

基于 HITRAN 数据库的水汽折射率计算

孙 正 宁 辉 谢永杰 武龙龙

(西北核技术研究所, 陕西 西安 710024)

摘要 大气折射率的精确信息在光波传播研究中至关重要,水汽折射率是其研究的一个重点。利用 HITRAN 数据库提供的线谱信息计算了波长在 $0.3\sim 20\ \mu\text{m}$ 范围内标准条件下的水汽折射率,针对该数据库缺乏高能谱线的缺点,利用非线性拟合的方法创建了一条新的紫外伪谱,以表征水汽的紫外能谱及光致电离能谱,提高了水汽折射率的计算精度。计算结果表明,水汽在中红外波段有两个强吸收带: $2.4\sim 3.3\ \mu\text{m}$, $4.8\sim 8.8\ \mu\text{m}$ 。针对水汽这两个较强的吸收带,以 Gross 线形为原函数,拟合得到了一个波长覆盖范围比较广的标准水汽色散公式,比较实验测量数据和旧的色散公式可知,拟合公式和实验数据吻合比较好。

关键词 大气光学;水汽折射率;HITRAN 数据库;色散

中图分类号 P427.1⁺¹ **文献标识码** A **doi**: 10.3788/AOS201232.s101001

Calculate the Refractive Index of Water Vapor Based on HITRAN Database

Sun Zheng Ning Hui Xie Yongjie Wu Longlong

(Northwest Institute of Nuclear Technology, Xi'an, Shaanxi 710024, China)

Abstract An accurate knowledge of the atmospheric refractivity is important for the study of light wave propagation, and the refractive index of water vapor plays an important role in the atmospheric refractivity. The line-transitions of water vapor in the latest HITRAN (high resolution transmission) database are used to calculate the refractive index of standard water vapor for wavelengths between $0.3\ \mu\text{m}$ and $20\ \mu\text{m}$. Before the calculation, a pseudo-spectral is constructed from the measured data to represent the UV resonances and photo-ionization continuum with nonlinear least square method, since the HITRAN database does not provide a line-transition in UV bands. Calculation results show that strong absorbance by water vapor occurs at wavelengths around $2.9\ \mu\text{m}$ and $7\ \mu\text{m}$ in the mid-infrared. Then a simple dispersive formula at wavelengths from $0.3\ \mu\text{m}$ to $20\ \mu\text{m}$ for standard water vapor is given, where the Gross line shape is used. Finally the new dispersive formula is compared with the previous formulae against measurements of refractive index for wavelengths in visible bands and around $3.4\ \mu\text{m}$, $10.6\ \mu\text{m}$, which is in good agreement with the measuremental data.

Key words atmospheric optics; refractive index of water vapor; HITRAN database; dispersion

OCIS codes 010.1290; 010.7340; 260.2030; 300.6320

1 引 言

大气折射率的精确信息在地基天文观测、大气光通信等领域扮演着非常重要的角色。大气的折射效应,会引起天文观测过程中干涉图像质量的下降^[1],在光通信中引入相位噪声^[2]。作为一种高度色散的介质,水汽折射率一直是大气折射率研究中的一个重点^[3~6]。在研究折射率的过程中,物理测

量是最直观的研究手段,但是对水汽折射率的测量相对比较困难。到目前为止,在可见光和红外波段,只测定了 $0.361\sim 0.644\ \mu\text{m}$ 范围内、 $3.4\ \mu\text{m}$ 和 $10.6\ \mu\text{m}$ 附近等处十几条谱线对应的水汽折射率^[7~10],还不足以确定水汽在红外波段的色散关系。从二十世纪六十年代开始,在基础色散理论的启发下,一批学者陆续利用数值模拟的方法来计算

收稿日期: 2012-04-23; **收到修改稿日期**: 2012-06-29

基金项目: 国家 863 计划(2011AA7033041)资助课题。

作者简介: 孙 正(1986—),男,硕士,助理工程师,主要从事电磁波传播方面的研究。E-mail: snzhg86@126.com

水汽折射率^[11~13],并取得了一定的成果。近年来,研究人员开始利用 HITRAN 等光谱数据库提供的谱线信息来计算空气的折射率,并拟合得到了一组湿空气的折射率计算公式^[14,15],但由于该公式是一组泰勒展开式,比较复杂,应用起来比较困难。

