



LA MEDIA Y ALTA ATMÓSFERA:
INVERSIÓN E INTREPRETACIÓN
DE LAS
MEDIDAS DEL INSTRUMENTO SABER

Tesis Doctoral realizada por:
Maya García Comas

Granada 2004

Instituto de Astrofísica de Andalucía (CSIC)

y

Universidad de Granada



Índice general

I	Introducción y teoría	1
1.	La media-alta atmósfera y el instrumento SABER	3
1.1.	Introducción	3
1.2.	Propiedades de la atmósfera terrestre	5
1.2.1.	Estructura térmica	7
1.2.2.	Composición	10
1.2.3.	Balance energético de la media-alta atmósfera	12
1.3.	Emisiones del dióxido de carbono en el infrarrojo	13
1.3.1.	El no-Equilibrio Termodinámico Local	16
1.4.	El sondeo remoto de la atmósfera	18
1.4.1.	El instrumento SABER: Objetivos y funcionamiento	21
1.5.	Motivación y estructura de este estudio	27
2.	Fundamentos teóricos	29
2.1.	Introducción	29
2.2.	El modelo de transporte radiativo	32
2.2.1.	Técnica línea a línea: el modelo KOPRA	34
2.2.2.	Técnica EGA: el modelo BANDPAK	35
2.3.	El modelo de no-ETL	36
2.3.1.	El método de las matrices de Curtis	39
2.4.	El código de inversión	41
2.4.1.	El modelo directo	43
2.4.2.	El modelo inverso	44
2.5.	La inversión Abel: Aplicación a las medidas de la emisión del hidroxilo	50
II	Resultados	55
3.	Inversión de T_k y CO_2 de SABER en no-ETL: Incertidumbres debidas a parámetros cinéticos	57

3.1.	Introducción	57
3.2.	Las emisiones diurnas del CO_2 en 15 y $4.3 \mu\text{m}$	59
3.3.	La inversión simultánea de las radiancias de SABER en 15 y $4.3 \mu\text{m}$	69
3.3.1.	Parámetros colisionales e incertidumbres asociadas	73
3.4.	Errores en T_k y CO_2 asociados a parámetros colisionales	80
3.5.	Resumen y discusión	95
4.	Validación de la temperatura cinética de SABER	109
4.1.	Introducción	109
4.2.	Medidas de T_k de SABER	111
4.3.	Medidas de T_k desde tierra: LÍDARES	116
4.4.	Comparaciones de la T_k en no-ETL de SABER con medidas de los lídares	122
4.4.1.	Mauna Loa	124
4.4.2.	Table Mountain	127
4.4.3.	Maui	131
4.4.4.	Sondre Stromfjörd	134
4.4.5.	Davis	138
4.4.6.	Fort Collins	140
4.4.7.	Efecto de $k_{\text{CO}_2-\text{O}}$ y de la concentración de oxígeno atómico	144
4.4.8.	Efecto de la concentración de dióxido de carbono	147
4.5.	Resumen y discusión	149
5.	Análisis de las medidas de SABER en $4.3 \mu\text{m}$ en condiciones nocturnas	153
5.1.	Introducción	153
5.2.	Las medidas tomadas por SABER en $4.3 \mu\text{m}$ y $1.6/2.0 \mu\text{m}$	155
5.3.	Simulaciones de las emisiones nocturnas en $4.3 \mu\text{m}$	162
5.3.1.	Cálculo de perfiles de radiancia	163
5.3.2.	Comparación entre simulaciones y medidas: un ejemplo	174
5.4.	Posibles mecanismos de excitación del $\text{CO}_2(\nu_3)$	176
5.4.1.	Excitación directa del $\text{CO}_2(\nu_3)$ por el $\text{OH}(\nu)$	177
5.4.2.	Mecanismos de excitación vía $\text{O}_2(\nu)$	178
5.4.3.	Relajación multi-cuanto del $\text{OH}(\nu)$ por el N_2	180
5.5.	Análisis de errores de las radiancias en $4.3 \mu\text{m}$	186
5.6.	Resumen y discusión	193
III	Conclusiones y trabajo futuro	197
6.	Conclusiones	199

	III
7. Sugerencias para trabajos futuros	205
IV Apéndices	209
A. Niveles vibracionales del CO ₂ incluidos en el modelo de no-ETL	211
B. Bandas vibracionales del CO ₂	213
V Bibliografía	219



DEPARTAMENTO DE FÍSICA APLICADA
UNIVERSIDAD DE GRANADA

INSTITUTO DE ASTROFÍSICA DE ANDALUCÍA
CONSEJO SUPERIOR DE INVESTIGACIONES CIENTÍFICAS

**LA MEDIA Y ALTA ATMÓSFERA:
INVERSIÓN E INTERPRETACIÓN DE
LAS MEDIDAS DEL INSTRUMENTO SABER**

Visado en Granada a 18 de Abril de 2004.

Director de la Tesis:

Dr. D. Manuel López Puertas

Investigador Científico del C.S.I.C.

Tutor:

Dr. D. Lucas Alados Arboledas

Catedrático del Dpto. de Física Aplicada

Universidad de Granada

Memoria presentada para optar al grado de

DOCTORA EN CIENCIAS FÍSICAS

Granada, 18 de Abril de 2004.

Fdo. Maia García Comas

AGRADECIMIENTOS

En primer lugar me gustaría agradecer a Manuel López Puertas su inestimable ayuda y paciencia durante estos cuatro años. Sin duda este trabajo no podría haberse realizado de no ser por sus valiosos consejos y su amplio conocimiento de la física atmosférica. Por supuesto, también quiero agradecerle la oportunidad que me brindó al permitirme realizar este trabajo y al confiar en muchas ocasiones en mi criterio. El apoyo que me ha proporcionado tanto de carácter científico como humano ha sido extraordinario.

Agradezco al personal del Instituto de Astrofísica de Andalucía haberme acogido como lo ha hecho y, en especial, al Departamento de Sistema Solar, por haberme tratado como un científico más desde el principio. Hago extensivo el gesto al personal de la biblioteca, de administración y del centro de cálculo, por el incomparable apoyo logístico proporcionado en este tiempo. Gracias también a la Universidad de Granada y, en concreto, a mi tutor Lucas Alados Arboledas.

Gracias a Bernd Funke, por ayudarme a comprender los entresijos del mundo de la inversión de radiancias, y a Sergio Gil, porque creo que ambos hemos aprendido mucho en nuestras conversaciones científicas. Gracias también a Miguel Ángel López Valverde, por su ayuda en los primeros pasos en este Instituto, y a Francisco González Galindo, por ser un buen apoyo. Gracias al resto del grupo AIRE.

Agradezco al equipo del instrumento SABER la excelente acogida que me proporcionó desde el primer momento que me integré en su grupo de trabajo. En especial, a Marty Mlynczak y Chris Mertens, por haberme permitido colaborar con ellos durante mi estancia en los Estados Unidos, y a Peter Wintersteiner, Dick Picard y Jeremy Winick, por las útiles conversaciones científicas que con ellos he mantenido. También agradezco a la ‘CEDAR Database’ por proporcionarme las medidas del lidar de Rayleigh que opera la ‘Utah State University’ con fondos de la ‘National Science Foundation’.

Los becarios y Olga han supuesto un apoyo constante. Quiero hacer hincapié en lo agradable que ha sido trabajar entre vosotros. Aquí va el agradecimiento especial para mi guía. Gracias muy especiales al ‘instituto cervantes’ y a mi compañero de despacho favorito. Gracias también al resto de contratados de todas las modalidades habidas y por haber, que sois un montón.

Por último, necesito dar las gracias a mi madre y a mi padre, a mis hermanos y a mis abuelitos que, pase lo que pase, siempre me asilan y están de mi lado, como también lo ha estado durante tantos años Yimi. Ni que decir tiene lo que le debo a Saicor por su paciencia, por escucharme y por ayudarme en lo que más me cuesta.

Al saber.

Parte I

Introducción y teoría

Capítulo 1

La media-alta atmósfera y el instrumento SABER

Síntesis

La media y alta atmósfera terrestre es una región poco explorada hasta la fecha. Comprender los procesos que en ella tienen lugar es importante no sólo por la ampliación de nuestro conocimiento sino porque es la interfaz entre el espacio y la baja atmósfera. Hasta el lanzamiento del instrumento SABER a bordo del satélite TIMED de NASA en el año 2001, muy pocas misiones espaciales habían estado totalmente dedicadas a realizar medidas en esta región. Este instrumento mide las emisiones infrarrojas desde la baja estratosfera hasta la baja termosfera de manera ininterrumpida y de forma global. En este capítulo se hace una breve introducción histórica, se plantean las principales incógnitas de la media-alta atmósfera y se describe el instrumento SABER.

1.1. Introducción

La media-alta atmósfera terrestre es la porción de atmósfera situada entre los 20 y los 500 km. Aunque en ella tan sólo se concentra un 5 % de la masa total atmosférica, es una de las regiones más complejas y significativas en cuanto a la conexión Sol-Tierra se refiere.

En los últimos tiempos se ha puesto de manifiesto que la liberación de gases debida a la actividad humana puede provocar cambios en la media-alta atmósfera. Por ejemplo, se prevé que a lo largo de este siglo esta región se vuelva más fría, más húmeda y que el escudo que forma para paliar la radiación ultravioleta que alcanza la superficie terrestre sea menos efectivo. Si se duplicara la concentración de gases invernadero como el CO_2 , la estratopausa (situada alrededor de 50 km) y la mesopausa (situada alrededor de 90 km) sufrirían un enfriamiento de 10-12 K y 6-12 K respectivamente. Estos cambios podrían provocar otros como alteraciones en la circulación global o un aumento de nubes noctilucetas (*Roble, 1995*). Sin embargo, el conocimiento actual sobre cambios sistemáticos

y tendencias en la temperatura y en la composición de estas regiones es relativamente limitado, comparado con el de la baja atmósfera terrestre.

Al contrario que la baja atmósfera, el estado y la variabilidad natural de la media-alta atmósfera por encima de 60 km no han sido bien caracterizados porque, hasta hace poco tiempo, esta región era difícil de estudiar observacionalmente. El desarrollo de sofisticadas técnicas de observación remota y la impresionante evolución de modelos numéricos durante las dos últimas décadas han proporcionado las herramientas necesarias para empezar a entender el impacto de las actividades humanas en esta compleja región de la atmósfera y su interacción con la baja atmósfera.

Aunque ha sido estudiada por instrumentos situados en tierra y por cohetes local y esporádicamente, ésta es una región casi inexplorada desde el punto de vista global. La observación remota por parte de instrumentos situados en plataformas espaciales mejora sustancialmente el escaso conocimiento que actualmente se tiene sobre ella. Esta técnica de observación permite medir magnitudes como la temperatura atmosférica y la abundancia de constituyentes con una amplia cobertura espacial y temporal para así cuantificar sus variabilidades naturales y tendencias, comprobar la validez de modelos de circulación atmosférica, comprender el comportamiento de las mareas y las ondas de larga escala y, en definitiva, ampliar nuestro conocimiento de los procesos de origen energético, químico y dinámico que tienen lugar en esta región.

La ventaja principal del sondeo remoto desde instrumentos embarcados en satélites es que permiten una observación global y regular de la atmósfera con una cobertura y muestreo no igualados por ningún otro tipo de plataforma. Por tanto, hasta hoy en día es la mejor solución para realizar observaciones de forma continuada y a escala global. Debido a que la localización de la región a observar está a una cierta distancia del instrumento, es necesario saber en qué forma se propaga la información, que en este caso es la radiación electromagnética.

Un instrumento de sondeo remoto (o teledetección) no mide por tanto los parámetros físicos de modo directo sino que mide una función más o menos complicada de los mismos. Por esto se hace necesaria la utilización de un proceso de inversión de las medidas para derivar el producto final.

El conocimiento de la estructura térmica es fundamental para cualquier estudio de la atmósfera media-alta ya que describe la cantidad de energía que ésta contiene. El CO_2 es la especie que provoca el mayor enfriamiento radiativo infrarrojo en la estratosfera, la mesosfera y la baja termosfera alrededor de $15 \mu\text{m}$. La temperatura cinética se puede derivar a partir de las medidas de emisiones de dióxido de carbono alrededor de $15 \mu\text{m}$ en la mesosfera y la baja termosfera y, comúnmente, en la estratosfera.

Teniendo en cuenta que el CO_2 es una especie trazadora, esto es, de larga vida fotoquímica, su distribución se utiliza para estudiar algunos procesos de origen dinámico (como variabilidad debida a ondas de gravedad o variaciones estacionales). Por otra par-

te, la altura de la homopausa no está bien determinada (*López-Puertas y col.*, 2000) ni tampoco el gradiente de su concentración (*Kaufmann y col.*, 2002). El conocimiento de su concentración permitirá la determinación de ambos. A partir del análisis de las emisiones en $4.3 \mu\text{m}$ se puede determinar la concentración de CO_2 .

El conocimiento preciso tanto de la temperatura cinética como de la abundancia de dióxido de carbono son fundamentales para establecer el balance energético de la mesosfera ya que determinan la tasa de enfriamiento (*Roble y col.*, 1989). Además ambos darán cuenta de la respuesta del sistema a la variabilidad tanto solar como auroral. Por tanto, las medidas de las emisiones del CO_2 en $15 \mu\text{m}$ y en $4.3 \mu\text{m}$ pueden mejorar nuestro conocimiento de estas partes poco sondeadas.

Finalmente, y no por ello menos importante, las emisiones del dióxido de carbono en la mesosfera y la baja termosfera están alejadas de las condiciones de Equilibrio Termodinámico Local (ETL) por lo que su estudio permite determinar la importancia de los procesos de no-ETL (no Equilibrio Termodinámico Local), por otra parte fundamental tanto para calcular el balance energético como para utilizarlos para sondear esta región atmosférica.

Desde el 7 de diciembre de 2001 el instrumento SABER, a bordo del satélite TIMED de NASA, está en órbita. Sus principales objetivos son mejorar significativamente el conocimiento actual de los principales procesos que gobiernan el balance energético, la química y la dinámica de la media-alta atmósfera. Este instrumento mide, entre otras, las emisiones atmosféricas del CO_2 en $15 \mu\text{m}$ y $4.3 \mu\text{m}$ a partir de las cuales se derivan la temperatura y la abundancia de dióxido de carbono. En esta memoria se presenta un estudio de los datos de SABER obtenidos hasta la fecha (dos años de medidas), especialmente aquellos relacionados con las emisiones del CO_2 .

En la Sección 1.2 se describen las propiedades de la media-alta atmósfera y, en concreto, su estructura térmica y la distribución de constituyentes. La descripción de las emisiones del dióxido de carbono en el infrarrojo se realiza en la Sección 1.3. El interés de escoger las observaciones en el limbo de las emisiones atmosféricas en el infrarrojo para el estudio de esta región atmosférica se justifica en la Sección 1.4 en la que también se enumeran las características del instrumento SABER. Se finaliza el capítulo con la motivación y la estructura de esta memoria.

1.2. Propiedades de la atmósfera terrestre

Durante muchos años la región de la atmósfera terrestre situada entre 40 y 150 km era denominada de forma coloquial la ‘ignorosfera’. Esto se debía a que, aunque existían observaciones entre 80 y 150 km como medidas de la ionosfera mediante radares, medidas de auroras o análisis de las huellas de meteoros, esta porción de la atmósfera no podía ser estudiada *in situ* ya que los globos no podían ascender más allá de los 40 km de altura y

los satélites no podían sondear por debajo de los 150 km.

A principio del siglo pasado, tras las medidas por encima de los 10 km de un cohete y la cometa de *de Bort*, se descubrió que la temperatura atmosférica no disminuye a medida que se asciende en altura hasta alcanzar el cero absoluto. Esta idea fue acogida con cierto escepticismo pues, en un principio, se creyó que los sensores de los instrumentos fueron accidentalmente calentados por el Sol. Sin embargo, el experimento se repitió durante la noche evidenciando que, independientemente de la acción del Sol, la temperatura dejaba de disminuir con la altura hasta la entonces denominada ‘capa isoterma’.

En aquella época se pensaba que la temperatura por encima de la capa isoterma era constante, obedeciendo así los principios de balance radiativo. En los años 20, contradiciendo esta idea, se postuló que la temperatura debía alcanzar un máximo en la estratosfera. Uno de los indicios que sostenían esta teoría era que, durante la Primera Guerra Mundial, se podían oír los cañones de los campos de batalla franceses desde Londres. Esto era consistente con la refracción del sonido en regiones donde la temperatura era elevada. Otro indicio fue que la densidad derivada alrededor de 100 km a partir de la observación de huellas de meteoros era más de un orden de magnitud mayor que la derivada suponiendo la temperatura constante desde la capa isoterma (*Lindemann y Dobson, 1922*). Otro más fue que, a partir de espectros de auroras, se obtenían temperaturas de alrededor de 220 K (*Vegard, 1932*).

La región situada por debajo de la capa isoterma se bautizó con el nombre de troposfera (del griego ‘*τροπωφ*’, vuelta, y ‘*σφαερα*’ esfera) y la situada por encima, en la que la temperatura aumenta con la altura, estratosfera (del latín ‘*stratus*’, extendido, y del griego ‘*σφαερα*’, esfera). En cuanto la existencia de la estratosfera fue aceptada, se justificó el comportamiento de su temperatura asociándolo a la absorción de radiación solar por el ozono.

Sin embargo, no fue hasta la década de los 50 cuando se pudo hacer una estimación adecuada de la temperatura máxima que alcanzaba la estratosfera (en la estratopausa). Entonces ya se tenía suficiente información sobre el flujo solar, la presión atmosférica y el acoplamiento entre la teoría fotoquímica y el balance energético en la atmósfera media. La temperatura asignada a la estratopausa por *Murgatroyd [1957]* fue de alrededor de 300 K.

A partir de los sesenta, los estudios se centraron en la física y química de las auroras y del ‘airglow’, a alturas por encima de 80 km, y en el transporte de ozono estratosférico, a alturas por debajo de 50 km. La región entre 40 y 80 km quedó algo olvidada. Con el lanzamiento de cohetes aparecieron en aquella década algunos trabajos sobre la estructura de la atmósfera media incluyendo medidas de presión, densidad, temperatura y vientos (*Nordberg y col., 1965*), encontrándose las bajas temperaturas de la mesosfera del verano polar. También se llevaron a cabo varios estudios sobre la dinámica y la química y se desarrollaron los primeros modelos de circulación en la mesosfera (*Leovy, 1964*).

En la década de los setenta, hubo grandes avances en el entendimiento de la dinámica y

su influencia sobre la química y la estructura térmica mesosféricas presentándose modelos de circulación en tres dimensiones estudiando la variabilidad temporal en la temperatura y la composición (*Mayr y Harris, 1977*), o trabajos en los que se incluía el efecto del transporte de constituyentes sobre la composición atmosférica (*Battaner y col., 1975*). También se desarrollaron modelos en los que se mostraba la importancia de la consideración de vientos horizontales en la composición de la baja termosfera (*Rodrigo y col., 1981*).

