</u> ield <u>S</u> top; Gesichtsfeldblende x
FTS	<u>F</u> ourier <u>T</u> ransformations <u>S</u> pektrometer
FZK	<u>F</u> orschungszentrum <u>K</u> arlsruhe
FTIR	<u>F</u> ourier <u>T</u> ransformation <u>I</u> nfrarot
HITRAN	<u>H</u> igh <u>r</u> esolution <u>t</u> ransmission <u>m</u> olecular <u>a</u> bsorption <u>d</u> atabase (http://www.hitran.com/)
IMK	<u>I</u> nstitut für <u>M</u> eteorologie und <u>K</u> limaforschung
IR	<u>I</u> nfrarot
KOPRA	<u>K</u> arlsruhe <u>o</u> ptimized and <u>p</u> recise <u>radiative <u>transfer <u>a</u>lgorithm</u></u>
LMI	<u>L</u> ängen <u>m</u> ess <u>i</u> nterferogramm

LS	<u>L</u> yot- <u>S</u> top
M _x	Sphärischer Spiegel x
MIPAS-B2	<u>M</u> ichelson <u>I</u> nterferometer für <u>P</u> assive <u>A</u> tmosphärische <u>S</u> ondierung – <u>B</u> allonversion Modell 2
NESR	<u>N</u> oise <u>E</u> quivalent <u>S</u> pectral <u>R</u> adiance
R _x	<u>R</u> etroreflektoren im Michelson-Interferometer
RAT	<u>R</u> etrieval of <u>A</u> tmospheric <u>T</u> race gas profiles
SC	<u>S</u> canspiegel; Spiegel zur Einkoppelung atmosphärische Strahlung in das Instrument
SE _{1,2}	<u>S</u> piegellecken
SESAME	<u>S</u> econd <u>E</u> uropean <u>S</u>
Si:As BIB	<u>S</u> ilizium Arsenid <u>B</u> locked <u>I</u> mpurity <u>B</u> and (Detektor)
ST	<u>S</u> trahlteiler des Interferometers, teilweise mit Kompensationsplatte
THESEO	<u>T</u> hird <u>E</u> uropean <u>S</u>
UKMO	<u>U</u> nited <u>K</u> ingdom <u>M</u> eteorological <u>O</u> ffice (http://www.meteo.govt.uk/)
W	Dewarfenster
ZOPD	<u>Z</u> ero <u>O</u> ptical <u>P</u> ath <u>D</u> ifference

Funktionen:

COMB()	Kammfunktion
FT ⁺ ()	Fouriertransformation
FT ⁻ ()	Inverse Fouriertransformation
Im()	Imaginärteil einer komplexen Zahl
Re()	Realteil einer komplexen Zahl
RECT()	Rechteckfunktion
SINC()	Sinus-x-über-x Funktion
δ()	Deltadistribution
⊗	Faltung [Champeney,1973]