针对空气中的重要色散介质——水汽,本文利用 HITRAN 数据库提供的线谱信息^[16],研究了水汽折射率的精确计算方法,并通过拟合得到一个波长覆盖范围比较广的水汽色散公式,以填补湿空气

折射率计算在红外,尤其是中红外波段的空白。

2 水汽折射率的计算原理

对于非磁性介质来说,根据初等色散理论,其极化率可表示为一系列振子之和^[17],因此可利用 HITRAN 数据库提供的谱线信息计算折射率,介质的极化率可表示为^[15]

$$\alpha(\omega) = 4Mc^2 \sum_m \frac{S_m}{2\omega_{0m}} \left(\frac{1}{\omega + \omega_{0m} - i\gamma_m/2} - \frac{1}{\omega - \omega_{0m} - i\gamma_m/2} \right), \quad (1)$$

式中 M 为介质分子数密度; c 为真空中的光速; S_m 为第 m 条谱线的强度,是一个与温度有关的参量; ω_{0m} 为谱线的中心角频率; γ_m 为谱线的半峰全宽。

尽管新版的 HITRAN 数据库比较完备,但是简单地利用(1)式来计算折射率是不可取的,因为该数据库缺乏紫外波段的振动能谱及电离能,最终会导致计算结果出现比较大的误差。因此,Mathar^[14]采用了 Margoliash 等^[18]利用“从头算”法得到的十条 DOSDs(dipole oscillator strength distributions)伪谱作为水汽在紫外波段的能谱。故介质分子的极化率需要在(1)式的基础上添加紫外能谱的贡献,即

$$\chi(\omega) = \alpha(\omega) + 4\pi Ma_0^3 \sum_i \frac{f_i}{\epsilon_i^2 - (\omega\hbar/E_h)^2}, \quad (2)$$

式中 f_i, ϵ_i 分别为第 i 条伪谱对应的强度和能量,其单位均采用原子单位制,而 a_0 为 Bohr 半径, ω 为角频率, \hbar 为约化 Planck 常数, E_h 为 Hartree 能量,其单位采用 SI 单位制。虽然利用该方法可以解决 HITRAN 数据库缺乏高能谱线的缺点,但是该方法也存在一定的缺陷,因为 Margoliash 等^[18,19]在创建伪谱时,采用了实测的水汽折射率作为其约束条件,并没有充分考虑到红外振动能谱对它的影响。为解决该问题,对文献[8]中各个波长对应的极化率 χ ,去除非紫外波能谱的影响,得到紫外能谱对应的极化率,然后利用非线性拟合方法可得到紫外波段的一条新伪谱($\epsilon_{UV} = 0.50833, f_{UV} = 2.49297$,其单位采用原子单位制)。利用该伪谱和 HITRAN 数据库提供的线谱信息,通过计算可以得到水汽分子的极化率,从 Lorentz-Lorentz 公式可以导出水汽的复折射指数 n ^[17]:

$$n = \sqrt{1 + \frac{\chi}{1 - \chi/3}}. \quad (3)$$

事实上,在研究大气的折射现象时,一般只取折射指数 n 的实数,忽略了其虚部。由于气体折射指数非常接近 1,为了比较直观地表示气体折射指数的大小,因此定义了气体折射率 N ,即

$$N = [\text{Re}(n) - 1] \times 10^8. \quad (4)$$

3 标准水汽的色散公式

利用第二节介绍的折射率计算方法,计算了波长在 $0.3 \sim 20 \mu\text{m}$ 范围内,处于标准条件(20°C , 1333 Pa)下的水汽折射率,结果如图 1 所示。