A finales de esta década, se lanzó el Nimbus 7 que portaba instrumentos entre los que se encontraba el SAMS ('Stratospheric And Mesospheric Sounder'), dedicado a sondear la estratosfera y mesosfera terrestres. Esto supuso una gran evolución en el conocimiento de la atmósfera ya que por primera vez se disponía de medidas globales de las emisiones terrestres, de las que se pudieron derivar la temperatura y la composición (*Rodgers, 1984*).

Durante los ochenta, el desarrollo de modelos fotoquímicos no-estacionarios de la mesosfera y la baja termosfera avanzó sustancialmente al calcular las concentraciones de los constituyentes incluyendo un tratamiento detallado del acoplamiento entre la química y la dinámica (*García y Solomon, 1983*) o del efecto de la actividad solar sobre los procesos de fotodisociación y de los mecanismos de transporte (*Rodrigo y col., 1986*).

Con el lanzamiento del satélite UARS en 1991 y el desarrollo de modelos atmosféricos 2-D y 3-D se facilitó el entendimiento de dicha región. Sin embargo, las medidas de UARS están confinadas a alturas por debajo de 70 km, o tienen una cobertura latitudinal y espacial restringidas, o bien mide un número limitado de parámetros por encima de esa altura. Ahora la comunidad científica reconoce que es necesario estudiar la atmósfera de forma completa y, en ese contexto, el lanzamiento del instrumento SABER supone una oportunidad única para ampliar el conocimiento de estas regiones.

En *Atmospheric Science across the Stratopause* [2000] se incluye un excelente compendio de artículos en los que se revisan las características de la media y alta atmósfera desde el punto de vista dinámico, químico y energético, y se muestra el estado actual de nuestro conocimiento en esta parcela de la física atmosférica.

1.2.1. Estructura térmica

El criterio más extendido para dividir la atmósfera terrestre es el que atiende a la variación de temperatura con la altura. En la Figura 1.1 se muestra la estructura térmica de la atmósfera en tres escenarios típicos correspondientes a latitudes medias y verano e invierno polares. En ese sentido, las regiones en las que se divide la atmósfera son:

- *Troposfera*: Se extiende desde la superficie hasta 8 km (en los polos) y 18 km (en el ecuador). La mayor parte de la emisión de radiación solar sucede en longitudes de onda en el visible o próximas a él. La atmósfera no absorbe esta radiación significativamente (ver Figura 1.3) y la mayor parte alcanza la superficie terrestre donde es

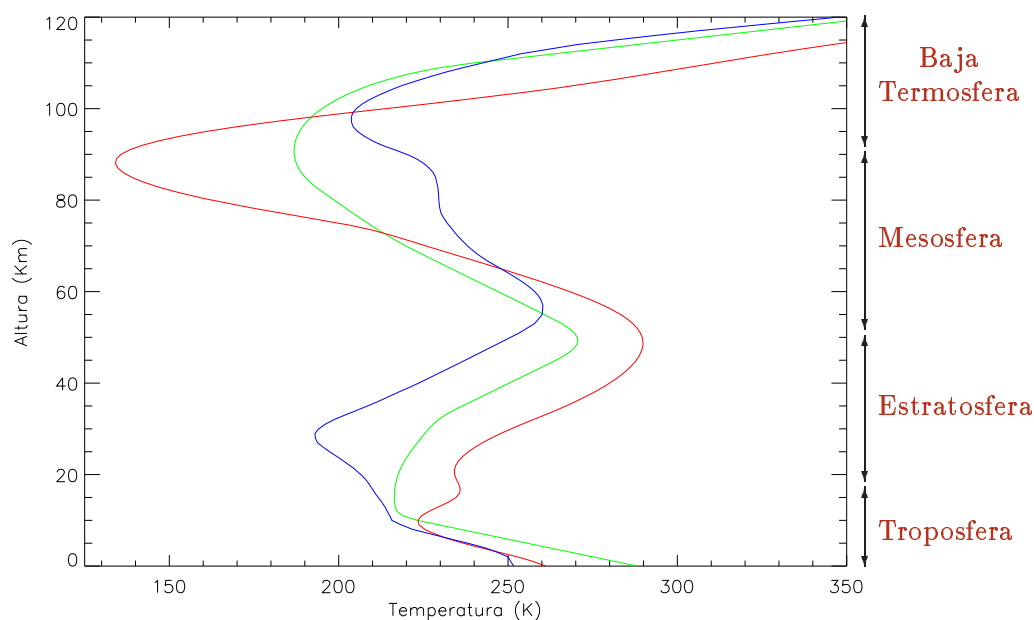


Figura 1.1: Estructura térmica de la atmósfera terrestre. Se muestran perfiles típicos de temperatura cinética para latitudes medias (verde), verano polar (rojo) e invierno polar (azul).

absorbida. El aire cercano a la superficie se calienta y, si se está a mayor temperatura que en las regiones superiores, son inestables frente a la convección, debido a su menor densidad. Esta inestabilidad convectiva sucede en los primeros 10-15 km de la atmósfera. En el límite superior de esta región, denominado *tropopausa*, y debido a la baja densidad de la atmósfera situada por encima, se produce un importante enfriamiento radiativo en el infrarrojo. Es decir, gran parte de los fotones emitidos no son absorbidos por capas superiores y escapan.

- *Estratosfera*: Se extiende desde la tropopausa hasta unos 50 km. El enfriamiento es tan eficiente en la tropopausa que a alturas inmediatamente por encima de esta región, la temperatura tiende a ser constante. Esto es consecuencia de que las capas se calientan por absorción de la radiación proveniente de regiones inferiores y se enfría en idéntica proporción, lo cual sugiere que la temperatura de la estratosfera debería ser constante. Sin embargo, aumenta con la altura a partir de los 20 km debido a la absorción de radiación solar en el ultravioleta por parte del ozono. Aunque el máximo en la concentración de ozono sucede a 25 km, la tasa de calentamiento es máxima alrededor de los 50 km, límite superior de esta región, que se denomina *estratopausa*.
- *Mesosfera*: Se extiende desde la estratopausa hasta entre 90 (en el polo de verano) y casi 100 km (en el polo de invierno). Por encima de la estratopausa el enfriamiento radiativo en las bandas infrarrojas del dióxido de carbono domina sobre el calen-

tamiento producido por absorción de radiación proveniente de las capas inferiores. Esto hace que la temperatura disminuya con la altura hasta la mesopausa, región donde se alcanza las temperaturas mínimas de la atmósfera terrestre (de unos 130 K en el verano polar).

- *Termosfera*: Se extiende a partir de la mesopausa. La densidad del gas en las regiones situadas por encima de la mesopausa es lo suficientemente baja como para permitir que partículas y fotones solares altamente energéticos penetren y causen ionizaciones y disociaciones. Durante estos procesos se deposita energía que conlleva el calentamiento de la región y el aumento de la temperatura consiguiendo los valores máximos de la atmósfera (de hasta 2000 K, en función de la actividad solar).

La baja atmósfera está constituida por la troposfera, la atmósfera media la forman la estratosfera y la mesosfera, y la alta atmósfera es la región situada por encima de ~ 100 km.

Una de las características principales de la estructura térmica es que las temperaturas de la mesopausa en el hemisferio de invierno son mayores que en el de verano; o la temperatura de la tropopausa tropical, que es menor a medias y altas latitudes. Ambos están íntimamente ligados a mecanismos de origen dinámico. En concreto, la fría mesopausa del verano polar se debe a la disipación de ondas de gravedad¹ en la mesosfera (generadas en la troposfera y que aumentan en amplitud a medida que ascienden) con la consiguiente deposición de momento y energía. Esto, por interacción con los vientos zonales, provoca una circulación meridional en dirección verano-invierno a estas alturas que resulta en un enfriamiento adiabático en el verano y un calentamiento en invierno. Esto a su vez implica una circulación en sentido ascendente característica del polo de verano y descendente en el polo de invierno (*Brasseur y Solomon, 1986; Andrews y col., 1987*).

La atmósfera terrestre también se puede dividir atendiendo a los procesos de difusión dominantes. En ese sentido se denomina *homosfera* a la región en la que dominan los procesos de difusión turbulenta, como inestabilidades provocadas por ondas o flujo vertical. En la homosfera los gases permanecen bien mezclados por lo que el peso molecular medio del aire permanece casi constante con la altura. El límite superior de esta capa, donde la atmósfera deja de estar bien mezclada, se llama *homopausa* que, aunque tradicionalmente ha sido situada alrededor de los 100 km, estudios recientes (*López-Puertas y col., 2000*) sugieren que está por debajo de esta altura. Por encima de la homopausa se localiza la *heterosfera* donde los constituyentes atmosféricos empiezan a distribuirse según su peso molecular, esto es, mediante difusión molecular, luego el peso molecular medio del aire varía con la altura.

¹Las ondas de gravedad se propagan en dirección vertical y están asociadas a fuerzas de empuje que tienden a restaurar la estabilidad en fluidos estratificados

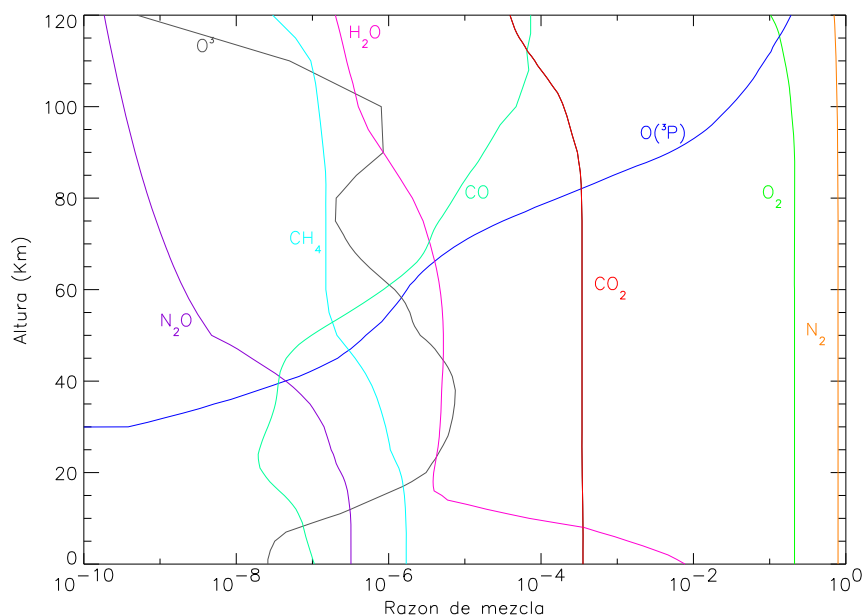


Figura 1.2: Perfiles típicos de la razón de mezcla de los principales constituyentes atmosféricos para el caso de latitudes medias durante el día.

1.2.2. Composición

La atmósfera terrestre la forman una mezcla de gases entre los que tienen lugar fenómenos de oxidación inagotables debido a la producción tanto de oxígeno molecular como de combustibles oxidantes por parte de la actividad biológica. En la Figura 1.2 se muestran perfiles de razón de mezcla típicos de los principales constituyentes en el caso diurno en latitudes medias. Hasta 90 km el 99 % de las partículas atmosféricas son nitrógeno y oxígeno moleculares. A partir de esa altura, empiezan a fotodisociarse y disminuye levemente su concentración.

Es precisamente a esa altura donde el oxígeno atómico empieza a ser uno de los principales constituyentes atmosféricos. Debido a la fotodisociación del ozono y del oxígeno molecular se genera oxígeno atómico que, a 110 km, constituye cerca del 10 %. Aunque el oxígeno molecular se fotodisocia de manera más efectiva en regiones superiores, hay transporte en dirección descendente de oxígeno atómico y su concentración es significativa a alturas menores. Este compuesto es importante en cuanto al enfriamiento de la atmósfera media-alta tras transferir energía cinética al CO_2 y NO . Su abundancia por debajo de la mesopausa es menor durante la noche debido a la ausencia del Sol y a su recombinación.

La concentración de dióxido de carbono es constante desde la superficie hasta aproximadamente 90 km donde empieza a descender por la acción de la difusión molecular y la fotodisociación. Este constituyente juega un papel crucial en el enfriamiento radiativo en el infrarrojo en la media-alta atmósfera. Su concentración en la alta mesosfera es variable (de 245 ppmv a 90 km en el invierno polar a 360 ppmv en el verano polar) fundamental-

mente debido a fenómenos dinámicos ya que el tiempo de vida medio fotoquímico es muy elevado. Se sabe que la liberación de CO_2 de origen antrópico (como la combustión de combustible fósil) representa una perturbación importante en el ciclo natural del carbono. Su concentración ha aumentado en los últimos años a un ritmo de 1.5-2 ppmv (partes por millón en volumen) por año (*López-Puertas y Taylor, 2001*).

La razón de mezcla del vapor de agua puede alcanzar el 10 % en regiones muy próximas a la superficie debido al continuo suministro por parte de los océanos. Esta proporción disminuye rápidamente con la altura y a 5 km apenas alcanza el 1 ‰. Por encima de la tropopausa su abundancia se mantiene constante (cerca de 4 ppmv) hasta unos 80 km donde, debido a la fotodisociación, vuelve a decaer.

El ozono se genera tras la recombinación de oxígeno molecular y oxígeno atómico. Es uno de los constituyentes minoritarios que tiene un efecto importante sobre la estructura térmica, el balance energético y las condiciones en la superficie de la Tierra. Esto se debe a que absorbe la radiación solar ultravioleta. El máximo en su concentración se produce alrededor de 25 km. Por encima de esa altura, es inestable y se fotodisocia, disminuyendo su razón de mezcla. A unos 80 km aparece un segundo máximo de ozono debido al aumento de la concentración de oxígeno molecular.

El óxido nitroso y el metano son producidos por la actividad biológica. Después del vapor de agua y del dióxido de carbono son los gases invernadero más abundantes en la troposfera. El primero se disocia en la estratosfera mientras que el segundo lo hace en la mesosfera.

El monóxido de carbono juega un papel importante en la química de la troposfera y la estratosfera tras su destrucción al reaccionar con el radical hidroxilo. Se origina en la superficie a partir de la combustión de combustible fósil y en la estratosfera y baja mesosfera a partir de la oxidación del metano. La fotólisis del CO_2 y el consiguiente transporte hacia abajo son la principal fuente de este compuesto en la alta atmósfera. Aunque en la última década parece que su concentración ha disminuido, en las décadas anteriores sufrió un aumento de hasta un factor 2.

Algunos constituyentes atmosféricos presentan una alta variabilidad en función de la iluminación solar. El ozono, debido a la ausencia de radiación ultravioleta, es más abundante durante la noche en la mesosfera. También es el caso del radical hidroxilo ya que se genera fundamentalmente tras la reacción entre el hidrógeno atómico y el ozono y la concentración nocturna del segundo es mayor. Durante el día se fotodisocia y casi desaparece. El oxígeno atómico electrónicamente excitado es otro ejemplo de este tipo. En este caso su concentración es sustancialmente mayor durante el día. Este constituyente es una fuente importante de excitación vibracional en la media-alta atmósfera.

Por otra parte, visto desde un punto de vista global, la circulación media de la atmósfera es zonal (paralela a líneas latitudinales). Esto implica una tendencia a que las distribuciones de los constituyentes sean homogéneas en la dirección longitudinal. Por esto, las

variaciones de los constituyentes de larga vida fotoquímica en las direcciones vertical y meridional suelen ser mayores que en la longitudinal.

1.2.3. Balance energético de la media-alta atmósfera

El balance energético de la atmósfera terrestre está íntimamente ligado a su estructura térmica, su composición, la química y la dinámica. Para evaluarlo hay que considerar los procesos de calentamiento y enfriamiento que tienen lugar, ya sean de origen radiativo, químico o dinámico.

El calentamiento de la mesosfera tiene lugar por 1) la absorción de radiación solar ultravioleta en las bandas de Hartley del ozono (entre 242 y 310 Å) (*Mlynczak y Solomon*, 1991a), 2) la relajación del O(¹D) generado por la fotólisis del ozono y del oxígeno molecular, 3) la liberación de la energía potencial química tras la recombinación del oxígeno atómico y la reacción exotérmica entre el hidrógeno y el ozono (*Mlynczak y Solomon*, 1991b), 4) las interacciones dinámicas en las que las ondas de gravedad y mareas se disipan transfiriendo energía (*Gavrilov y Roble*, 1994), y 5) el calentamiento por compresiones adiabáticas debidas a movimientos verticales.

El enfriamiento de la mesosfera está dominado por mecanismos de origen radiativo que involucran al CO₂ y O₃ (*Mlynczak y Solomon*, 1993; *López-Puertas y Taylor*, 2001). En concreto, el enfriamiento de mayor magnitud se debe a la transferencia de energía cinética del oxígeno atómico hacia energía vibracional del CO₂ que, tras relajarse vibracionalmente, emite al espacio en el infrarrojo alrededor de 15 μm.

Al contrario que las capas adyacentes a la mesosfera, en esta región no se deposita mucha energía solar. Mientras que la componente de la radiación solar en el ultravioleta extremo (EUV) se absorbe por encima de la mesosfera, la componente ultravioleta (UV) se absorbe fundamentalmente por debajo. De hecho, es opinión generalizada que se genera más calor mediante las reacciones químicas exotérmicas.

En cuanto a los procesos de calentamiento de la baja termosfera cabe destacar la deposición de energía por absorción de radiación solar EUV, la precipitación de partículas aurorales de la magnetosfera (que dominan en latitudes altas) y la disipación de corrientes eléctricas. Debido a la alta variabilidad del flujo solar en el ultravioleta extremo, la baja termosfera puede estar gobernada bien por la energía depositada mediante los dos primeros mecanismos mencionados o bien por la baja atmósfera.

El enfriamiento de la baja termosfera pasa de estar dominado por la emisión radiativa del CO₂ por debajo de 100 km a estarlo por la emisión del NO alrededor de 5.3 μm por encima de 120 km. También la emisión en el infrarrojo lejano por parte del oxígeno atómico es importante (*López-Puertas y Taylor*, 2001).

Los fenómenos turbulentos juegan un papel destacado en el balance energético en la mesosfera y la baja termosfera ya que disipan energía cinética produciendo un calenta-

miento neto (Lübken, 1997). En particular, este calentamiento es importante entre 80 y 100 km en el verano polar y su orden de magnitud es comparable a los mecanismos de calentamiento y enfriamiento citados arriba. En el invierno polar, aunque sucede entre 60 y 100 km, su efecto sobre el balance energético es despreciable.