11.8 Abbildungsverzeichnis

Abb. 1	Optische Prozesse innerhalb eines Luftvolumens.	3
Abb. 2	Horizontsondierung-Meßgeometrie von MIPAS-B2, um eine gute Höhenauflösung zu erhalten und über eine ausreichende Zahl optisch aktiver Moleküle im Sehstrahl zu verfügen.	5
Abb. 3	Sequenz von Spektren des ersten Spektralkanals von MIPAS-B2 für unterschiedliche Tangentenhöhen, gewonnen am 24. März 1997 im Polarwirbel über Kiruna (68°N, Schweden).	5
Abb. 4	Spurengas-Mischungsverhältnisse wichtiger Komponenten der NO _y -Familie als Profile über der Höhe bzw. dem Druck, gemessen von MIPAS-B2 in der Nacht am 11. Februar 1995 über Kiruna (68°N, Schweden).	6
Abb. 5	Schematische Darstellung der einzelnen Strahlungsbeiträge im Michelson-Interferometer.	8
Abb. 6	Die Vielstrahlinterferenzen in der optischen Schicht bewirken den strahlteilenden Effekt.	9
Abb. 7	Schematischer Strahlengang des balancierten Strahls in einem FTIR-Spektrometer.	10
Abb. 8	Schematischer Strahlengang des unbalancierten Strahls in einem FTIR-Spektrometer.	12
Abb. 9	Schematischer Strahlengang der Strahlteileremission in einem FTIR-Spektrometer.	13
Abb. 10	Strahlungsverteilung aus den einzelnen Ports für eine spezifische Wellenzahl in der komplexen Ebene.	17
Abb. 11	Typische reale und imaginäre Anteile im Interferometer MIPAS-B2.	18
Abb. 12	Die Detektorsignale für die Kanäle 1 bis 3 des MIPAS-B2. Das Detektorsignal setzt sich aus dem Gleichlichtanteil und dem Interferogramm zusammen.	23
Abb. 13	zeigt das Doppelpendel-Interferometer (DPI) des MIPAS-B2 Fourierspektrometers. Der optische Weglängen- und Phasenversatz erfolgt durch Drehung der Pendelstruktur des DPI.	27
Abb. 14	Maßstabsgetreuer Strahlengang des MIPAS-B2 Experiments mit den drei prinzipiell unterschiedlichen Meßmodi. Die einzelnen Ebenen sind 'aufgefaltet' übereinander abgebildet.	29
Abb. 15	3-dimensionale Zeichnung des MIPAS-B2 Instrumentes	31
Abb. 16	Das Vektordiagramm eines phasengestörten Spektrums bei einer Wellenzahl σ_0 .	34
Abb. 17	Das Vektordiagramm eines phasengestörten Spektrums bei einer Wellenzahl σ_0 .	34
Abb. 18	Relativer Fehler in Prozent der balancierten und unbalancierten Strahlung S_{bu} aufgrund von Phasenfehlern φ_{tot} und dem Verhältnis zwischen der Strahlteileremission S_v und S_{bu} .	35
Abb. 19	Bestimmung des Phasenfehlers einer Schwarzkörpermessung.	37
Abb. 20	zeigt die Phasenkorrektur einer Schwarzkörpermessung durch Rückdrehen des komplexen Gesamtvektors S um den Winkel ϕ auf die reelle Achse.	38
Abb. 21	Klassisches Verfahren der Phasenkorrektur bei einer Atmosphärenmessung unter $-0,71^\circ$ Elevationswinkel, bei der die Strahlteileremission nicht vernachlässigt werden kann.	39
Abb. 22	Die Phasenfehlerbestimmung einer atmosphärischen Messung bei einem Elevationswinkel von $-0,71^\circ$ mit der klassischen Methode lässt deutlich Liniensstrukturen in der Phase erkennen.	39
Abb. 23	Darstellung der spektralen Vektorkomponenten im komplexen Raum, wie sie zur Bestimmung der differentiellen Phase benötigt werden.	40
Abb. 24	Phasenfehlerbestimmung nach der differentiellen Methode. Als Begrenzung wurde das Ergebnis der klassischen Phasenbestimmung $\pm\pi$ verwendet.	41
Abb. 25	Bestimmung des Phasenfehlers wie in Abb. 24. Die Messung erfolgte jedoch unter einem Elevationswinkel von $-0,71^\circ$.	42
Abb. 26	Blockdiagramm des Ablaufs zur statistischen Phasenbestimmung. Siehe begleitender Textabschnitt.	46
Abb. 27	Entwicklung des Achsenabschnitts $a_{0,m}$ und der Steigung $a_{1,m}$ der linearen Phase $\varphi_{iter,m}$ während der Iteration der statistischen Phasenbestimmung.	47
Abb. 28	Vergleich zwischen originärer Phase des Schwarzkörperspektrums, welche als instrumentelle Phase dient, und deren Korrektur aufgrund der ursprünglich vernachlässigten Strahlteileremission.	48
Abb. 29	Dargestellt sind die Auswirkungen der Korrektur der instrumentellen Phase auf das Schwarzkörperspektrum.	48