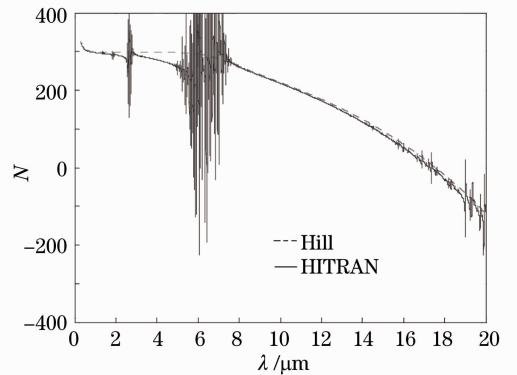


图 1 计算得到的标准水汽色散曲线

Fig. 1 Calculated water-vapor dispersion at standard condition

图 1 中虚线表示 Hill 的拟合结果^[12],实线为利用 HITRAN 数据库的计算结果。从图 1 可知,水汽在中红外波段有两个强吸收带: $2.4 \sim 3.3 \mu\text{m}$, $4.8 \sim 8.8 \mu\text{m}$ 。另外从 Hill 的拟合结果来看,在 $7.8 \sim 12 \mu\text{m}$ 范围内,拟合公式和计算结果还是比较吻合的,但在 $12 \mu\text{m}$ 以后,拟合公式的误差有增大的趋势,因此需要调整文献[12]中(6)式的系数。同时还需要考虑在 $10 \mu\text{m}$ 附近,折射率计算结果和实

验测量结果存在着 2 左右的偏差。综合考虑这些因素,可得到远红外的“分折射率”:

$$N_{\text{far-IR}} = \frac{1959.989(1 - 5.166\sigma)}{1.042 - 1.98 \times 10^3 \sigma^2 + 8.1 \times 10^4 \sigma^4 - 1.9 \times 10^8 \sigma^8}, \quad (5)$$

式中 σ 为波长的倒数,单位为 μm^{-1} 。(5)式在中红外和近红外的外推结果接近零,为了表征水汽吸收带对折射率的影响,采用相对比较简单的 Gross 线形^[20]作为原函数来进行拟合。在拟合过程中,忽略了弱吸收带的影响,最终只考虑中红外波段两个相对比较强的吸收带,即 2.4~3.3 μm 和 4.8~8.8 μm 对应的吸收带。然而在利用 Gross 线形做原函数时,若波长大于中心波长,原函数衰减得不够快,因此考虑在分母上添加一个权函数 ρ 。最终拟合得到中红外的“分折射率”为

$$N_{\text{mid-IR}} = \frac{0.2741(0.1372 - \sigma^2)}{\rho_1(0.1372 - \sigma^2)^2 + 2.56 \times 10^{-4} \sigma^2} + \frac{0.6715(0.0226 - \sigma^2)}{\rho_2(0.0226 - \sigma^2)^2 + 5.76 \times 10^{-4} \sigma^2}, \quad (6)$$

式中 σ 和(5)式的定义一样,权函数 ρ 分别为

$$\rho_1 = \exp\left\{\frac{3}{1 + \exp[-6(\lambda - 2.97)]}\right\}, \quad (7)$$

$$\rho_2 = \exp\left\{\frac{5}{1 + \exp[-6(\lambda - 7.20)]}\right\}. \quad (8)$$

最后再考虑高能能谱的影响,首先在 Erickson^[8]的测量结果的基础上去除(5)式和(6)式的影响(根据 Owens 的建议,波长为 467.9 nm 时,折射率取 307.01^[4]);然后利用非线性拟合的方法得到一个 Sellmeier 色散公式,把它和(5)、(6)式组合起来就可以得到标准水汽的色散公式

$$N = \frac{36643.0184}{123.8262 - \sigma^2} + \frac{1959.989(1 - 5.166\sigma)}{1.042 - 1.98 \times 10^3 \sigma^2 + 8.1 \times 10^4 \sigma^4 - 1.9 \times 10^8 \sigma^8} + \frac{0.2741(0.1372 - \sigma^2)}{\rho_1(0.1372 - \sigma^2)^2 + 2.56 \times 10^{-4} \sigma^2} + \frac{0.6715(0.0226 - \sigma^2)}{\rho_2(0.0226 - \sigma^2)^2 + 5.76 \times 10^{-4} \sigma^2}. \quad (9)$$

4 结果比较

在计算水汽折射率时,采用了新创建的伪谱,相较采用 DOSDs 伪谱而言,计算结果更加精确,具体体现在可见光波段,如图 2 所示。图中实线为采用新伪谱后的计算结果,虚线为采用 DOSDs 伪谱的计算结果,‘+’表示 Erickson 的测量结果^[8]。由图 2 可知,采用新伪谱后,计算值与实测值吻合得更好。