Una de las características interesantes de la atmósfera terrestre es que, en latitudes bajas, la radiación solar absorbida es mayor que la radiación infrarroja liberada y, en latitudes altas, sucede lo contrario (Mlynczak, 2000). En consecuencia, para que el equilibrio exista, es necesario que haya un transporte continuo de energía desde el ecuador hacia los polos. Otra característica es que la templada temperatura de la mesopausa del polo de invierno se mantiene parcialmente mediante liberación de energía en reacciones exotérmicas en las que está involucrado el oxígeno atómico transportado desde la termosfera.

En general, los procesos que gobiernan el balance energético de la mesosfera y la baja termosfera (región MBT) se conocen bien actualmente. Ya Murgatroyd y Goody [1958] llevaron a cabo estudios sobre las fuentes y sumideros de energía. Sin embargo, el entendimiento cuantitativo y global de la importancia de estos mecanismos y de su efecto sobre la estructura y la variabilidad de la mesosfera es pobre. Aunque se ha progresado mucho en el modelado del balance energético de esta región, actualmente no existe un conjunto continuo y global de datos del que se pueda derivar de forma fiable su balance energético. El conocimiento preciso de la temperatura cinética y de las concentraciones de los compuestos atmosféricos es indispensable para derivar características del balance energético de la atmósfera.

1.3. Emisiones del dióxido de carbono en el infrarrojo

En la Figura 1.3 se muestra la transmitancia espectral de la atmósfera terrestre en función de la longitud de onda desde su límite superior hasta la superficie. La atmósfera es opaca en una gran parte del espectro debido a la absorción por parte de gases atmosféricos, aunque existen excepciones. Son las llamadas ventanas en las que la atmósfera es relativamente transparente. Las ventanas están en las regiones del visible (0.39-0.76 μm), de 3.7 μm , de microondas (2-4 mm y >6 mm) y la térmica (8.5-12.5 μm), aunque la

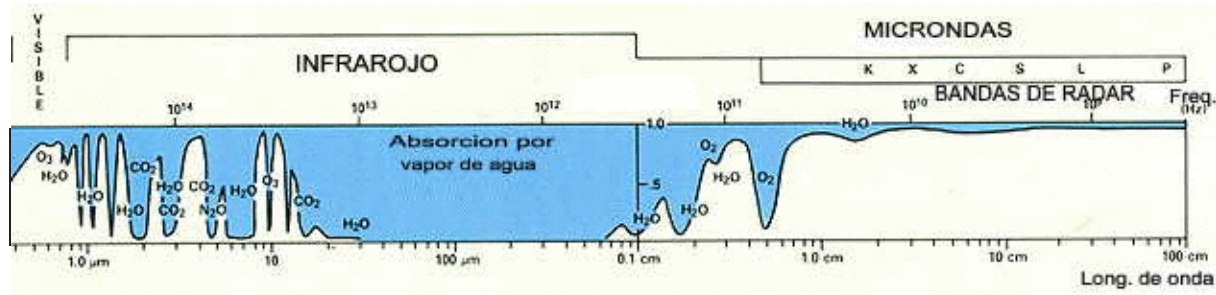


Figura 1.3: Transmitancia atmosférica.

última presenta la absorción por parte del ozono en $9.6 \mu\text{m}$.

El máximo de radiación emitida por el Sol suponiéndolo un cuerpo negro a 5800 K , y según la ley de desplazamiento de Wien, sucede alrededor de 5000 \AA . Como la atmósfera es casi transparente en el visible, la mayor parte de la radiación emitida por el Sol alcanza la superficie terrestre. La superficie devuelve esta energía a la atmósfera fundamentalmente en el infrarrojo aunque también como calor latente, el cual es absorbido en la troposfera. Una parte de esta radiación se transmite directamente al espacio pero la atmósfera absorbe la mayoría. Los constituyentes que la absorben en mayor cantidad son el vapor de agua, el dióxido de carbono, el ozono, el metano y el óxido nítrico, que luego re-emiten parcialmente esta radiación mayoritariamente en el infrarrojo. La radiación emitida por estos compuestos contiene información sobre las características del medio en el que están, es decir, la atmósfera. Este trabajo se centra particularmente en lo referente a las emisiones del CO_2 .

La molécula de dióxido de carbono es simétrica y lineal. Presenta tres modos de vibración (ver Figura 1.4): dos de desplazamiento (simétrico y antisimétrico) y uno de flexión (simétrico). Las frecuencias de estos modos de vibración, expresadas en número de onda, son $\nu_1=1338 \text{ cm}^{-1}$, $\nu_2=667 \text{ cm}^{-1}$ y $\nu_3=2349 \text{ cm}^{-1}$, es decir, con longitudes de onda $7.5 \mu\text{m}$, $15 \mu\text{m}$ y $4.3 \mu\text{m}$ respectivamente. La vibración ν_1 es inactiva en cuanto a absorción y emisión de radiación se refiere ya que no conlleva un cambio en el momento dipolar. El modo ν_2 es doblemente degenerado ya que la flexión se puede llevar a cabo en dos direcciones perpendiculares. En ciertos niveles esta degeneración se elimina mediante la rotación dando lugar al denominado desdoblamiento tipo- l . En el caso del modo ν_3 , al no haber cambio del momento dipolar en dirección perpendicular al eje de la molécula, las transiciones que no suceden con un cambio de estado rotacional están prohibidas.

Estos modos fundamentales de vibración pueden superponerse generando niveles vibracionales combinados. Su nomenclatura describe el número de cuantos de vibración de cada modo de la forma $\text{CO}_2(\nu_1, \nu_2, \nu_3)$. La energía de un cierto nivel vibracional es aproximadamente la suma de múltiplos enteros de las energías de los modos fundamentales.

En la Figura 1.5 se muestra un esquema de los principales niveles vibracionales de la molécula del CO_2 junto con sus bandas vibracionales (López-Puertas y Taylor, 2001). Una banda vibracional corresponde a una transición entre dos niveles vibracionales. En general se habla de bandas ro-vibracionales pues son un conjunto de transiciones entre niveles rotacionales de distintos niveles vibracionales. Entre ellas están las fundamentales, que

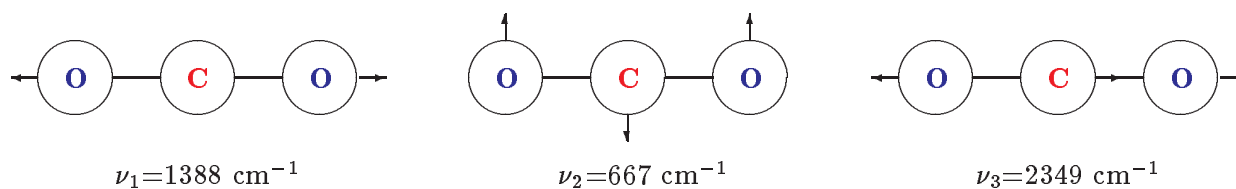


Figura 1.4: Modos fundamentales de vibración de la molécula de dióxido de carbono.

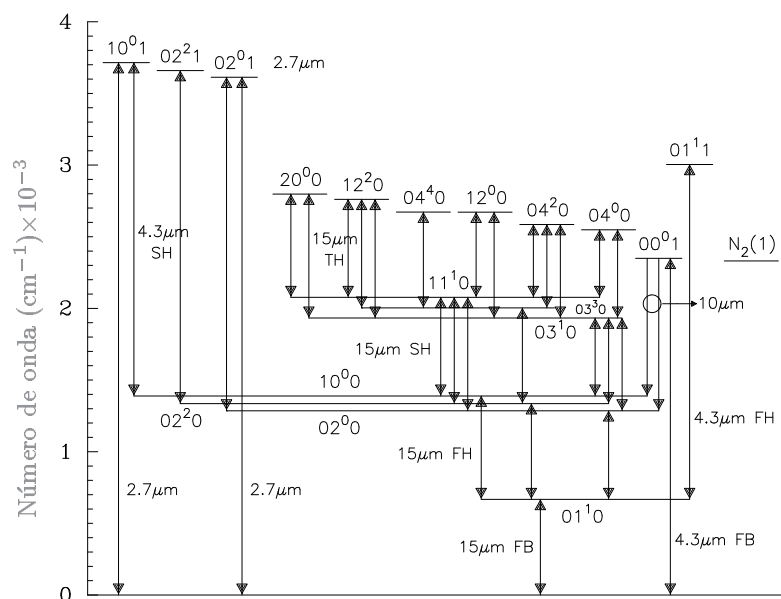


Figura 1.5: Esquema de niveles vibracionales de la molécula de dióxido de carbono y del N₂.

corresponden a transiciones entre el primer nivel excitado de un modo y el nivel base (p.e., $01^1 0-00^0 0$ ó $00^0 1-00^0 0$), las bandas calientes (p.e., $03^1 0-02^0 0$ ó $01^1 1-01^1 0$), correspondientes a transiciones entre dos niveles excitados con un sólo cuanto en juego, y los sobretonos (p.e., $02^0 0-00^0 0$), en las que se pone en juego con más de uno. Otro tipo de bandas son las combinadas. Están relacionadas con transiciones con cambios en más de un modo vibracional tras la absorción ó emisión de un único fotón. Un ejemplo de este tipo de bandas son las denominadas bandas láser (p.e., $00^0 1-02^0 0$ y $00^0 1-10^0 0$). Esto sucede cuando hay una inversión en las poblaciones de los estados superior e inferior de la banda, es decir, cuando el estado más energético (el nivel superior de la banda) está más poblado. En ese caso se favorece la emisión inducida por lo que se amplifica la emisión. Las bandas láser del CO₂ emiten en 9.4 y 10.4 μm .

Por ser simétrica, la molécula de CO₂ no tiene un espectro rotacional puro. Sin embargo, cuando la molécula cambia de nivel ro-vibracional puede sufrir un cambio en el momento angular total formando lo que se denominan las ramas P, Q y R de la banda ro-vibracional. La rama P se genera por las desexcitaciones (excitaciones) en las que hay una transición entre un nivel ro-vibracional hacia un estado de mayor (menor) momento angular total. La rama R se produce tras desexcitaciones (excitaciones) en las que sucede una hacia un estado de menor (mayor) momento angular total. La rama Q se genera mediante transiciones vibracionales sin cambio en el momento angular.

La energía de una transición coincide con la diferencia de las energías de los dos niveles. De este modo, el dióxido de carbono emite en varias longitudes de onda aunque más intensamente alrededor de 15 μm y de 4.3 μm . Estas emisiones dependen de las

poblaciones de los distintos estados vibracionales de la molécula que a su vez dependen de las características del medio. Las medidas de esta radiación se utilizan para derivar propiedades de la atmósfera terrestre. En concreto las emisiones atmosféricas del CO₂ en 15 μm y 4.3 μm se utilizan para medir la temperatura y la concentración de dióxido de carbono. Estas emisiones en la media y alta atmósfera pueden estar afectadas por lo que se denomina no-Equilibrio Termodinámico Local por lo que es importante tener en cuenta dichas condiciones a la hora de analizarlas.

1.3.1. El no-Equilibrio Termodinámico Local

En condiciones de Equilibrio Termodinámico (ET) estricto las propiedades de un recinto aislado están fundamentalmente descritas por una única temperatura T . Por esto,

- La distribución de velocidades moleculares viene dada por la distribución de Maxwell:

$$n = 4\pi N \left(\frac{m}{2\pi kT} \right)^{3/2} v^2 \exp \left(-\frac{mv^2}{2kT} \right), \quad (1.1)$$

donde n es tal que ndv es el número de partículas con velocidades entre v y $v+dv$, N es el número total de partículas, m es la masa de las partículas y k es la constante de Boltzmann;

- La relación entre las poblaciones de los estados vibracionales i y j viene dada por la distribución de Boltzmann:

$$\frac{n_i}{n_j} = \frac{g_i}{g_j} \exp \left(-\frac{E_i - E_j}{kT} \right), \quad (1.2)$$

donde n_i y n_j son las poblaciones de los niveles i y j de energías E_i y E_j y degeneraciones g_i y g_j respectivamente; y

- La intensidad de campo radiativo I_ν así como la función fuente J_ν a cada frecuencia ν vienen dadas por la función de Planck B_ν ,

$$I_\nu = J_\nu = B_\nu = \frac{2h\nu^3}{c^2} \frac{1}{\exp(h\nu/kT) - 1}, \quad (1.3)$$

donde h es la constante de Planck y c la velocidad de la luz,

y todos ellos a la misma temperatura T .

Sea cual sea el cambio externo que se produzca, la redistribución de energía cinética entre las partículas de un paquete de aire en cualquier región de la atmósfera es lo suficientemente rápida como para seguir siempre la distribución de Maxwell. De este modo se puede asumir una cierta temperatura cinética local T a cada altura.

En la atmósfera terrestre, sin embargo, esta temperatura no es constante con la altura sino que está definida de modo local. Esto es lo que se denomina Equilibrio Termodinámico Local (ETL). Al igual que en ET, la distribución de velocidades es maxwelliana, la población de los niveles siguen la distribución de Boltzmann y la función fuente es igual a la del cuerpo negro. Sin embargo, en ETL el campo radiativo no coincide necesariamente con la función de Planck. Luego, a diferencia del Equilibrio Termodinámico estricto, en ETL no tiene por qué cumplirse la ley de Kirchhoff ($I_\nu \neq J_\nu$), es decir, no tiene necesariamente que haber equilibrio radiativo monocromático. Esto tiene una consecuencia inmediata que no sucede en ET estricto. Teniendo en cuenta la definición de la tasa de calentamiento:

$$h = 4\pi S n (I_\nu - J_\nu), \quad (1.4)$$

donde n es la densidad de absorbente y S es la intensidad de la banda, las pérdidas o ganancias netas de energía radiativa son posibles en ETL, siempre que las colisiones entre moléculas sean lo suficientemente rápidas como para suplir ese cambio de modo que se redistribuya la energía cinética entre los estados. Bajo estas condiciones, la temperatura puede ser unívocamente definida de tal forma que los estados vibracionales están acoplados con ella a través de las colisiones.

Sin embargo, a medida que se asciende en altura, la presión y la densidad disminuyen exponencialmente. Las colisiones entre moléculas son entonces poco frecuentes y comienzan a dominar los procesos radiativos. La distribución de las poblaciones de los niveles excitados de las moléculas no es únicamente función de la temperatura local sino que depende también de la absorción/emisión de radiación de otras capas atmosféricas (transporte radiativo) y del intercambio de energía entre partículas (colisiones de intercambio de energía no necesariamente cinética, emisión y absorción radiativas). Es lo que se denomina no-Equilibrio Termodinámico Local (no-ETL). Aunque estos mecanismos también tienen lugar en ETL, en ese caso las colisiones son lo suficientemente frecuentes como para redistribuir la energía y ajustar las poblaciones a la distribución de Boltzmann a la temperatura cinética local. En otras palabras, los efectos de no-ETL están presentes siempre que los tiempos de vida radiativos de los estados sean comparables o menores que el tiempo medio entre colisiones.

La mayor parte de los estados vibracionales del CO_2 están bajo condiciones de no-ETL en la mesosfera y todos ellos en la baja termosfera, es decir, sus poblaciones no sólo dependen de la temperatura cinética local. Esto se debe tener en cuenta al analizar las emisiones del CO_2 en $15 \mu m$ y $4.3 \mu m$ ya que son función de dichas poblaciones.

Por todo ello, si se comprenden y se modelan de forma adecuada los mecanismos responsables de poblar los niveles vibracionales, se pueden derivar tanto la temperatura cinética como la abundancia de CO_2 a partir de las emisiones del CO_2 alrededor de $15 \mu m$ y $4.3 \mu m$.

1.4. El sondeo remoto de la atmósfera

Las técnicas de observación de la atmósfera terrestre son:

- a) *Extractivas*: Consisten en la recogida de muestras para su posterior análisis en el laboratorio. Son de alta sensibilidad pero de muy pobre cobertura temporal y espacial y son inadecuadas para observar en tiempo real.
- b) *In situ*: Consisten en la medida directa en la localización del instrumento. Tienen sensibilidad menor que la anterior pero son mejores para la observación en tiempo real. Tiene también una cobertura espacial y temporal muy limitada.
- c) *Sondeo remoto*: Consisten en medidas a distancia que proporcionan información de la región observada. Si el instrumento está a bordo de un satélite, ofrecen una amplia cobertura tanto espacial como temporal. La principal desventaja de estos instrumentos es que la interpretación de las medidas suelen ser complicada.

El sondeo remoto es el más adecuado si la intención es observar la atmósfera de modo regular y global. Esta técnica se puede llevar a cabo desde plataformas terrestres, o espaciales como satélites, cohetes, aviones, etc. Los instrumentos a bordo de plataformas espaciales son los más idóneos para realizar observaciones a escala global. Las aplicaciones son de lo más variadas, a saber, meteorología, climatología, agricultura, forestación, botánica, geología, geodesia, hidrología, oceanografía, glaciología, topografía, control de desastres, arqueología, etc.

Las técnicas de sondeo remoto de la atmósfera se pueden clasificar en base a:

- a) La fuente de radiación, en cuyo caso se dividen en pasivas o activas en función de si la radiación utilizada para realizar las medidas proviene de una fuente natural (sol, estrella, atmósfera) o artificial (láseres) respectivamente;
- b) El tipo de interacción entre la radiación y la atmósfera como emisión, dispersión, absorción ó reflexión; y
- c) La región espectral en que se observa.

La observación en el infrarrojo desde instrumentos en plataformas espaciales es una de las más elegidas ya que es la región espectral en la que la atmósfera emite predominantemente. A partir de estas medidas se pueden estudiar características de su estructura térmica, química y dinámica.

El sondeo remoto de la atmósfera desde plataformas espaciales se puede realizar observando en (ver Figura 1.6):

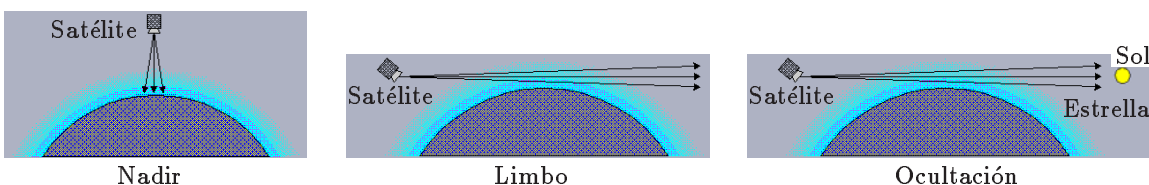


Figura 1.6: Técnicas de sondeo remoto desde el espacio.

- Nadir o sondeo vertical, en el que el instrumento mira hacia abajo en dirección perpendicular a la superficie y por tanto mide la radiación que sale de la atmósfera y la superficie en dirección vertical;
- Limbo o tangencialmente, en el que el instrumento mira al horizonte de la atmósfera y por tanto mide la radiación que sale en la dirección tangencial; y
- Mediante técnicas de ocultación, en la que el instrumento mide el espectro de absorción del Sol, de cualquier otra estrella o de la luna a través de la atmósfera.