Abb. 30	Blockdiagramm des Ablaufs zum Bestimmen der Phase eines Interferogramms von einer atmosphärischen Messung. (Siehe begleitenden Textabschnitt.)	50
Abb. 31	0. Iterationsschritt: Das Spektrum ist mit der initialen Phase korrigiert worden. Aus den hochpaßgefilterten Spektren wurden a_0 und a_1 gewonnen, so daß sich die Phase für die erste Iteration ($m=1$) ergibt (Elevationswinkel $-0,71^\circ$).	51
Abb. 32	Bis zum 3. Iterationsschritt: Die Phase läuft bereits in Richtung der Häufungspunkte.	52
Abb. 33	Bis zum 6. Iterationsschritt: Die Verfeinerung der Phasenbestimmung beginnt.	52
Abb. 34	Bis zum 8. Iterationsschritt: Im Imaginärteil sind keine Linien mehr erkennbar.	53
Abb. 35	Bis zum 10. Iterationsschritt: Ein weiteres Konvergieren ist grafisch nicht mehr erkennbar.	53
Abb. 36	zeigt Abweichungen zwischen den Iterationsschritten des Realteils der komplexen Spektren.	54
Abb. 37	Fehlerentwicklung während der statistischen Phasenbestimmung.	55
Abb. 38	Meßszenario und Temperaturgang im Inneren des Instrumentes während des Fluges am 8.5.1998.	59
Abb. 39	Schematische Darstellung einer Kette von Spiegeln und dazwischen liegendem absorbierenden, bzw. emittierenden Medium für 3 Segmente.	61
Abb. 40	Schematische Darstellung der Komponenten von MIPAS-B2, die radiometrisch zum Gesamtsignal beitragen.	62
Abb. 41	Schwarzkörpermessung S_{BB} des 3. Kanals während des Fluges am 8.5.1998	65
Abb. 42	Koaddierte 'kalte Weltraum'-Messung S_{DS} des 3. Kanals während des Fluges am 8.5.1998.	66
Abb. 43	Einzelmessung der Atmosphäre S_{ATM} des 3. Kanals während des Fluges am 8.5.1998 unter einem Elevationswinkel von $-0,71^\circ$.	67
Abb. 44	Messung der Atmosphäre S_{ATM} des 3. Kanals während des Fluges am 8.5.1998 unter einem Elevationswinkel von $-5,52^\circ$.	68
Abb. 45	Ablaufdiagramm zum Entfernen von Linien aus Weltraum- und Schwarzkörperspektren.	73
Abb. 46	Ergebnis der Linienentfernung im koaddierten Weltraumspektrum des 2. Kanals vom 11.2.1995 20:14:05.	74
Abb. 47	Ergebnis der Linienentfernung im koaddierten Weltraumspektrum des 3. Kanals vom 8.5.1998 1:58:58.	74
Abb. 48	Weltraumspektrum (schwarz) vom 8.5.1998. Zwischen 650 cm^{-1} und 770 cm^{-1} ist deutlich die dominierende CO_2 -Bande zu erkennen.	76
Abb. 49	Rauschreduziertes Schwarzkörperspektrum mit Liniensstrukturen von geräteinternen Gasen.	77
Abb. 50	Beispiel für den Abszissenfehler im Kanal 2 vom 8.5.1998.	79
Abb. 51	Vergleich zwischen den Ergebnissen der unterschiedlichen Kalibrierungsschemata und einem angepaßten atmosphärischen Strahlungsmodell [Wetzel,1999] für zwei kleine Spektralbereiche im ersten Kanal. Die Messung erfolgte am 8.5.1998 unter dem Elevationswinkel von $-0,71^\circ$.	81
Abb. 52	wie Abb. 51; jedoch erfolgt der Vergleich zwischen den Ergebnissen der unterschiedlichen Kalibrierungsschemata und dem angepaßten atmosphärischen Strahlungsmodell [Stowasser,1999] im Kanal 3.	83
Abb. 53	Auswirkung eines Fehlers des Transmissionskoeffizienten $\Delta\tau_{DEST}$ auf den Kalibrierungsfehler $\Delta L_{ATM,\tau}^A$.	89
Abb. 54	Skizze zur Verdeutlichung des Zusammenhangs zwischen dem Gesichtsfeld im Interferometer und der definierenden Gesichtsfeldblende.	91
Abb. 55	Das Apparateprofil entsteht aus der Faltung der gezeigten Verteilungsfunktionen $\hat{I}_{\sigma_0}(\sigma)$ mit der dargestellten SINC-Funktion.	96
Abb. 56	Vergleich zwischen idealem (SINC-Funktion) und durch unterschiedliche Gesichtsfeldverteilungen verbreiterten Apparateprofilen für $\sigma_0 = 1000 \text{ cm}^{-1}$.	97
Abb. 57	zeigt die Modulationsfunktionen der Interferogramme aufgrund unterschiedlicher Verteilungen der Strahlungsintensität über dem Gesichtsfeld.	98
Abb. 58	Modellierte instrumentelle Gesichtsfeldverteilungen für die vier Detektorkanäle.	100
Abb. 59	Verteilungsfunktion $\hat{I}_{\sigma_0}(\sigma)$ der vier Kanäle von MIPAS-B2.	101