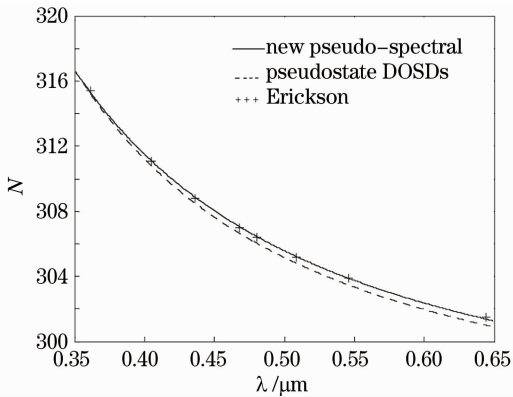


图 2 采用新伪谱和 DOSDs 伪谱的折射率计算结果对比图

Fig. 2 Calculated refractivity by using the new pseudo-spectral or pseudostate DOSDs

(9)式充分考虑了 2.9 μm 和 7 μm 附近的吸收带对折射率的影响,具有比较高的计算精度。新公式与其他色散公式的比较结果如表 1 所示。

表 1 中第二列的实验测量数据取自文献[8~10]。由表 1 可知,(9)式在可见光波段的折射率计算误差约为 0.04,虽然精度比 Erickson 公式低,但是远比 Hill 公式高;在中红外波段(3.5 μm 附近),(9)式的计算精度明显比其他两个公式高;在远红外波段(10.6 μm 附近),(9)式的计算精度和 Hill 公式相差不大,但远比 Erickson 公式高。就整体而言,该公式的不确定度约为 0.5(其对应的折射指数 n 计算误差为 5×10^{-9}),具有比较高的计算精度。

5 结 论

针对 HITRAN 数据库缺乏高能谱线和光致电离谱的问题,在利用 HITRAN 数据库计算水汽折射率之前,利用非线性拟合方法重新创建了一条紫外伪谱,提高了水汽折射率的计算精度。以 HITRAN 计算结果为基础,利用 Gross 线形拟合得

表 1 标准水汽折射率对比表(1333 Pa, 20 °C)

Table 1 Refractivity of standard water vapor at 20 °C, 1333 Pa

$\lambda / \mu\text{m}$	Data	Eq. 9	Erickson	Hill	Eq. 9-data	Erickson-data	Hill-data
0.644	301.47	301.40	301.47	302.83	-0.07	0	1.36
0.546	303.88	303.87	303.88	305.18	-0.01	0	1.30
0.509	305.20	305.21	305.19	306.48	0.01	-0.01	1.28
0.480	306.41	306.45	306.42	307.69	0.04	0.01	1.28
0.468	307.01	307.05	307.01	308.28	0.04	0	1.27
0.436	308.83	308.87	308.83	310.08	0.04	0	1.25
0.405	311.07	311.11	311.07	312.28	0.04	0	1.21
0.361	315.41	315.33	315.40	316.47	-0.08	-0.01	1.06
3.368	286.94	286.46	295.47	297.26	-0.48	8.53	10.32
3.392	286.85	286.25	295.46	297.27	-0.60	8.61	10.42
3.508	285.46	285.21	295.45	297.27	-0.25	9.99	11.81
10.244	214.20	215.47	295.26	215.62	1.27	81.06	1.42
10.568	208.30	208.40	295.26	208.89	0.10	86.96	0.59
10.588	207.70	207.96	295.26	208.47	0.26	87.56	0.77
10.603	206.30	207.63	295.26	208.16	1.33	88.96	1.86
10.629	207.10	207.05	295.26	207.61	-0.05	88.16	0.51
10.650	207.20	206.59	295.26	207.17	-0.61	88.06	-0.03

到了一条标准水汽色散曲线,从与实验测量结果的比较来看,折射指数计算精度达到了 5×10^{-9} 。该曲线适用于 $0.3 \sim 20 \mu\text{m}$ 范围内的水汽折射率计算(两个比较强的共振吸收区除外; $2.4 \sim 3.3 \mu\text{m}$, $4.8 \sim 8.8 \mu\text{m}$),与 Erickson 和 Hill 色散曲线相比,具有更广的波长适用范围和更高的计算精度,填补了大气折射率计算在红外,尤其是中红外波段的空白。