La observación en el limbo es la más adecuada para medir las emisiones de la poco densa media-alta atmósfera. Por una parte, proporciona una elevada sensibilidad a pequeñas cantidades de gas debido a que, al ser el camino geométrico más largo que en nadir, la señal medida es mayor, aún proviniendo de gases pocos abundantes. Por otra parte, proporciona una elevada resolución vertical porque, debido a su geometría y a la disminución exponencial de la densidad, la mayor contribución a la radiancia proviene de la región inmediatamente superior a la altura tangente. Adicionalmente, la emisión de fondo proviene del frío espacio y en consecuencia es mínima. Esta técnica ha sido la más utilizada en los instrumentos diseñados en los últimos años.

Los orígenes del sondeo remoto se remontan a 1858, año en que Félix Tournachon realizó con éxito la primera fotografía aérea desde un globo situado a 80 m. Una de las fotografías más antiguas de este tipo aún conservada data de 1860 y fue realizada desde un globo anclado en la ciudad de Boston (ver Figura 1.7).

Alrededor de esa época Julio Verne escribió sobre observación aérea de sistemas de nubes. Al final del siglo XIX se utilizó un globo para medir la presión, la temperatura y la humedad en la baja atmósfera. Esto llevó al, en aquel entonces, sorprendente descubrimiento de la tropopausa, que situaron entre 10 y 15 km. En el año 1909 se llevaron a cabo las primeras fotografías desde aviones y ya en los años 40 se lanzaron los primeros cohetes para sondear la alta atmósfera. En 1954 el comité del Año Geofísico Internacional (IGY) retó a los países del mundo a que lanzaran satélites con instrumentos científicos para así complementar las observaciones de la Tierra realizadas por instrumentos en el suelo, globos y cohetes.

El 4 de Octubre de 1957 la Unión Soviética fue pionera en este campo al lanzar el primer satélite artificial, el Sputnik I equipado para medir la temperatura y para emitir



Figura 1.7: Fotografía de 1860 de la ciudad de Boston realizada desde un globo.

señales de radio. Orbitó durante 92 días a 216 km de altura completando 1400 órbitas. El Sputnik III, lanzado en Mayo de 1958, llevaba una carga de instrumentos de 970 kg para medir la presión y la composición de la atmósfera así como la radiación solar, el campo magnético, los rayos cósmicos, los impactos de micrometeoritos y la temperatura del satélite.

Fue a principios de ese mismo año cuando los Estados Unidos lanzaron el Explorer-1 para realizar estudios similares. En 1960 el TIROS-1 ('Television and Infrared Observational Satellite') estaba en órbita y fue el primer satélite exclusivamente meteorológico que demostró la eficacia del estudio de la atmósfera a partir de medidas de instrumentos en el espacio. Cuatro años más tarde se lanzó el primero de la serie de satélites científicos Nimbus, dedicados a medidas atmosféricas experimentales. Portaban radiómetros infrarrojos y en microondas, sondeadores de ozono, escáneres, etc. El último de ellos, Nimbus-7 (1978) proporcionó datos globales significativos de recubrimiento de mar y hielo, temperatura atmosférica, distribución de constituyentes, balance energético y temperatura de la superficie.

Desde 1957 hasta 1986 se realizaron un total de 2869 lanzamientos de satélites de modo que a principios de 1989 había 1809 en órbita. En media se han lanzado unos 120 satélites cada año de los cuales aproximadamente un 20 % se han dedicado a fines relacionados con la física atmosférica.

En 1991 se lanzó el satélite UARS ('Upper Atmosphere Research Satellite'). Era la primera misión de la 'National Aeronautics Space Agency' (NASA) con algunos instrumentos para observar la media-alta atmósfera. Aunque su objetivo principal era llevar a cabo un estudio extenso y sistemático de la estratosfera, ha estado proporcionando nuevos datos sobre la química, los vientos y las fuentes y sumideros de energía de la mesosfera y la termosfera hasta la fecha. Desde entonces se han lanzado otros satélites como el

CRISTA-SPAS de la Universidad de Wuppertal y el ENVISAT de la ESA ('European Space Agency') o instrumentos como el ATMOS en la 'Spacelab 3' de NASA con el fin de ampliar los conocimientos sobre el comportamiento de la atmósfera media-alta. A finales del año 2001, el satélite TIMED ('Thermosphere, Ionosphere, Mesosphere Energetics and Dynamics'), a bordo del cual viaja el instrumento SABER, fue puesto en órbita con el objetivo fundamental de observar la media y alta atmósfera terrestre. Este satélite es pionero en este campo y permitirá caracterizar esta región, frontera de nuestro conocimiento de la atmósfera terrestre.

1.4.1. El instrumento SABER: Objetivos y funcionamiento

Desde su lanzamiento el 7 de diciembre del año 2001 a las 7:07 a.m., SABER ('Sounding of the Atmosphere using Broadband Emission Radiometry') está midiendo ininterrumpidamente las emisiones atmosféricas en el infrarrojo. SABER es un instrumento que, junto a GUVI ('Global Ultraviolet Imager'), TIDI ('TIMED Doppler Interferometer') y SEE ('Solar Extreme Ultraviolet Experiment') están alojados en el satélite TIMED ('Thermosphere, Ionosphere, Mesosphere Energetics and Dynamics'). Su fin es caracterizar las estructuras física, dinámica, energética y térmica de la mesosfera, la baja termosfera y la ionosfera terrestres, es decir, la región denominada MBTI situada entre 60 y 180 km. Este satélite fue lanzado desde la base aérea 'Vandenberg' en California, EE.UU., en el vehículo de lanzamiento Delta II con el satélite Jason-1. Dos horas y cinco minutos después fue puesto en una órbita circular semi-polar con inclinación de 74.1° situada a 625 km de altura.

La región MBT constituye la interfaz entre el espacio y la atmósfera baja. Por esto, es crucial estudiar su comportamiento para comprender los efectos del Sol (radiación y materia) sobre la atmósfera terrestre (baja atmósfera). SABER se diseñó con el objetivo de ampliar nuestro conocimiento sobre esta región atmosférica y así comprender cuantitativamente los procesos que gobiernan su variabilidad temporal y espacial.

El instrumento fue diseñado y fabricado en el 'Space Dynamics Laboratory' de la 'Utah State University' bajo contrato del 'NASA Langley Research Center' y con la colaboración de la 'Hampton University' y 'G&A Technical Software Inc.'

SABER es un radiómetro de banda ancha que observa las emisiones infrarrojas atmosféricas en el limbo. La herencia científica de SABER proviene de otros instrumentos lanzados al espacio con anterioridad como el LRIR ('Limb Radiance Inversion Radiometer') a bordo de Nimbus 6, LIMS ('Limb Infrared Monitor of the Stratosphere') y SAMS ('Stratospheric and Mesospheric Sounder') ambos a bordo de Nimbus 7, SAFIRE ('Spectroscopy of the Atmosphere Using Far Infrared Emission') a bordo de EOS ('Earth Observing System') e ISAMS ('Improved Stratospheric and Mesospheric Sounder'), CLAES ('Cryogenic Limb Array Etalon Spectrometry') y HALOE ('Halogen Occultation Expe-

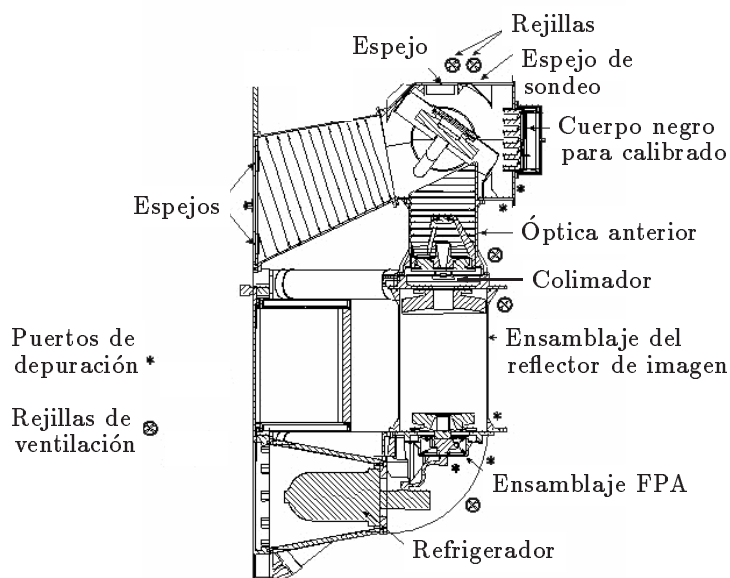


Figura 1.8: Vista lateral del instrumento SABER y sus principales componentes.

riment'), los tres a bordo de UARS ('Upper Atmosphere Research Satellite'). SABER ha sido optimizado para medir en el limbo con un campo de visión de 2 km y extender el intervalo de alturas de los instrumentos previos.

Su cobertura latitudinal es de 83°N - 52°S cuando mide en el modo de observación del norte y 52°N - 83°S cuando lo hace en el modo de observación del sur. Estos modos se alternan cada 60 días. Por tanto, realiza medidas continuas entre 52°N y 52°S y cada dos meses en cada región polar. El instrumento realiza barridos verticales desde los 10 hasta los 200 km cada 52 s en saltos de 300-400 m lo que supone una media de aproximadamente 1500 perfiles de radiancia diarios en cada uno de sus diez canales.

Este instrumento mide la radiancia atmosférica entre 1.27 y $15\ \mu\text{m}$ en 10 canales. La señal se mide en cada altura tangente por los diez detectores tras lo que se amplifica, filtra, y formatea en paquetes de datos para su posterior transferencia a Tierra. La altura tangente a la que observa se determina a través del procesado de los perfiles de radiancia en los tres canales del CO_2 en $15\ \mu\text{m}$.

El radiómetro, de 61.7 kg de peso y de $77 \times 103 \times 60$ cm de tamaño, se muestra en la Figura 1.8. Consta de un telescopio Cassegrain, los filtros en el primer foco y un convertidor de imagen para centrar la radiación en una distribución plano-focal (FPA). Ésta está constituida a su vez por los filtros espectrales, los detectores y los pre-amplificadores enfriados a 75 K mediante un refrigerador criogénico. Este montaje óptico ha sido diseñado para eliminar cualquier señal que no provenga del campo de visión instantáneo del instrumento.

El sistema se mantiene a una temperatura de unos 240 K mediante un radiador para

reducir posibles contaminaciones de origen térmico. El instrumento está térmicamente aislado del resto de la estructura del satélite. El refrigerador y los demás componentes electrónicos disipan el calor al espacio a través del llamado radiador de placa base.

SABER además posee dos fuentes de radiación para hacer posible una calibración en órbita: un cuerpo negro, al que puede apuntar el espejo del telescopio antes de cada sondeo, y un par de lámparas de filamento, que sirven para calibrar los canales de onda corta.

Cada uno de los 10 detectores de SABER mide en diferentes regiones espectrales (ver Tabla 1.1) con el objetivo de obtener distintas características de la región MBT. En la Tabla 1.2 se muestra el intervalo de frecuencias en el que miden, la radiancia equivalente en ruido (NER) y la altura para la que la relación señal ruido es la unidad para cada uno de los canales.

Los diez canales fueron diseñados con el propósito de determinar la estructura térmica y distribución de constituyentes en la mesosfera y la baja termosfera a escala global así como sus variaciones, la abundancia de especies trazadoras química y radiativamente activas, la influencia de la química y la dinámica sobre la estructura atmosférica, la importancia de los procesos polares y el acoplamiento entre regiones atmosféricas y entre los procesos químicos, radiativos y dinámicos. A continuación se describen más detalladamente estos objetivos.

Tabla 1.1: Características de los diez canales del instrumento SABER y aplicaciones.

Canal	Parám.	λ (μm)	Información atmosférica y aplicaciones	Altura (km)
1, 2 y 3	CO ₂	15	T _k , altura y presión, enfriamiento infrarrojo, naturaleza no-ETL del CO ₂ .	10-105
4	O ₃	9.6	[O ₃], enfriamiento infrarrojo, calentamiento solar, estudios de dinámica y química, Inferencia de [O].	15-100 50-85
5	H ₂ O	6.3	Fuente de hidrógeno par, trazador dinámico, estudios de nubes mesosféricas polares (PMC).	15-80
6	NO	5.3	Enfriamiento termosférico, trazador dinámico.	90-180
7	CO ₂	4.3	[CO ₂], calentamiento solar en la alta mesosfera, trazador dinámico a 90 km, procesos aurorales.	80-150
8 9	OH	2.0 1.6	Inferencia de [O] y [H], calentamiento químico, pérdidas energéticas quemiluminescentes, estudios de dinámica, proceso polares, [OH] inferida.	80-100
10	O ₂ (¹ Δ)	1.27	[O ₃] diurna, pérdida energética, [O] nocturna inferida.	55-105

Tabla 1.2: Características espectrales de los canales de SABER.

Canal	Nombre	Filtro (cm^{-1})	Ruido ($\text{Wm}^{-2}\text{sr}^{-1}$)	z con $S/N=1^a$	
				día	noche
1	CO ₂ -N (estrecho)	606-714	2.6×10^{-4}	130	130
2	CO ₂ -W (ancho)	568-811	2.9×10^{-4}	130	130
3	CO ₂ -W (ancho)	567-807	3.3×10^{-4}	130	130
4	O ₃ 9.6 μm	981-1184	4×10^{-5}	100	100
5	H ₂ O 6.3 μm	1306-1628	2.3×10^{-5}	90	80
6	NO 5.3 μm	1837-1988	1.4×10^{-6}	>250	250
7	CO ₂ 4.3 μm	2284-2409	7.4×10^{-7}	200	140
8	OH(A)	4435-5847	1.2×10^{-6}	105	105
9	OH(B)	5676-6476	3.2×10^{-6}	105	105
10	O ₂ (¹ Δ) 1.27 μm	7599-8071	2.4×10^{-6}	105	105

^aAltura (en km) para la que la relación señal-ruido es la unidad.

Estructura térmica y balance energético

El conocimiento preciso de la estructura térmica es fundamental para cualquier estudio sobre la atmósfera ya que describe la cantidad de energía que alberga.

A partir de las medidas de la emisión de dióxido de carbono en 15 μm , se deriva la temperatura cinética de la mesosfera y la baja termosfera. Para invertir la temperatura es necesario conocer la concentración de CO₂. SABER también mide las emisiones en 4.3 μm , de las que se deriva la abundancia de CO₂.

La principal mejora que SABER presenta frente a instrumentos anteriores es la extensión del intervalo de altura hasta 105 km (día y noche) en el caso de la temperatura y hasta ~ 160 km (día) en el caso del CO₂, ambos de manera global. Los perfiles de temperatura se utilizarán para realizar estudios sobre el balance energético, para determinar la respuesta de esta región atmosférica a suministros energéticos externos (sol, auroras) y para ampliar los conocimientos sobre dinámica (propagación de ondas) y fotoquímica en esta región.

SABER proporciona medidas globales de la emisión de CO₂ en 15 μm que, junto a la de O₃ en 9.6 μm , es necesaria para estudiar el balance radiativo en el infrarrojo en la atmósfera media, ya que de ellas dependen tanto el enfriamiento radiativo como el calentamiento solar. Además, proporciona medidas de NO en 5.3 μm , importante para el balance por encima de 110 km.

Tras la inversión de las medidas en 1.6 y 2.0 μm se puede determinar la concentración del radical OH, importante para comprender el calentamiento químico en la alta mesosfera y los mecanismos de no-ETL que afectan al CO₂ durante la noche.

Estructura química

Para entender la química de la atmósfera es necesario conocer con gran precisión las concentraciones de algunos constituyentes clave.

Las medidas de la emisión en $9.6 \mu\text{m}$ proporcionan la distribución de ozono de día y de noche y se tiene información adicional durante el día a partir de la emisión del $\text{O}_2(^1\Delta)$ en $1.27 \mu\text{m}$. Además, es importante conocer la abundancia de especies que destruyen el ozono en la atmósfera media. En particular, los ciclos catalíticos del HO_x destruyen el O_3 y son controlados por gases como el vapor de agua (principal fuente de radicales de hidrógeno impar, que reaccionan con el oxígeno impar). SABER mide radiancias en $6.3 \mu\text{m}$ para determinar la distribución de H_2O . Estos datos serán necesarios para poder determinar la posible correlación entre vapor de agua y ozono a escala global.

La concentración del radical hidroxilo, que se infiere de las medidas de emisiones de sus estados excitados en 1.6 y $2.0 \mu\text{m}$, también es necesaria para establecer la consistencia de los estudios de la química de la media atmósfera.

Dinámica y transporte

Una de las cuestiones abiertas en este campo es el papel que juega la advección por la circulación meridional en relación con el transporte por procesos de difusión turbulenta. Algunas de las especies trazadoras que proporcionan información sobre estos efectos son el CO_2 y el H_2O , cuyas distribuciones verticales se pueden determinar a partir de los datos suministrados por SABER. También la distribución latitudinal de NO podrá dar respuesta a la posible existencia de la región D en el polo invernal como consecuencia del transporte de este constituyente por ondas planetarias desde zonas de aurora hasta zonas de invierno polar. Por otra parte, el instrumento facilita datos anuales sobre el ozono que serán utilizados para estudiar la oscilación semi-anual mesosférica del viento zonal y la temperatura (SAO), comportamiento que se refleja en variaciones semi-anuales del ozono y su relación con las ondas planetarias.

Procesos polares

Actualmente, muchos de los procesos que tienen lugar a altas latitudes en la mesosfera y la baja termosfera no se entienden completamente debido a la ausencia de datos de esta región atmosférica. Entre ellos están los procesos relacionados con auroras, el acoplamiento entre la termosfera y la mesosfera, y la respuesta a la variación solar así como los procesos que originan la inversión meridional en la temperatura de la mesopausa (con bajas temperaturas en el polo de verano y altas en el de invierno).

Las medidas de H_2O y temperatura durante el verano polar, permitirán el estudio de las nubes mesosféricas polares. Las medidas de NO y su transporte a la atmósfera media, tras su producción en el invierno polar, permitirá estudiar el impacto de los procesos aurorales sobre el balance del ozono y sobre los compuestos de nitrógeno impar. También

se realizarán estudios sobre la influencia de la variabilidad solar tanto en la abundancia de ozono como en la estructura térmica.

El instrumento SABER está proporcionando las medidas de temperatura y concentración de constituyentes atmosféricos para que, conjuntamente con medidas de vientos y fuentes y sumideros de energía de los otros instrumentos de la misión TIMED, se completen los estudios de balance energético, dinámica y química globales de la mesosfera en escalas de tiempo del orden de meses y estaciones. Este instrumento es pionero en proveer este tipo de información a escala global y en condiciones tanto diurnas como nocturnas.