Abb. 60	Modellierte Apparatefunktion für alle vier Kanäle von MIPAS-B2. Deutlich ist die Verbreiterung der Halbwertsbreite zu größeren Wellenzahlen hin sichtbar.	101
Abb. 61	Die Modulationsfunktionen der vier Kanäle	102
Abb. 62	Auswirkungen der Apodisationsfunktionen von Norton und Beer [Norton,Beer,1976] auf das Apparateprofil.	105
Abb. 63	Transmissions- (T) und Reflexionsverhalten (R) des Strahlteilers von MIPAS-B2.	115
Abb. 64	Entwicklung der statistischen Phasenbestimmung für den 3. Kanal vom 8.5.1998 bzgl. der Parameter $a_{0,m}$ und $a_{1,m}$ während der Iteration.	120
Abb. 65	Die ersten Ordnungen ($j=1 \dots 7$) der Kummerfunktionen $KUM(j+1; j+2; ix)$.	124
Abb. 66	Symmetrien der Fouriertransformation.	127

11.9 Tabellenverzeichnis

Tab. 1	Geometrische Weglängenabstände der optischen Elemente relativ zum Strahlteiler ST.	29
Tab. 2	Typische spektroskopische Größen der vier Detektorkanäle und des Instrumentes [Friedl-Vallon et al., 1999 und pers. Mitteilung].	30
Tab. 3	Gesamtfehler der Schwarzkörperstrahlung bei einer nominellen Temperatur von 220 K. Alle Fehler sind durch Emissivitätsfehler ausgedrückt.	85
Tab. 4	Gesamtdarstellung der Kalibrierungsfehler des MIPAS-B2 Instruments für den Flug vom 8.5.1998 (weitere Erläuterungen siehe begleitenden Text).	88
Tab. 5	Die wichtigen Kenngrößen des Apparateprofils sind für die speziellen Gesichtsfeldverteilungen einer homogenen und gaußförmigen Ausleuchtung angegeben. Alle Größen sind mit dem optischen Hub Λ normiert.	98
Tab. 6	Charakteristische Größen der Apparateprofile für die vier Kanäle von MIPAS-B2.	103
Tab. 7	Zusammenstellung der Fehlerbeiträge der statistischen Phasenbestimmung einer Einzelmessung des dritten Kanals am 8.5.1998.	121
Tab. 8	Wichtige Zusammenhänge der Fouriertransformation.	126