参 考 文 献

- 1 S. Kendrew, L. Jolissaint, R. J. Mathar *et al.*. Atmospheric refractivity effects in mid-infrared ELT adaptive optics [C]. *SPIE*, 2008, **7015**: 70155T
- 2 X. M. Zhu, J. M. Kahn. Free-space optical communication through atmospheric turbulence channels [J]. *IEEE Trans. Commun.*, 2002, **50**(8): 1877~1884
- 3 M. M. Colavita, M. R. Swain, R. L. Akeson *et al.*. Effects of atmospheric water vapor on infrared interferometry [J]. *Pub. Astron. Soc. Pacific.*, 2004, **116**: 876~885
- 4 J. C. Owens. Optical refractive index of air: dependence on pressure, temperature and composition[J]. *Appl. Opt.*, 1967, **6**(1): 51~59
- 5 P. E. Ciddor. Refractive index of air: new equations for the visible and near infrared [J]. *Appl. Opt.*, 1996, **35** (9): 1566~1573
- 6 P. E. Ciddor. Refractive index of air: 3. The roles of CO₂, H₂O, and refractivity virials [J]. *Appl. Opt.*, 2002, **41** (12): 2292~2298
- 7 H. Barrell, J. E. Sears. The refraction and dispersion of air for the visible spectrum[J]. *Phil. Trans. Roy. Soc.*, 1939, **A238**: 1~64
- 8 K. E. Erickson. Investigation of the invariance of atmospheric

- dispersion with a long-path refractometer [J]. *J. Opt. Soc. Am.*, 1962, **52**(7): 777~780
- 9 H. Matsumoto. The refractive index of moist air in the 3- μm region [J]. *Metrologia*, 1982, **18**(2): 49~52
- 10 H. Matsumoto. The refractivities of water vapor for CO₂ laser[J]. *Opt. Commun.*, 1984, **50**(6): 356~358
- 11 A. J. Kemp, J. R. Birch, M. N. Afsar. The refractive index of water vapour: a comparison of measurement and theory [J]. *Infrared Phys.*, 1978, **18**(5-6): 827~833
- 12 R. J. Hill, R. S. Lawrence. Refractive index of water vapor in infrared windows [J]. *Infrared Phys.*, 1986, **26**(6): 371~376
- 13 V. F. Golovko. Dispersion formula and continuous absorption of water vapor [J]. *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer*, 2000, **65**(4): 621~644
- 14 R. J. Mathar. Calculated refractivity of water vapor and moist air in the atmospheric window at 10 μm [J]. *Appl. Opt.*, 2004, **43**(4): 928~932
- 15 R. J. Mathar. Refractive index of humid air in the infrared: model fits [J]. *J. Opt. A: Pure Appl. Opt.*, 2007, **9** (5): 470~476
- 16 L. S. Rothman, I. E. Gordon, A. Barbe *et al.*. The HITRAN2008 molecular spectroscopic database [J]. *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer*, 2009, **110**(9,10): 533~572
- 17 M. Born, E. Wolf. Principles of Optics [M], Cambridge: Cambridge University Press, 1999. 89~103
- 18 D. J. Margoliash, W. J. Meath. Pseudospectral dipole oscillator strength distributions and some related two body interaction coefficients for H, He, Li, N, O, H₂, N₂, O₂, NO, N₂O, H₂O, NH₃, and CH₄ [J]. *J. Chem. Phys.*, 1978, **68** (4): 1426~1431
- 19 G. D. Zeiss, W. J. Meath, J. C. F. MacDonald *et al.*. Dipole oscillator strength distributions, sums, and some related properties for Li, N, O, H₂, N₂, O₂, NH₃, H₂O, NO, and N₂O [J]. *Can. J. Phys.*, 1977, **55**(23): 2080~2100
- 20 E. P. Gross. Shape of collision-broadened spectral lines [J]. *Phys. Rev.*, 1955, **97**(2): 395~403