Los canales en $15\ \mu\text{m}$ (canales 1, 2 y 3) y $4.3\ \mu\text{m}$ (canal 7) miden fundamentalmente las emisiones del dióxido de carbono en dichas longitudes de onda. En la Figura 1.9 se muestra la respuesta espectral de dichos canales. Están centrados en la longitud de onda donde se producen las emisiones del CO_2 tras desexcitaciones de los modos ν_2 y ν_3 respectivamente. Por ello son sensibles a las poblaciones de dichos niveles que, a su vez, son sensibles entre otros a la temperatura cinética y a la concentración de CO_2 . Mediante la inversión de las medidas en estos canales se pueden obtener la temperatura y la abundancia de CO_2 , ambos indispensables para realizar cualquier estudio del balance energético, de la química y de la dinámica de la atmósfera terrestre.

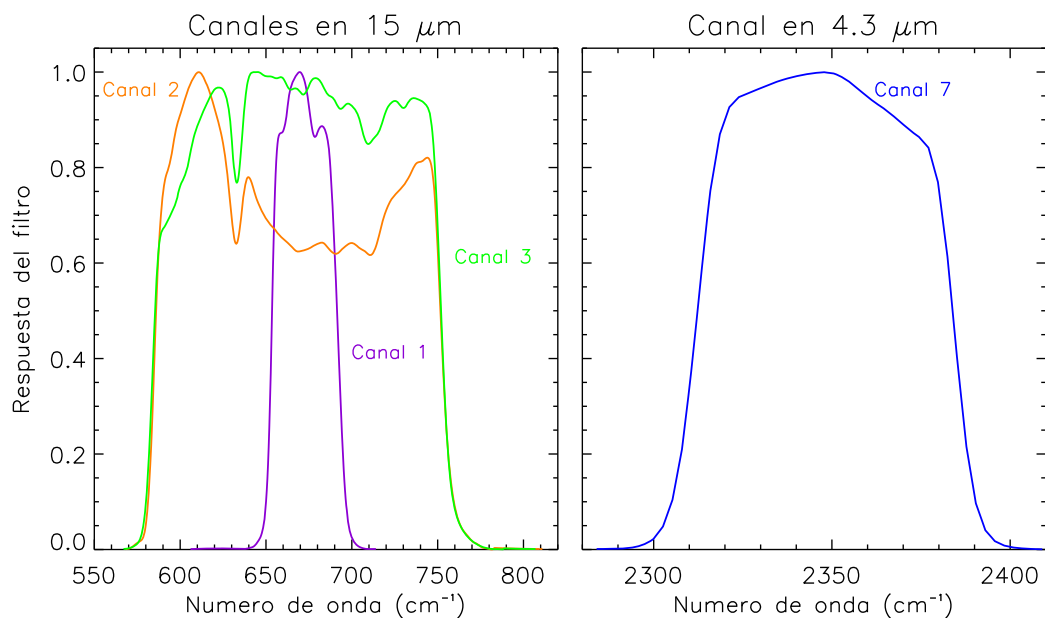


Figura 1.9: Respuesta en frecuencia de los canales en $4.3\ \mu\text{m}$ (1: violeta; 2: naranja; 3: verde) y el canal en $15\ \mu\text{m}$ (azul).

1.5. Motivación y estructura de este estudio

La media-alta atmósfera terrestre es la región atmosférica menos estudiada. Problemas como la razón de la fría mesopausa en el verano polar o la altura a la que se sitúa la homopausa o los mecanismos de excitación vibracional de ciertas moléculas o la respuesta de esta región a variaciones bruscas de radiación solar no están del todo resueltos en la actualidad. El instrumento SABER constituye una oportunidad sin precedentes de construir un extenso conjunto de medidas de esta región a escala global y durante el día y la noche. SABER mide en el limbo las emisiones de la atmósfera terrestre entre 1.27 y 15 μm desde la estratosfera hasta la termosfera de manera continuada desde su lanzamiento a finales del año 2001.

El conocimiento preciso de la temperatura cinética es esencial para resolver los problemas planteados y para entender el comportamiento de la media-alta atmósfera en cuanto a balance energético, química y dinámica se refiere. El conocimiento de la abundancia de dióxido de carbono es necesario, no sólo para determinar su distribución y evolución a lo largo de los años y para obtener la temperatura por encima de 80 km, sino para cuantificar el enfriamiento en el infrarrojo del cual es el principal responsable. Ambos son necesarios para comprender y caracterizar los procesos de no-ETL que tienen lugar en esta región atmosférica. Mediante la inversión de las medidas de SABER en 15 μm y 4.3 μm se pueden determinar la estructura térmica y la distribución de CO_2 en la media y alta atmósfera.

Este trabajo se enmarca dentro de los objetivos de SABER y constituye parte de la tarea de apoyo científico del instrumento, especialmente en lo relacionado con las emisiones del CO_2 . Se pretenden cumplir los siguientes objetivos:

- Verificar la posibilidad de invertir la T_k y el CO_2 en condiciones de no-ETL (es la primera vez que se pretende realizar dicha inversión);
- Caracterizar los errores sistemáticos que se cometen en la derivación de la T_k y la abundancia de CO_2 bajo condiciones de no-ETL;
- Validar la temperatura cinética invertida de las medidas de SABER en 15 μm ; y
- Ampliar nuestro conocimiento sobre los procesos de excitación de los estados vibracionales del CO_2 en 4.3 μm durante la noche.

Los fundamentos teóricos y la descripción de los códigos utilizados en esta memoria se resumen en el Capítulo 2.

El estudio de las fuentes de error de las magnitudes físicas derivadas de las medidas de este instrumento es fundamental para determinar la calidad de las mismas. Una de las consecuencias de extender los intervalos de altura de los instrumentos previos a SABER es que los códigos de inversión necesitan incluir efectos de no-ETL. En concreto,

las emisiones en $15 \mu\text{m}$ y $4.3 \mu\text{m}$ están afectadas por procesos de no-ETL. Las magnitudes invertidas dependen de los parámetros utilizados en los modelos, como son las tasas de colisiones entre moléculas en la atmósfera. Estas constantes son fundamentales para determinar la población de los estados vibracionales del CO_2 , responsables de las emisiones en dichas longitudes de onda. El análisis de los errores sistemáticos asociados a la temperatura cinética y al dióxido de carbono invertidos es necesario. En el Capítulo 3 se estudia la viabilidad de la inversión en no-ETL y los errores en estas magnitudes debidos a incertidumbres en las constantes colisionales.

La tarea de validación de la temperatura invertida de las medidas de SABER en $15 \mu\text{m}$ es un estudio indispensable previo a la utilización de los datos en estudios energéticos, químicos o dinámicos. Uno de los aspectos de la validación consiste en la comparación de la temperatura con medidas de otros instrumentos. En ese sentido los lídares son instrumentos que proporcionan la temperatura con una precisión y una resolución elevadas por lo que son muy adecuados para realizar la validación. En el Capítulo 4 se muestran las comparaciones con seis lídares situados en diferentes localizaciones y se determina la calidad de las medidas de temperatura de SABER.

Una de las ventajas de SABER es que mide continuamente las emisiones atmosféricas del CO_2 en $4.3 \mu\text{m}$, incluidas las nocturnas. Hasta la fecha muy pocos instrumentos han sido capaces de medir estas emisiones durante la noche y ninguno con la alta relación señal-ruido de SABER. SABER mide además las emisiones del radical hidroxilo y la presión-temperatura, todas simultáneamente. El hecho de disponer de un amplio conjunto de estas medidas permite determinar las fuentes de excitación de los estados vibracionales $\text{CO}_2(\nu_3)$. Conocer los mecanismos que condicionan las poblaciones de estos estados es útil no sólo para derivar la abundancia de CO_2 en condiciones nocturnas sino por el mero conocimiento de los procesos que tienen lugar en la atmósfera terrestre. En el Capítulo 5 se lleva a cabo un análisis exhaustivo de las medidas nocturnas en $4.3 \mu\text{m}$ en condiciones no-aurorales para establecer los mecanismos, en este caso de origen no-ETL, que pueblan los estados vibracionales $\text{CO}_2(\nu_3)$.

En el último capítulo se enumeran las conclusiones de esta memoria.

Capítulo 2

Fundamentos teóricos

Resumen

En este capítulo se describen los fundamentos teóricos y la metodología utilizada. Tras introducir los conceptos básicos de transporte radiativo, se detallan las características del código de inversión simultánea de temperatura cinética y dióxido de carbono en no-ETL de las medidas de SABER en $15 \mu\text{m}$ y $4.3 \mu\text{m}$, y del modelo de transporte radiativo y del modelo de no-ETL utilizados para simular las radiancias nocturnas de SABER en $4.3 \mu\text{m}$. Asimismo se describe la inversión de las medidas de emisiones atmosféricas del hidroxilo en poblaciones de sus niveles vibracionales llevada a cabo en esta memoria.

2.1. Introducción

Cuando la radiación electromagnética atraviesa un medio sufre un cierto cambio debido a su interacción con la materia: puede atenuarse debido a la absorción y la dispersión y/o puede aumentar debido a la emisión y a la radiación dispersada proveniente de otras direcciones.

En ese sentido, la variación en la intensidad específica de campo radiativo en el punto s' en la dirección \mathbf{s} al atravesar el elemento ds , despreciando los términos de dispersión¹, viene dada por:

$$\frac{dI_\nu(s', \mathbf{s})}{ds} = -k_\nu n_a I_\nu(s', \mathbf{s}) + k_\nu n_a J_\nu(s', \mathbf{s}), \quad (2.1)$$

donde k_ν es el coeficiente de absorción, n_a es la densidad de moléculas y J_ν es la función fuente. Esta es la denominada ecuación de transporte radiativo. El primer sumando del segundo término da cuenta de la extinción de la radiación y el segundo de la emisión.

Para resolver esta ecuación se define el espesor óptico monocromático entre los puntos s' y s como:

$$\tau_\nu(s', s) = \int_{s'}^s k_\nu(s'') n_a(s'') ds''. \quad (2.2)$$

¹La dispersión de radiación en el infrarrojo, única región espectral en la que se aplica esta ecuación en esta memoria, es despreciable.

Entonces se puede escribir la Ecuación 2.1 como

$$-\frac{dI_\nu(s', \mathbf{s})}{d\tau_\nu(s', \mathbf{s})} = -I_\nu(s', \mathbf{s}) + J_\nu(s', \mathbf{s}) \quad (2.3)$$

y multiplicando esta ecuación por $e^{-\tau_\nu}$ e integrando entre el origen s_0 y s se obtiene la denominada solución formal:

$$I_\nu(s, \mathbf{s}) = I_\nu(s_0, \mathbf{s})e^{-\tau_\nu(s_0, s)} + \int_{s_0}^s J_\nu(s', \mathbf{s})e^{-\tau_\nu(s', s)}k_\nu(s')n_a(s')ds'. \quad (2.4)$$

El primer término de esta ecuación representa la extinción por absorción a lo largo del medio de la radiación en el origen y el segundo término la contribución a la emisión a lo largo del camino desde s_0 hasta s .

Basta con conocer la densidad del medio, el coeficiente de absorción y la función fuente a lo largo del camino para calcular la intensidad específica de campo radiativo, también denominada radiancia monocromática.

Como se ha mencionado en el capítulo anterior, la función fuente coincide con la función de Planck en condiciones de Equilibrio Termodinámico y Equilibrio Termodinámico Local (ETL). Bajo estas condiciones, el coeficiente de absorción depende también únicamente de la temperatura cinética y describe las propiedades de absorción y de emisión de la materia a una cierta frecuencia. Sin embargo, en la atmósfera media-alta los estados excitados de las moléculas no están necesariamente bajo condiciones de ETL. En ese caso, la función fuente y el coeficiente de absorción se caracterizan de forma más complicada considerando los procesos de absorción, de emisión espontánea, de emisión inducida y también los procesos colisionales y otros como reacciones de quemiluminiscencia. Para simplificar el razonamiento se desarrolla aquí la resolución del problema para el caso de dos estados vibracionales excitados. La formulación puede ser extendida a casos donde haya más estados involucrados (ver, p.e., *López-Puertas y Taylor, 2001*).

Sea una banda de emisión o absorción de energía ν_0 de una molécula con nivel vibracional superior (de mayor energía) 2 e inferior (de menor energía) 1. Los mecanismos de origen radiativo que pueden afectar a la población de estos niveles son: a) emisión espontánea, en la que se produce un fotón al desexcitarse una molécula; b) emisión inducida, en la que un fotón induce la emisión de otro fotón idéntico al interactuar con un estado excitado; y c) absorción, en la que se produce una excitación de una molécula al absorber un fotón. Se caracterizan mediante los coeficientes de Einstein A_{21} , B_{21} , B_{12} respectivamente. Estos coeficientes dependen de las propiedades cuántico-mecánicas de las moléculas y las transiciones. Suponiendo que la frecuencia de las líneas rotacionales se puede aproximar a la frecuencia del centro de la banda ro-vibracional, las relaciones entre ellos son:

$$\frac{A_{21}q_{r,s}}{B_{21}q_{r,i}} = \frac{2h\nu^3}{c^2} \text{ y } \frac{B_{12}q_{r,a}}{B_{21}q_{r,i}} = \frac{g_2}{g_1}, \quad (2.5)$$

donde ν es la frecuencia del fotón emitido o absorbido, h es la constante de Planck, c es la velocidad de la luz, g_1 y g_2 son las degeneraciones de los niveles 1 y 2 respectivamente, y $q_{r,s}=n_{2,J}/n_2$, $q_{r,i}=n_{2,J'}/n_2$ y $q_{r,a}=n_{1,J''}/n_1$ son los factores normalizados de la distribución de estados rotacionales de los niveles vibracionales correspondientes, siendo $n_{i,J}$ la población del estado rotacional J del nivel vibracional i involucrado.

La diferencia entre la tasa a la que el nivel excitado 2 se puebla y la tasa a la que se despuebla mediante la transición $2 \rightarrow 1$ es proporcional al cambio en intensidad media \bar{I}_ν del campo radiativo, es decir,

$$\frac{d\bar{I}_\nu}{ds} = \frac{h\nu}{4\pi} \left[n_2 A_{21} q_{r,s} + n_2 B_{21} q_{r,i} \bar{I}_\nu - n_1 B_{12} q_{r,a} \bar{I}_\nu \right], \quad (2.6)$$

que utilizando las relaciones de Einstein (Ecuaciones 2.5) se puede escribir:

$$\frac{d\bar{I}_\nu}{ds} = \frac{h\nu B_{12} q_{r,a}}{4\pi} \left[\frac{g_1}{g_2} \frac{2h\nu^3}{c^2} n_2 + \left(\frac{g_1}{g_2} n_2 - n_1 \right) \bar{I}_\nu \right]. \quad (2.7)$$

Comparando esta última ecuación con la Ecuación 2.1 se obtienen las expresiones generales para el coeficiente de absorción k_ν y la función fuente J_ν para una línea ro-vibracional, es decir, a la frecuencia ν :

$$k_\nu = \frac{h\nu}{4\pi} \frac{B_{12} n_1 q_{r,a}}{n_a} \left[1 - \frac{g_1}{g_2} \frac{n_2}{n_1} \right] \quad (2.8)$$

y

$$J_\nu = \frac{2h\nu^3}{c^2} \left[\frac{g_2}{g_1} \frac{n_1}{n_2} - 1 \right]^{-1}, \quad (2.9)$$

que en ETL, teniendo en cuenta la relación entre las poblaciones de los estados vibracionales (Ecuación 1.2), coincide con la función de Planck. Un desarrollo más detallado de estas ecuaciones se puede encontrar en *Goody y Yung* [1989] y en *López-Puertas y Taylor* [2001].

Para caracterizar el coeficiente de absorción de toda una banda ro-vibracional se define la intensidad de una banda como:

$$S = \int_{\Delta\nu} k_\nu d\nu. \quad (2.10)$$

Por tanto, de las Ecuaciones 2.8 y 2.9 se ve que, para poder resolver la ecuación de transporte radiativo en condiciones de no-ETL, es necesario conocer previamente las poblaciones de los estados responsables de las emisiones.

Lo descrito hasta ahora constituye la base teórica de todo estudio relacionado con la radiación atmosférica. En este capítulo se describen los fundamentos teóricos en los que se basan los modelos utilizados en esta memoria y se detallan las características principales de cada uno de los códigos. En concreto, se han utilizado:

- Dos códigos de transporte radiativo (descritos en la Sección 2.2): KOPRA y BANDPAK, utilizados para calcular la radiancia nocturna en $4.3 \mu\text{m}$ y como parte del código de inversión simultánea de SABER de T_k/CO_2 respectivamente; y
- Un código de no-ETL del CO_2 (que se describe en la Sección 2.3, utilizado para calcular las poblaciones de los estados vibracionales en $4.3 \mu\text{m}$ del CO_2 durante la noche y como parte del código de inversión de simultánea de T_k y CO_2 de SABER.

Además, en esta memoria se ha desarrollado un esquema para invertir las poblaciones de los estados vibracionales del radical hidroxilo a partir de las medidas de sus emisiones, descrito en la Sección 2.5. Para ello también se ha utilizado un modelo de cálculo de las poblaciones de dichos estados en no-ETL. Esto ha sido necesario para estimar la excitación nocturna de los estados $\text{CO}_2(\nu_3)$.

2.2. El modelo de transporte radiativo

El propósito de un modelo de transporte radiativo de cálculo directo, es proporcionar las emisiones atmosféricas, o sea, las radiancias, aunque algunos de ellos también son capaces de calcular las tasas de enfriamiento y calentamiento radiativos. Para ello resuelve la ecuación de transporte radiativo para una geometría de observación y un modelo atmosférico dados. En esta memoria el interés se centra en emisiones atmosféricas en el limbo y, en ese contexto, la señal medida por un instrumento (la radiancia) al realizar un sondeo atmosférico en el limbo a una cierta altura tangente es (ver Figura 2.1):

$$L(x_{obs}, \mathbf{x}) = \int_{\Delta\nu} L_\nu(x_{obs}, \mathbf{x}) f(\nu) d\nu, \quad (2.11)$$

donde L_ν es la radiancia monocromática en el limbo, $f(\nu)$ es la función de respuesta en frecuencia normalizada del filtro o canal del radiómetro, $\Delta\nu$ es la anchura del intervalo de frecuencias en el que mide el canal, x_{obs} es el punto de observación y \mathbf{x} indica la dirección de línea de visión, en este caso, tangente.

Teniendo en cuenta que en la observación en el limbo la intensidad monocromática en el origen proviene del espacio, es decir, es nula ($I_\nu(x_0)=0$), la ecuación de transporte radiativo (Ecuación 2.4) queda:

$$L_\nu(x_{obs}, \mathbf{x}) = \int_{x_0}^{x_{obs}} J_\nu(x) e^{-\tau_\nu(x, x_{obs})} k_\nu(x) n_a(x) dx = \int_{x_0}^{x_{obs}} J_\nu(x) \frac{d\mathcal{T}_\nu(x, x_{obs})}{dx} dx, \quad (2.12)$$

donde x es un punto a lo largo de la línea de observación entre x_0 y x_{obs} , $J_\nu(x)$ es la función fuente, $n(x)$ es la concentración de partículas absorbentes, $k_\nu(x)$ es el coeficiente de absorción, $\tau_\nu(x, x_{obs})$ es el espesor óptico entre ese punto x y x_{obs} en la dirección de la línea de visión \mathbf{x} y \mathcal{T} es la transmitancia definida como:

$$\mathcal{T}_\nu(x, x_{obs}) = e^{-\tau_\nu(x, x_{obs})} = \exp\left(-\int_x^{x_{obs}} k_\nu(x') n_a(x') dx'\right). \quad (2.13)$$

Para calcular la radiancia es necesario por tanto conocer la función fuente y el coeficiente de absorción. En el caso del Equilibrio Termodinámico Local éstos están determinados por la temperatura cinética local pero en el caso de no-ETL se requiere un cálculo previo de las poblaciones de los niveles involucrados en la emisión.

Para calcular la intensidad monocromática con la Ecuación 2.12 en el caso general mediante un código de cálculo de transporte radiativo, la atmósfera se divide generalmente en capas esféricas homogéneas concéntricas caracterizadas por una temperatura T y una presión p . Por ser homogénea, la concentración de gas absorbente n_l , el coeficiente de absorción $k_{\nu,l}$ y la función fuente $J_{\nu,l}$ son constantes a lo largo de cada capa l . Se define para cada capa l , que se extiende en la dirección z entre el límite superior e inferior z_S y z_I respectivamente, la cantidad de absorbente o masa óptica u_l en la dirección de observación \mathbf{x} (observando z_t tangencialmente):

$$u_l(\mathbf{x}) = n_l \left(\sqrt{(z_S + R_T)^2 - (z_t + R_T)^2} - \sqrt{(z_I + R_T)^2 - (z_t + R_T)^2} \right) = n_l(x_S - x_I), \quad (2.14)$$

donde $x_S = \sqrt{z_S^2 - z_t^2}$ y $x_I = \sqrt{z_I^2 - z_t^2}$. Entonces, según la Ecuación 2.2, el espesor óptico en la dirección \mathbf{x} es:

$$\tau_{\nu,l}(\mathbf{x}) = \tau_{\nu}(x_I, x_S) = k_{\nu,l} u_l(\mathbf{x}). \quad (2.15)$$

La radiancia monocromática emergente en la capa superior N en la dirección \mathbf{x} se puede expresar utilizando la Ecuación 2.4 como:

$$\begin{aligned} L_{\nu,N}(\mathbf{x}) &= L_{\nu,N-1}(\mathbf{x}) e^{-k_{\nu,N} u_N(\mathbf{x})} + J_{\nu,N} k_{\nu,N} n_N \int_{x_I}^{x_S} \exp\left(-k_{\nu,N} n_N \int_x^{x_S} dx'\right) dx = \\ &= L_{\nu,N-1}(\mathbf{x}) e^{-k_{\nu,N} u_N(\mathbf{x})} + J_{\nu,N} \left(1 - e^{-k_{\nu,N} u_N(\mathbf{x})}\right), \end{aligned} \quad (2.16)$$

donde $L_{\nu,N-1}(\mathbf{x})$ es la radiancia emergente en la dirección \mathbf{x} de la capa $N-1$, situada inmediatamente por debajo.

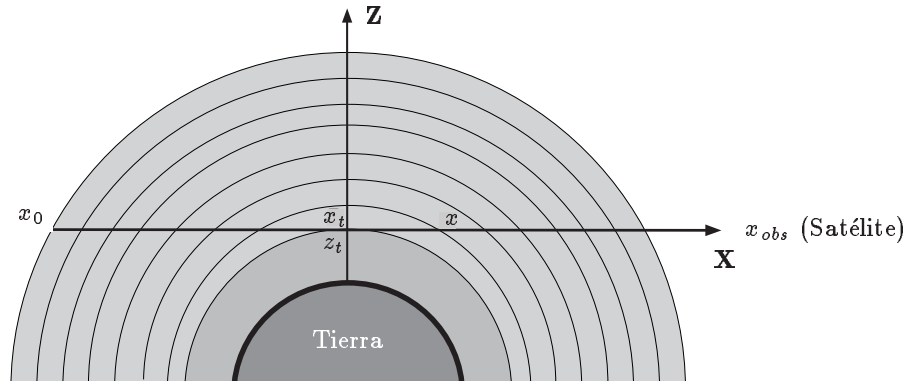


Figura 2.1: Geometría de la observación en el limbo (Nótese que no está a escala).

Aplicando este método recursivamente a cada capa se puede evaluar la radiancia monocromática que mide un instrumento en el limbo en x_{obs} mediante:

$$L_\nu(x_{obs}) = \sum_{l=0}^N \left[J_{\nu,l} \left(1 - e^{-k_{\nu,l} u_l(\mathbf{x})} \right) \prod_{j>l} e^{-k_{\nu,j} u_j(\mathbf{x})} \right], \quad (2.17)$$

donde la capa $l = 0$ es la correspondiente a x_0 en la Figura 2.1.

Para poder obtener resultados apropiados, el esquema de transporte radiativo ha de ser suficientemente preciso. Existen varias técnicas para el cálculo de la radiancia. Aquí se describen las dos que incorporan los códigos utilizados en esta memoria: 1) línea a línea; y 2) aproximación de crecimiento en emisividad (en inglés, *emissivity growth approximation*) o EGA.

2.2.1. Técnica línea a línea: el modelo KOPRA

Si se quiere calcular la señal que mide un instrumento en una región espectral $\Delta\nu$ en la que contribuyen las líneas espectrales en las frecuencias i de varios gases g , la Ecuación 2.17 se escribe como:

$$L_{\Delta\nu}(x_{obs}) = \sum_{l=0}^L \left[\frac{\sum_{ig} J_{l,ig} k_{l,ig} u_{l,g}(\mathbf{x})}{\sum_{ig} k_{l,ig} u_{l,g}(\mathbf{x})} \left(1 - e^{-\sum_{ig} k_{l,ig} u_{l,g}(\mathbf{x})} \right) \prod_{j>l} e^{-\sum_{ig} k_{j,ig} u_{j,g}(\mathbf{x})} \right], \quad (2.18)$$

donde $u_{l,g}$ es la cantidad de absorbente del gas g , $k_{l,ig}$ es el coeficiente de absorción para la línea a la frecuencia i del gas g , y $J_{l,ig}$ es la función fuente en la línea a frecuencia i del gas g , todos ellos referidos a la capa atmosférica l . Este cálculo requiere un gran coste computacional porque, para que sea preciso, hay que evaluar el coeficiente de absorción y la función fuente en un elevado número de frecuencias i .

El algoritmo KOPRA ('Karlsruhe Optimized and Precise Radiative Transfer Algorithm') desarrollado por *Stiller y col.* [2001] es un código de transporte radiativo que utiliza la técnica línea a línea para calcular la radiancia monocromática en el limbo. Ha sido desarrollado para el análisis de los datos del instrumento MIPAS en el satélite ENVISAT (*Fischer y Oelhaf*, 1996) aunque se ha utilizado en otros trabajos.

Este código es capaz de calcular la radiancia en el infrarrojo con alta resolución espectral y con gran precisión. Ha sido adaptado para admitir cálculos bajo condiciones de no-ETL en colaboración con el Instituto de Astrofísica de Andalucía (*Funke y col.*, 2000), en cuyo caso hay que suministrarle las poblaciones de los estados vibracionales responsables. Tiene en cuenta la refracción, puede incorporar atmósferas no esféricas y con no-homogeneidades de densidad horizontales, los efectos sobre el coeficiente de absorción producidos por presiones elevadas, las contribuciones a la señal provenientes de regiones espectrales fuera del intervalo observado, y el posible solapamiento entre líneas

de diferentes gases tratado de forma estricta, entre otros. Permite también la evaluación de los perfiles de las líneas espectrales, ya sean tipo Lorentz, Doppler o Voigt.

Además KOPRA es muy versátil de manera que admite variaciones en la resolución espectral, en el número de capas atmosféricas y en el espesor de las mismas, geometrías distintas, cálculos incluyendo varios gases y seleccionando unas bandas u otras de cada compuesto, la inclusión del continuo, o calcular contribuciones a la radiancia por parte de bandas de emisión y absorción seleccionadas considerando la absorción por parte del resto de bandas presentes en la región espectral. La base espectral de datos que utiliza es HITRAN2000 de *Rothman y col.* [2003]. KOPRA ha sido verificado mediante comparaciones con otros códigos demostrando su buen funcionamiento (*von Clarmann y col.*, 2002).

Este código, adaptado para calcular las radiancias en el limbo integradas en frecuencia una vez suministrada la función espectral del filtro, se ha utilizado en esta memoria para calcular las radiancias del CO₂ en 4.3 μm en condiciones nocturnas cuyos resultados se muestran en el Capítulo 5.

2.2.2. Técnica EGA: el modelo BANDPAK

Las iniciales EGA provienen de ‘Emissivity Growth Approximation’, que se traduce como ‘aproximación de crecimiento en emisividad’. Esta técnica fue planteada por *Gordley y Russell* [1981] y considera la atmósfera formada por L capas homogéneas concéntricas. Para calcular la señal medida por un instrumento se hace uso de las definiciones de transmitancia \mathcal{T} y emisividad ε :

$$\mathcal{T} = e^{-\tau} = e^{-ku} \quad y \quad \varepsilon = 1 - \mathcal{T}. \quad (2.19)$$

Utilizando estas definiciones la Ecuación 2.17 se reescribe como:

$$L_\nu(x_{obs}) = \sum_{l=0}^L \left[J_{\nu,l} \left(\prod_{j>l} e^{-k_{\nu,j} u_j(\mathbf{x})} - \prod_{j=l}^L e^{-k_{\nu,j} u_j(\mathbf{x})} \right) \right] = \sum_{l=0}^L [J_{\nu,l}(\mathbf{e}_{\nu,l}(\mathbf{x}) - \mathbf{e}_{\nu,l+1}(\mathbf{x}))] \quad (2.20)$$

donde se ha definido la emisividad equivalente \mathbf{e} , composición de transmitancias desde la capa l hasta la L , como:

$$\mathbf{e}_{\nu,l}(\mathbf{x}) = 1 - \prod_{j=l}^L \mathcal{T}_{\nu,l}(\mathbf{x}) = 1 - \prod_{j=l}^L e^{-k_{\nu,j} u_j(\mathbf{x})}. \quad (2.21)$$

Para el caso de radiancia integrada en frecuencia $I_{\Delta\nu}(x_{obs})$ se definen la función fuente J_l y la emisividad equivalente \mathbf{e}_l integradas en el filtro de modo que:

$$L_{\Delta\nu}(x_{obs}) \approx \sum_{l=0}^L [J_l(\mathbf{e}_l(\mathbf{x}) - \mathbf{e}_{l+1}(\mathbf{x}))] \quad (2.22)$$

donde

$$J_l = \int_{\Delta\nu} f(\nu) J_{\nu,l} d\nu \quad y \quad e_l = \frac{\int_{\Delta\nu} f(\nu) J_{\nu,l} e_{\nu,l} d\nu}{J_l}. \quad (2.23)$$

La emisividad y la función fuente integradas en frecuencia son por tanto dependientes de cuatro variables: 1) las poblaciones de los estados responsables de las emisiones; 2) la temperatura cinética; 3) la presión; y 4) la masa óptica o cantidad de absorbente. Los códigos de transporte radiativo que utilizan la técnica EGA disponen de tablas de valores de $J_{\nu,l}$ y $e_{\nu,l}$ previamente calculados que se interpolan para las condiciones atmosféricas dadas. De este modo, el cálculo de radiancias integradas es rápido.

La librería de subrutinas BANDPAK, desarrollada por *Marshall y col.* [1994], es un modelo de transporte radiativo que utiliza este método para calcular radiancias integradas. Soporta cálculos de emisiones en el limbo bajo condiciones de no-ETL si previamente un modelo de no-ETL proporciona las temperaturas vibracionales de los niveles responsables de las emisiones. Este código de cálculo de radiancias en el limbo es muy versátil y flexible. De hecho, permite variar el número de capas de la atmósfera y el espesor de las mismas, incluir varios gases simultáneamente, considerar la refracción en el cálculo de los caminos geométricos atmosféricos o variar los métodos de cálculo de la emisión integrada en frecuencia a lo largo del camino óptico (a saber, aproximación pseudo-masa ó aproximación Curtis-Godson).

Este código trata el solapamiento de transmisiones entre distintos gases mediante términos separados. En caso de que exista tal solapamiento, se calculan las contribuciones de cada uno de los gases y se resta un término que da cuenta del solapamiento. Para esto también necesita de tablas pre-calculadas de emisividades compuestas de varios gases que se generan de forma análoga a las calculadas para un solo gas.

Aunque este código es menos preciso que los modelos línea a línea, especialmente en lo que se refiere al tratamiento del solapamiento, es muy rápido y, en consecuencia, idóneo si se requiere un elevado número de cálculos como ocurre en la inversión de las radiancias medidas por un instrumento a bordo de un satélite.

BANDPAK es parte del código de inversión simultánea de temperatura cinética y dióxido de carbono de SABER, que ha sido utilizado en esta memoria. Simula las radiancias integradas en el limbo para los canales en $15 \mu\text{m}$ y $4.3 \mu\text{m}$ tras el cálculo de las poblaciones de los niveles vibracionales del CO_2 mediante un modelo de no-ETL similar (salvo en el cálculo del transporte) al descrito en la siguiente sección.

2.3. El modelo de no-ETL

Un modelo de no-ETL calcula las poblaciones de los niveles vibracionales bajo condiciones de no Equilibrio Termodinámico Local. Estos modelos son indispensables para calcular las emisiones atmosféricas en el infrarrojo cuando los estados vibracionales res-

ponsables de las mismas están afectados por dichas condiciones. Esta situación sucede en la atmósfera si las colisiones no son lo suficientemente frecuentes como para redistribuir la energía cinética en energía vibracional, con lo que las poblaciones de los estados vibracionales no siguen una distribución de Boltzmann a la temperatura cinética local.

Para modelar estas poblaciones en no-ETL es necesario que el modelo incluya los procesos que intervienen a escala microscópica y los de intercambio de energía entre las diferentes regiones atmosféricas. Los mecanismos que condicionan la población de un nivel son sus posibles excitaciones y desexcitaciones entre las que se encuentran procesos de origen radiativo (interacción entre materia y radiación), de origen colisional (colisiones entre moléculas en la atmósfera), y otros procesos de transferencia de energía interna o química.

Los posibles procesos no radiativos se clasifican en dos grupos: 1) aquellos en los que tras una colisión se produce una excitación (o desexcitación) vibracional de una molécula a costa (o en favor) de la energía cinética de otra molécula (en inglés, *thermal processes*); y 2) aquellos donde la energía que excita (o desexcita) vibracionalmente a una molécula tras una colisión o una reacción proviene de (o se transforma en) cualquier otro tipo de energía interna de la molécula con que colisiona (en inglés, *non-thermal processes*).

El primer grupo lo constituyen las colisiones vibracional-traslacional (V-T) que son del tipo:



donde n_2 y n_1 son las poblaciones de los niveles superior e inferior de la transición que sufre la molécula n , $\Delta E = E_2 - E_1$ es la diferencia de energía entre los dos niveles, M es una molécula en su estado base (normalmente N_2 , O_2 , ó O) y k_{VT} es la constante de reacción o tasa colisional. El número de moléculas desexcitadas por unidad de volumen y tiempo desde el nivel 2 hacia el 1 es $k_{VT}[M]n_2$ y el de excitadas desde el nivel 1 hacia el 2 es $k'_{VT}[M]n_1$, donde la constante colisional inversa k'_{VT} se calcula mediante

$$k'_{VT} = k_{VT} \frac{g_1}{g_2} \exp\left(-\frac{\Delta E}{kT}\right). \quad (2.25)$$

La tasa de excitación colisional neta del nivel 2 debida a este proceso es:

$$k'_{VT}[M]n_1 - k_{VT}[M]n_2. \quad (2.26)$$

Dentro de los procesos del segundo grupo se pueden encontrar: a) colisión vibracional-vibracional (V-V), en la que hay un intercambio de energía vibracional entre las dos moléculas que colisionan ; b) colisión electrónica-vibracional (E-V), en la que una molécula se relaja electrónicamente para excitar vibracionalmente a otra; c) recombinación química, en el que se genera una molécula en un estado excitado a costa de la energía de origen químico liberada tras una reacción; d) reacción fotoquímica, como la fotólisis del ozono en las bandas de Hartley en la que se produce oxígeno atómico; e) recombinación disociativa,

como el proceso $O_2^+ + e^- \rightarrow O^* + O$; ó f) con partículas cargadas, en las que se producen moléculas excitadas tras colisiones con partículas procedentes del viento solar o de los rayos cósmicos.

Se muestra como ejemplo el caso de las colisiones V-V que son del tipo:

$$k_{VV} : n_2 + M(v) \rightleftharpoons n_1 + M(v') + \Delta E, \quad (2.27)$$

donde $M(v)$ y $M(v')$ son dos niveles de la molécula M con energías E_v y $E_{v'}$ (al menos uno de ellos excitado), ΔE es la diferencia de las energías $[(E_2 + E_v) - (E_1 + E_{v'})]$ y k_{VV} es la constante colisional. De manera análoga a los procesos V-T, la tasa de excitación colisional neta del nivel 2 mediante este proceso es:

$$k'_{VV}[M(v')]n_1 - k_{VV}[M(v)]n_2. \quad (2.28)$$

En cuanto a los procesos de origen radiativo, como se ha mostrado en la Sección 2.1 la interacción entre materia y radiación se realiza a través de procesos de absorción, de emisión espontánea y de emisión inducida caracterizados por los coeficientes de Einstein B_{12} , A_{21} y B_{21} respectivamente. En el caso de la atmósfera terrestre los procesos pueden ser la absorción de radiación solar, la emisión espontánea y la absorción de radiación proveniente de otras regiones de la atmósfera o de la superficie terrestre. También la emisión inducida es significativa a veces, como en el caso de la banda láser del CO_2 en $10 \mu m$. En general, la tasa neta de excitación del nivel 2 mediante procesos radiativos en la banda 2-1 es:

$$n_2 A_{21} + n_2 B_{21} \bar{I}_{\Delta\nu} - n_1 B_{12} \bar{I}_{\Delta\nu}, \quad (2.29)$$

donde $\bar{I}_{\Delta\nu}$ es la intensidad de campo radiativo media en $\Delta\nu$.

Para calcular la población de los niveles vibracionales es necesario introducir la Ecuación de Equilibrio Estadístico o Ecuación de Balance Detallado, que es un principio de conservación con el que se impone la condición de balance entre todos los procesos microscópicos que afectan a la población de cada nivel. En definitiva, el número de moléculas por unidad de volumen y tiempo en cada nivel que se excitan ha de ser igual al que se desexcitan por lo que cada excitación de la molécula para poblar un nivel debe ir acompañada de la consiguiente desexcitación a través del mismo u otro mecanismo para despoplarlo.

En el caso en el que intervienen dos únicos niveles, teniendo en cuenta tanto los procesos colisionales como los radiativos, esta ecuación para el nivel 2 se escribe:

$$\begin{aligned} n_1 B_{12} \bar{I}_{\Delta\nu} + \sum_i k'_{t,i} n_1 [M_i] + \sum_j k'_{nt,j} n_1 [M_j(v')] = \\ = n_2 B_{21} \bar{I}_{\Delta\nu} + n_2 A_{21} + \sum_i k_{t,i} n_2 [M_i] + \sum_j k_{nt,j} n_2 [M_j(v)], \end{aligned} \quad (2.30)$$

donde el subíndice i y la constante $k_{t,i}$ se refieren a las colisiones V-T y el subíndice j y las constantes $k_{nt,j}$ al resto de procesos no radiativos. El término de la izquierda de esta

ecuación indica la tasa de producción y el término de la derecha la de pérdidas, ambas referidas al estado 2.

La ecuación de balance detallado anterior (Ecuación 2.30) nos proporciona la relación entre las poblaciones de los estados n_2 y n_1 mediante:

$$\frac{n_2}{n_1} = \frac{B_{12}\bar{I}_{\Delta\nu} + p_T}{A_{21} + B_{21}\bar{I}_{\Delta\nu} + l_T} \quad (2.31)$$

donde p_T y l_T son la producción y la pérdida específicas totales por procesos no radiativos, es decir, $p_T = \sum k'_{t,i}[M_i] + \sum k'_{nt,j}[M_j(v')]$ y $l_T = \sum k_{t,i}[M_i] + \sum k_{nt,j}[M_j(v)]$. Esta ecuación se puede extender incluyendo las posibles excitaciones y desexcitaciones del nivel 2 a través de otras bandas.

La población de los estados vibracionales bajo condiciones de no-ETL se calcula resolviendo el sistema de ecuaciones acopladas formado por las ecuaciones del tipo de la Ecuación 2.31 y las ecuaciones de transporte radiativo (Ecuación 2.4) para cada una de las bandas vibracionales como se ve a continuación.

Generalmente, la población de un estado vibracional se suele expresar mediante la temperatura vibracional T_v :

$$T_v = \frac{E_v}{k \ln \left(\frac{g_v n_0}{g_0 n_v} \right)}, \quad (2.32)$$

donde n_v y n_0 son las poblaciones del nivel en cuestión y del nivel base, g_v y g_0 son sus degeneraciones, E_v es la energía del nivel y k es la constante de Boltzmann. Entonces la temperatura vibracional no es más que la temperatura cinética a la que debería estar el medio para que ese nivel estuviera poblado según la distribución de Boltzmann.

2.3.1. El método de las matrices de Curtis

Uno de los métodos de resolución del sistema formado por las ecuaciones de balance detallado y de transporte radiativo es el de las matrices de Curtis. Para ello la atmósfera se divide en N capas plano-paralelas que se suponen homogéneas y caracterizadas por una temperatura y presión medias. Para cada nivel vibracional y cada banda considerados se plantean las ecuaciones de balance detallado y de transporte radiativo en cada capa del siguiente modo.

Despejando n_2/n_1 de la expresión de la función fuente de la Ecuación 2.9, sustituyendo en la Ecuación 2.31 y haciendo uso de las relaciones de Einstein y de la función de Planck B_{ν_0} , la Ecuación de Equilibrio Estadístico queda:

$$J_{\nu_0} = \frac{\bar{I}_{\Delta\nu} + \epsilon_1 B_{\nu_0}}{1 + \epsilon_2} \quad (2.33)$$

donde

$$\epsilon_1 = \frac{p_T}{A_{21}} \frac{g_1}{g_2} \exp \left(\frac{h\nu}{kT} - 1 \right) \quad y \quad \epsilon_2 = \frac{l_T}{A_{21}} \left(1 - \frac{p_T}{l_T} \frac{g_1}{g_2} \right). \quad (2.34)$$

Utilizando la definición de la divergencia de flujo o tasa de calentamiento radiativo h_{12} en la banda 2-1:

$$h_{12} = 4\pi S n_a (\bar{I}_{\Delta\nu} - J_{\nu_0}), \quad (2.35)$$

donde S es la intensidad de la banda, y sustituyendo $\bar{I}_{\Delta\nu}$ en 2.33 se puede escribir para cada capa i :

$$J_{\nu_0,i} = \frac{\epsilon_{1,i}}{\epsilon_{2,i}} B_{\nu_0,i} + \frac{1}{4\pi S_i n_{a,i} \epsilon_{2,i}} h_{12,i}. \quad (2.36)$$

La ecuación de transporte radiativo se resuelve para cada capa i (excepto las capas límite del modelo) mediante:

$$h_{12,i} = \sum_j C_{12,ij} J_{\nu_0,j} + \gamma_{12,i}, \quad (2.37)$$

donde $C_{12,ij}$ es el elemento de la denominada matriz de Curtis que representa la contribución radiativa de la capa atmosférica j al calentamiento neto de la capa i y $\gamma_{12,i}$ incluye el posible calentamiento de la capa i debido a la radiación proveniente de fuera de los límites de la atmósfera considerada (p.e., radiación solar, radiación de la superficie del planeta o radiación proveniente de regiones inferiores).

Para cada una de las N capas atmosféricas se pueden plantear estas dos últimas ecuaciones conformando un sistema cerrado de $2 \times N$ ecuaciones lineales cuyas incógnitas son la función fuente y la tasa de calentamiento para cada capa que, expresado en forma matricial, queda:

$$\begin{aligned} \mathbf{h} &= \mathbf{C}\mathbf{J} + \boldsymbol{\gamma} \\ \mathbf{J} &= \mathbf{B}' + \epsilon\mathbf{h}, \end{aligned} \quad (2.38)$$

donde \mathbf{h} y \mathbf{J} son los vectores de tasa de calentamiento y función fuente respectivamente y \mathbf{C} es la matriz de Curtis. Las condiciones de contorno para resolver el sistema son que en la capa inferior la función fuente coincide con la función de Planck a la T_k local y en la capa superior la derivada de la función fuente es nula. Más detalles de este método se encuentran en *López-Puertas y Taylor [2001]*.

Este método se puede extender para incluir las posibles interacciones del nivel 2 en bandas distintas a la 2-1 en cuyo caso se resuelven estas dos ecuaciones matriciales para cada banda vibracional.

El modelo desarrollado por *López-Puertas y col. [1986,1998]* utiliza esta técnica para calcular las poblaciones de los niveles vibracionales del dióxido de carbono. Este código es capaz de calcular la población de hasta 76 estados vibracionales del CO_2 (ver Apéndice A) y la del primer estado excitado del nitrógeno molecular incluyendo 128 bandas del CO_2 (ver Apéndice B) y considerando los procesos relevantes como colisiones V-T y V-V, absorción de radiación solar, intercambio de energía entre capas y emisión espontánea.

Permite variar el número de capas y el espesor de las mismas, los métodos de integración en frecuencia o las constantes que definen los procesos colisionales. Los principales procesos colisionales que actualmente incluye se muestran en la Tabla 3.3 de la pág. 71 y la inclusión de nuevos mecanismos resulta relativamente sencilla.

Este código ha sido utilizado en esta memoria para determinar las poblaciones de los estados $\text{CO}_2(\nu_3)$ que después se suministran al código de transporte radiativo para calcular la radiancia nocturna en $4.3 \mu\text{m}$ (ver Capítulo 5). Además, es parte del código de inversión simultánea de temperatura cinética y concentración de dióxido de carbono de SABER en no-ETL, para el que ha sido adaptado.

2.4. El código de inversión

El principal objetivo de un código de inversión es extraer información geofísica de las medidas de emisiones atmosféricas. Las radiancias medidas por un radiómetro en el limbo L_i se pueden expresar formalmente en función de las variables a invertir x_j (variables de estado) de manera matricial:

$$\mathbf{L} = \mathbf{f}(\mathbf{x}, \mathbf{b}) = \mathbf{F}(\mathbf{x}, \mathbf{b}) + \epsilon, \quad (2.39)$$

donde \mathbf{L} es el vector de medidas, \mathbf{f} es la función directa que describe la física de la medida, \mathbf{F} es el modelo directo que describe nuestro entendimiento sobre la física de la medida, ϵ es el error de la medida, \mathbf{x} es el vector de estado, y \mathbf{b} son otras variables conocidas de las que depende la medida.

La función \mathbf{f} es generalmente no lineal y además la dimensión del *espacio de las medidas* suele ser menor que la del *espacio de los estados*, es decir, hay menos medidas independientes que incógnitas. Existe entonces el denominado *espacio nulo*, que es un subespacio del *espacio de los estados* compuesto por los elementos del vector de estado de los que no depende la medida, por lo que no se tiene información de los mismos y no se pueden medir. Esto implica que el problema no tiene solución única y estable.

Para encontrar la solución \mathbf{x} se aproxima el problema a una función lineal desarrollando en torno al estado \mathbf{x}_a . Entonces,

$$\mathbf{L} = \mathbf{f}(\mathbf{x}_a, \mathbf{b}) + \frac{\partial \mathbf{f}}{\partial \mathbf{x}}(\mathbf{x} - \mathbf{x}_a). \quad (2.40)$$

El vector \mathbf{x}_a es una medida independiente del vector de estado. Su valor se toma de la información *a priori*, es decir, es el conocimiento de la magnitud a invertir previo a la medida. El perfil invertido se considera por tanto una media pesada del estado real y del estado *a priori*. Generalmente los valores *a priori* provienen de modelos climatológicos aunque pueden provenir de otras fuentes (como es el caso de la inversión de la temperatura de SABER en no-ETL, en la que se toma como *a priori* la T_k invertida en ETL).

La función del *a priori* es estimar la solución de los elementos del *espacio nulo*, o sea, de los elementos del perfil a invertir de los que no se tiene información suficiente para ser invertidos pero que son necesarios para encontrar la solución en el resto del perfil. Estos elementos son, por ejemplo, los correspondientes a regiones donde el ruido del instrumento es muy elevado o el medio es ópticamente espeso y, por tanto, no se pueden observar.

Con el código de inversión se derivan los perfiles de parámetros atmosféricos (como constituyentes atmosféricos o temperatura cinética) para los que un modelo de transporte radiativo calcula radiancias sintéticas que son consistentes con las radiancias medidas. Estos códigos utilizan un método iterativo para resolver el problema de la inversión de modo que se parte de un valor inicial (en inglés, *initial guess*) y se simulan las radiancias con un modelo de transporte radiativo. La radiancia resultante se compara con la medida del instrumento de modo que si ambas coinciden dentro del criterio de convergencia elegido, el valor se acepta como solución y, en caso contrario, se actualiza el valor de la magnitud y se reitera el proceso hasta que se alcanza la convergencia.

Un código de inversión consta de dos partes: 1) el modelo directo, mediante el cual se simulan las radiancias; y 2) el modelo inverso propiamente dicho, mediante el cual se actualizan los parámetros a invertir y se comparan las radiancias simuladas o sintéticas con las medidas del instrumento dentro del margen de ruido del mismo.

Existen numerosas técnicas de inversión. *Rodgers* [2000] hace una revisión detallada de todas ellas indicando ventajas y desventajas y prestando especial atención al análisis de errores. Debido a que en esta memoria se ha trabajado con el código de inversión de temperatura cinética y de abundancia de dióxido de carbono de SABER, la descripción que aquí se realiza se centra en el esquema y técnicas utilizados por dicho código.

Para la inversión de T_k de SABER se utilizan las medidas de las emisiones del CO_2 en $15 \mu\text{m}$ (canales 1 y 3) y para la inversión de $[\text{CO}_2]$ las emisiones en $4.3 \mu\text{m}$ (canal 7). Para invertir la T_k a partir de dichas emisiones es necesario conocer la abundancia de CO_2 y viceversa. Por esto, la inversión de estas magnitudes se lleva a cabo de manera simultánea.

Si se quiere realizar la inversión de parámetros en la media-alta atmósfera, hay que tener en cuenta que la hipótesis de Equilibrio Termodinámico Local (ETL) no es adecuada en la mayor parte de los casos y, en concreto, para el CO_2 . Por tanto, se debe adoptar un esquema en el que se consideren emisiones atmosféricas en no-ETL.

El esquema de inversión seguido para derivar simultáneamente la T_k y el CO_2 de SABER se ilustra en la Figura 2.2. Para cada par de perfiles de radiancia medidos por SABER en sus canales estrecho (canal 1) y ancho (canal 3) de CO_2 alrededor de $15 \mu\text{m}$, se invierte en una primera instancia el perfil $p\text{-}T_k$ suponiendo condiciones de ETL. El esquema utilizado es el desarrollado para la inversión de los datos del instrumento LIMS (*Gille y col.*, 1984) y se describe brevemente en la Sección 2.4.2. Este perfil se utiliza como inicialización de la T_k para invertir simultáneamente T_k y CO_2 en no-ETL a partir

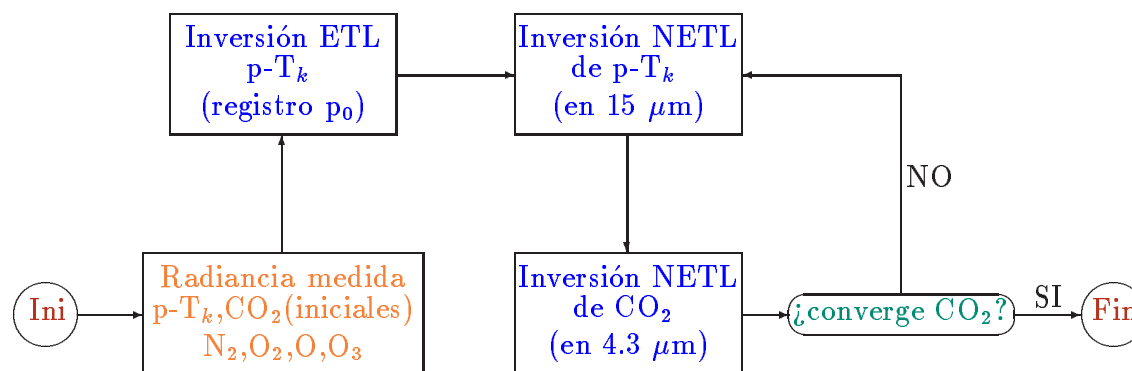


Figura 2.2: Esquema de inversión simultánea de T_k y CO_2 de SABER.

de las medidas en el canal estrecho en $15 \mu\text{m}$ y en el canal en $4.3 \mu\text{m}$. Este código ha sido desarrollado por *Mertens y col.* [2002] en estrecha colaboración con el Instituto de Astrofísica de Andalucía.

La inversión simultánea de T_k - CO_2 se realiza iterando sucesivamente entre dos módulos de inversión independientes, el de T_k y el de CO_2 . El primero deriva la T_k suponiendo el CO_2 conocido y el segundo deriva el CO_2 suponiendo la T_k conocida. El bucle se repite y se detiene cuando la media de las diferencias relativas a lo largo del intervalo de alturas de inversión entre dos perfiles sucesivos de CO_2 invertido es menor que un cierto porcentaje, en concreto, cuando $\sum_j \frac{\Delta[\text{CO}_2]_j}{[\text{CO}_2]_j} < 0.02 \cdot N$, donde la sumatoria en j es a lo largo de las N alturas donde se está invirtiendo T_k/CO_2 . El criterio de convergencia de este bucle no es función del ruido del instrumento, lo cual es aceptable teniendo en cuenta la elevada relación señal-ruido del canal en $4.3 \mu\text{m}$ de SABER durante el día (ver Tabla 1.2).

Los módulos de inversión de T_k y de CO_2 están constituidos por un modelo directo (compartido por ambos) y los modelos de inversión propiamente dichos. En las siguientes secciones se describen todos ellos.

2.4.1. El modelo directo

El cálculo de radiancias sintéticas en los procesos de inversión de parámetros atmosféricos se lleva a cabo mediante un modelo de transporte radiativo como los descritos en la Sección 2.2. Para ello es necesario suministrar las poblaciones de los niveles vibracionales responsables de las emisiones. En el caso de emisiones en ETL éstas se calculan de forma sencilla a partir de la función de Planck. En no-ETL es necesario que el modelo directo conste, además del modelo de transporte radiativo capaz de calcular las radiancias en condiciones de no-ETL, de un módulo que le proporcione las temperaturas vibracionales de los niveles vibracionales de los compuestos atmosféricos emisores.

El modelo directo del código de inversión operacional de T_k y $[\text{CO}_2]$ de SABER está formado por el código de cálculo de radiancias en el limbo BANDPAK desarrollado por

Marshall y col. [1994] y extendido para cálculos en no-ETL, y por el modelo de no-ETL del CO₂ de *López-Puertas y col.* [1986,1998], adaptado para trabajar conjuntamente con BANDPAK. Ambos han sido descritos en las Secciones 2.3 y 2.2.2 respectivamente. El código operacional calcula la radiancia en 15 μm (canal 1 de SABER), incluyendo la contribución de 18 bandas del CO₂ y una banda del O₃ (ver Tabla 3.1 en la pág. 65), y la radiancia en 4.3 μm (canal 7 de SABER), incluyendo la contribución de 17 bandas del CO₂ (ver Tabla 3.2 en la pág. 67). Estos cálculos se realizan a partir de las T_v de los niveles CO₂(ν_2) y CO₂(ν_3) respectivamente proporcionadas por el modelo de no-ETL. Además, se incluyen el resto de bandas que según la base de datos de HITRAN (*Rothman y col.*, 2003) contribuyen en las frecuencias correspondientes a los filtros de SABER de estos dos canales. Estas bandas se tratan como bandas pseudo-vibracionales de modo que el cociente entre la población en no-ETL y ETL de cada estado involucrado se hace igual al cociente de poblaciones no-ETL/ETL de la primera banda caliente ν_2 del isótopo 626 del CO₂. Esta aproximación no afecta a los resultados ya que la contribución de estas bandas residuales es mucho menor del 1%.

2.4.2. El modelo inverso

El modelo de inversión propiamente dicho consiste en un código capaz de actualizar los perfiles de las magnitudes a invertir, en caso de que no hayan convergido, y de determinar la solución del problema mediante comparaciones entre las radiancias calculadas y las medidas. El código de inversión simultánea de T_k -CO₂ de SABER está compuesto por dos módulos independientes, uno para invertir la temperatura y otro para invertir el dióxido de carbono. Ambos se ejecutan sucesivamente hasta que la diferencia entre dos perfiles de CO₂ invertidos en iteraciones sucesivas es menor que un 2% a lo largo de todo el perfil. Previamente se invierte la T_k en ETL, que constituye el perfil inicial (*initial guess*) y *a priori* de T_k para después invertir simultáneamente T_k y CO₂ considerando no-ETL.

La técnica utilizada para la inversión tanto de temperatura cinética como de abun-

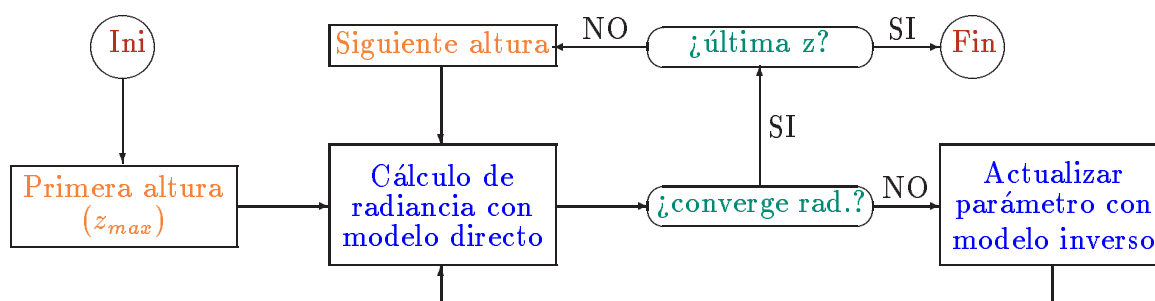


Figura 2.3: Esquema de la técnica de inversión *onion-peeling*.

dancia de dióxido de carbono es la denominada ‘deshojado de cebolla’ (en inglés, *onion-peeling*). Para cada iteración de cada módulo, la inversión se realiza empezando por el límite superior de la atmósfera y se desciende sucesivamente en altura suponiendo que el parámetro invertido en las alturas superiores es correcto. En la Figura 2.3 se muestra un esquema de esta técnica. La razón de la elección de esta técnica se fundamenta en la geometría de la observación en el limbo, ya que la radiancia medida a una cierta altura tangente sólo depende de las emisiones y absorciones de las capas situadas por encima (ver Figura 2.1).

A continuación se describen de forma más detallada los tres módulos de inversión independientes (T_k en ETL, T_k en no-ETL, CO_2 en no-ETL) que conforman el código de inversión simultánea de T_k y $[\text{CO}_2]$.

Módulo de inversión de temperatura cinética en ETL

El algoritmo se basa en la técnica de ‘dos colores’ (en inglés, *two-color technique*) descrita por *Gille y House* [1971]. El método utiliza dos canales, uno que mide en una región espectral que contiene fundamentalmente líneas ópticamente delgadas, con información sobre la temperatura, y otro en una región con líneas ópticamente moderadas, y por tanto sensible, además de a la temperatura, a la presión.

En concreto, SABER utiliza los canales en $15 \mu\text{m}$ 1 (canal estrecho) y 3 (canal ancho), centrados en regiones espectrales similares pero de anchuras espectrales muy diferentes. El primero mide las emisiones de la banda fundamental del isótopo principal del CO_2 y el segundo mide además las emisiones del resto de bandas en $15 \mu\text{m}$.

El instrumento registra las alturas tangentes relativas a una cierta altura de referencia z_0 y mide la radiancia en ambos canales a dichas alturas z^* . La temperatura cinética se invierte a partir de estas medidas considerando condiciones de ETL en todo el intervalo de alturas y aplicando la técnica de ‘deshojado de cebolla’.

Inicialmente, se supone un perfil de T_k y de razón de mezcla de CO_2 . El perfil de presión se construye a partir de una $p_0(z_0)$ utilizando la ecuación hidrostática integrada en combinación con la ecuación del gas ideal, es decir,

$$p(z) = p_0(z_0) \exp \left[- \int_{z_0}^z \frac{M g(z)}{R T(z)} dz \right], \quad (2.41)$$

donde p_0 es la presión de referencia a la altura z_0 , R es la constante de los gases, M es el peso molecular medio, y z es la altura z_0+z^* . Esto determina la densidad a lo largo del perfil.

Haciendo uso del modelo directo, se calcula la radiancia en el limbo y se compara con la medida por SABER. Si el módulo del vector diferencia entre el perfil de radiancia medida y el de radiancia simulada (es decir, el cuadrado de la suma de las diferencias a lo largo de todo el perfil) es menor que el ruido del instrumento, entonces se acepta el perfil

de temperatura como solución. En caso contrario, las diferencias se utilizan para ajustar el perfil utilizando la expresión de inversión instantánea,

$$T^{i+1}(z^*) = T^i(z^*) + \frac{2[T^i(z^*)]^2}{c_2\nu} \left[\frac{L_M(z^*) - L^i(z^*)}{L_M(z^*) + L^i(z^*)} \right] \quad (2.42)$$

donde los superíndices denotan la iteración de orden i , c_2 es la segunda constante de radiación, ν es la frecuencia en el centro del paso de banda del canal y L_M y L^i son las radiancias medida y calculada a la altura tangente relativa z^* respectivamente. Para obtener las alturas del perfil de temperatura tan sólo es necesario tener la altura de cualquier nivel de presión a partir de un instrumento independiente.

El perfil de temperatura es función de la presión de referencia $p_0(z_0)$ utilizada. Sin embargo, esta presión es una incógnita. Por ello se utiliza un segundo canal. La inversión de la T_k se lleva a cabo de manera análoga con ambos canales considerando ETL y eligiendo el perfil de T_k que satisfaga ambos canales. Esto determina unívocamente la presión a la altura de origen y, por tanto, el perfil z-P- T_k .

Módulo de inversión de temperatura cinética en no-ETL

En la Figura 2.4 se muestra el esquema del módulo de inversión de T_k en no-ETL. El módulo está compuesto por dos bucles. En la primera iteración, se adopta un perfil de temperatura cinética y presión iniciales (en inglés, *initial guess*). En concreto, se utiliza el perfil p- T_k obtenido de la inversión en ETL. A lo largo de todo el proceso de inversión, la pareja p- T_k del límite inferior del modelo (en z_0) se mantiene constante ya que está unívocamente determinada mediante la técnica de ‘dos colores’ descrita arriba. Las razones de mezcla de los componentes atmosféricos (N_2 , O_2 , $O(^3P)$, $O(^1D)$, O_3) que se utilizan se toman de modelos climatológicos.

En cada una de las iteraciones del bucle externo, se calculan las temperaturas vibracionales (T_v) utilizando el modelo de no-ETL descrito arriba y se reconstruye la presión utilizando la ley barométrica (Ecuación 2.41).

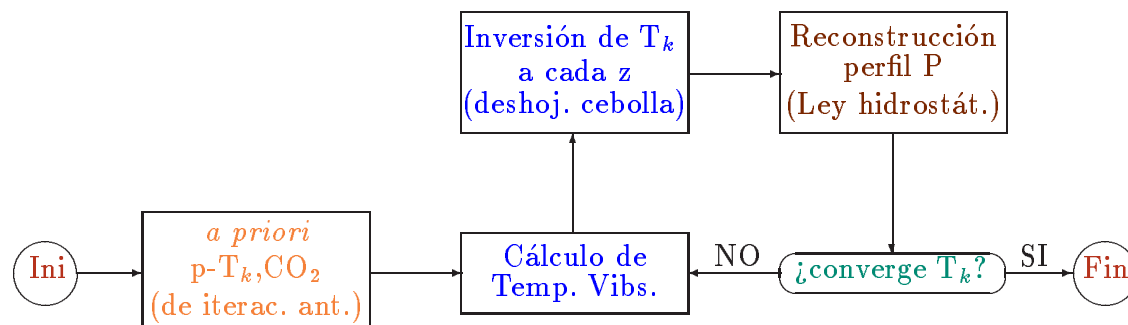


Figura 2.4: Bucle principal (externo) del módulo de inversión de T_k .

En el bucle interno, se invierte la temperatura cinética utilizando la técnica de ‘deshojado de cebolla’ (en inglés, *onion-peeling*) (ver Figura 2.3) manteniendo constante la presión, la razón de mezcla de CO₂ y las temperaturas vibracionales. Para ello, se empieza en el límite superior de la atmósfera (altura máxima que se considera) y se procede a la inversión de T_k local suponiendo que la contribución a la radiancia de las capas superiores a ese límite es despreciable (lo cuál es válido si se tiene en cuenta que la presión disminuye exponencialmente con la altura). Descendiendo en la atmósfera de manera ordenada, para cada una de las alturas z_j , se infiere la temperatura cinética local T_j suponiendo que las temperaturas invertidas T_i para capas situadas por encima ($z_i > z_j$) son correctas. Para la inversión de cada temperatura local se utiliza el método de estimación óptima de Levenberg-Marquardt (*Rodgers, 2000*), que se explica a continuación.

Considerando un comportamiento gaussiano tanto para la medida de radiancia L_M como para la temperatura *a priori*² T_a , la función coste en cada capa j viene dada por

$$\Phi(T_j) = \frac{(T_j - T_{aj})^2}{\sigma_a^2} + \frac{[L_{Mj} - L(T_j)]^2}{\sigma_m^2}. \quad (2.43)$$

La función coste indica el desajuste entre el parámetro invertido, que tiene que pertenecer a un entorno del *a priori* T_{aj} , y las medidas teniendo en cuenta los errores. En esta ecuación, el primer sumando confina T_j alrededor del valor *a priori* T_{aj} pesando con la inversa de la varianza del *a priori* σ_a^2 . El segundo sumando evalúa la distancia entre la radiancia calculada $L(T_j)$ y la radiancia medida L_{Mj} pesando con la inversa de la varianza de la medida σ_m^2 (la cual se toma como el cuadrado del ruido del instrumento).

La solución más probable para T_j es aquella que minimiza la función coste (Ecuación 2.43). Derivando con respecto a T_j e igualando a cero,

$$g(T_j) \equiv \frac{1}{2} \frac{d\Phi(T_j)}{dT_j} = \frac{T_j - T_{aj}}{\sigma_a^2} - \frac{\partial L(T_j)}{\partial T_j} \frac{[L_{Mj} - L(T_j)]}{\sigma_m^2} = 0. \quad (2.44)$$

Para resolver esta ecuación lineal se hace uso del método iterativo de Gauss-Newton. Entonces, la variable T_j se actualiza en cada iteración $i + 1$ mediante

$$T_j^{(i+1)} = T_j^{(i)} - \frac{g'(T_j^{(i)})}{g(T_j^{(i)})} = T_j^{(i)} - [\Phi''(T_j^{(i)})]^{-1} \Phi'(T_j^{(i)}), \quad (2.45)$$

donde g' es la derivada de la función definida en la Ecuación 2.44, y Φ' y Φ'' son la primera y la segunda derivadas de la función coste, todas ellas con respecto a la temperatura T_j . Sustituyendo con las derivadas de la Ecuación 2.43 en la Ecuación 2.45 se tiene,

$$T_j^{(i+1)} = T_j^{(i)} + \left(\frac{1}{\sigma_a^2} + \frac{[K_j]^2}{\sigma_m^2} \right)^{-1} \left(K_j \frac{L_{Mj} - L(T_j^{(i)})}{\sigma_m^2} - \frac{T_j^{(i)} - T_{aj}}{\sigma_a^2} \right), \quad (2.46)$$

²El valor *a priori* de un cierto parámetro representa el conocimiento que tenemos del mismo antes de realizar la medida. En el código utilizado en este trabajo, los valores de T_k *a priori* coinciden con los valores iniciales de la inversión, es decir, los de la inversión en ETL.

donde $K_j = \partial L(T_j)/\partial T_j$ es el jacobiano y la varianza de la solución viene dada por

$$\sigma_{T_j}^2 = [(\sigma_a^2)^{-1} + (\sigma_m^2)^{-1} [K_j]^2]^{-1}. \quad (2.47)$$

Mediante este método, se encuentra el mínimo de la función coste en un solo paso si ésta es exactamente cuadrática en T_j . Sin embargo, si la solución está demasiado alejada del valor inicial de T_j , puede que la actualización en cada iteración nos aleje de la solución más que acercarnos a ella, o en otras palabras, puede que el segundo sumando de la función coste (Ecuación 2.43) aumente. En ese caso, es más favorable utilizar el método del ‘descenso de máxima pendiente’ (en inglés, *steepest descent*) en el que se introduce la variable γ para disminuir o aumentar el tamaño del paso en cada iteración.

En el código de inversión de T_k de SABER, se utiliza una combinación de los métodos de Gauss-Newton y del ‘descenso de máxima pendiente’. Es el denominado método de Levenberg-Marquardt. La temperatura cinética T_j a la altura z_j se actualiza en cada iteración $i + 1$ mediante una modificación de la Ecuación 2.46:

$$T_j^{(i+1)} = T_j^{(i)} + \left(\frac{1 + \gamma}{\sigma_a^2} + \frac{[K_j]^2}{\sigma_m^2} \right)^{-1} \left(K_j \frac{L_{Mj} - L(T_j^{(i)})}{\sigma_m^2} - \frac{T_j^{(i)} - T_{aj}}{\sigma_a^2} \right), \quad (2.48)$$

donde γ se elige de modo que reduzca la función coste. En ese sentido, si $\gamma \rightarrow 0$, el método de Gauss-Newton domina y si $\gamma \rightarrow \infty$ domina el método del ‘descenso de máxima pendiente’. Para buscar el valor óptimo de γ , se calcula la función chi-cuadrado χ^2 en cada iteración de modo que

$$\begin{cases} - \text{si } (\chi^2)^{(i+1)} > (\chi^2)^{(i)} \Rightarrow \text{no se acepta el nuevo valor } T_j^{(i+1)} \text{ y se aumenta } \gamma; \text{ y,} \\ - \text{si } (\chi^2)^{(i+1)} < (\chi^2)^{(i)} \Rightarrow \text{se acepta el nuevo valor } T_j^{(i+1)} \text{ y se disminuye } \gamma. \end{cases}$$

En la inversión de T_k de SABER el bucle interno para cada altura se detiene cuando la diferencia de T_j entre dos iteraciones sucesivas es menor que el error esperado en la solución, es decir, $\frac{(\Delta T_j)^2}{\sigma_{T_j}^2} < 1$.

Una vez que se ha invertido la temperatura cinética a todas las alturas, se reconstruye el perfil de presión con la Ecuación 2.41 en el bucle externo (ver Figura 2.4). Se comprueba entonces si la diferencia entre dos perfiles completos de temperatura consecutivos es menor que los errores esperados en las soluciones, es decir, $\sum_{j=0}^N \frac{(\Delta T_j)^2}{\sigma_{T_j}^2} < N$, donde N es el número de alturas donde se está invirtiendo la temperatura. Si no hay convergencia se recalculan las temperaturas vibracionales con el modelo de no-ETL utilizando el último perfil de T_k invertido y el ‘deshojado de cebolla’ vuelve a empezar. En caso contrario, el bucle externo se detiene.

Módulo de inversión del dióxido de carbono en no-ETL

El método utilizado para la inversión de la temperatura cinética es útil en los casos en los que la ecuación de transporte radiativo sea casi lineal o las no-linealidades sean

moderadas. Este no es el caso de las emisiones del CO_2 en $4.3 \mu\text{m}$ por debajo de los ~ 100 km. Por ello, para realizar la inversión de dióxido de carbono de SABER, se aplica el método de Twomey-Chahine (*Twomey y col.*, 1977), en el que se realiza una actualización no lineal del CO_2 en cada iteración.

El perfil inicial de CO_2 (*initial guess*) coincide con el utilizado para la inversión de temperatura cinética, es decir, en la primera inversión proviene de modelos climatológicos y en las sucesivas iteraciones de la inversión anterior de CO_2 . El perfil *a priori* del código operacional proviene de modelos climatológicos y no varía a lo largo de todo el proceso de inversión. El CO_2 se invierte a cada altura tangente (con la técnica ‘deshojado de cebolla’ esquematizada en la Figura 2.3) manteniendo constantes en todo el proceso las temperaturas vibracionales y el perfil $p\text{-}T_k$, obtenido en la inversión de T_k inmediatamente anterior.

Según el método de inversión de Chahine, en la iteración $i+1$, se actualiza la variable a una altura z_j mediante:

$$[\text{CO}_2]_j^{(i+1)} = [\text{CO}_2]_j^{(i)} \frac{L_{Mj}}{L([\text{CO}_2]_j^{(i)})}, \quad (2.49)$$

donde $[\text{CO}_2]_j^{(i)}$ es la abundancia de CO_2 de la iteración anterior, y L_{Mj} y L son las radiancias medida y calculada respectivamente, todas ellas referidas a la capa j .

Este método presenta el inconveniente de que las alturas z_j tienen que ser elegidas de modo que coincidan con la altura tangente a la que la contribución a la radiancia total en el limbo sea máxima, o sea, con el máximo de la función peso definida como

$$W(x) = \frac{d\mathcal{T}_\nu(x)}{dx} = \frac{d}{dx} (\exp[-\tau_\nu(x)]), \quad (2.50)$$

donde $\mathcal{T}_\nu(x)$ es la transmitancia y $\tau_\nu(x)$ es el espesor óptico. El CO_2 varía en cada iteración y, por tanto, también varían las contribuciones de las diferentes capas a la radiancia total. Es decir, el máximo de la función peso está situado en alturas diferentes en función de la concentración de CO_2 . En este sentido, no hay garantía de que la z_j a la que se debería realizar la inversión permanezca constante a lo largo de todo el proceso. En otras palabras, la utilización de este método no es estrictamente correcta ya que la inversión debería hacerse a las alturas donde la función peso es máxima y éstas no tienen por qué coincidir con las alturas a las que la radiancia está medida.

Por esto, *Twomey y col.* [1977] introdujeron una modificación en la que se tienen en cuenta las funciones peso para actualizar las variables. En cada iteración, entonces, se actualiza la variable del siguiente modo:

$$[\text{CO}_2]_j^{(i+1)} = [\text{CO}_2]_j^{(i)} \left\{ 1 + \frac{W_j(z_j)}{\max(W_j)} \left[\frac{L_{Mj}}{L([\text{CO}_2]_j^{(i)})} - 1 \right] \right\}, \quad (2.51)$$

donde $W_j(z_j)$ es el valor de la función peso en la altura correspondiente a la altura tangente a la que está tomada la medida L_{Mj} y $\max(W_j)$ es el valor máximo que toma dicha función peso.

En definitiva, para cada altura tangente, se calcula en cada iteración la función peso correspondiente haciendo uso del $[\text{CO}_2]_j^{(i)}$ obtenido en la iteración anterior y manteniendo la concentración de CO_2 de las capas situadas por encima invariables. Se corrige entonces el CO_2 local y se procede a la siguiente altura hasta alcanzar la altura inferior del modelo.

En este punto del proceso de inversión simultánea (ver Figura 2.2) se comprueba si la diferencia entre el perfil de CO_2 obtenido y el de la iteración anterior promediada entre todas las alturas tangentes es menor que un 2 %. En ese caso, el proceso de inversión simultánea de T_k - CO_2 termina. En caso contrario, se inicia el proceso de nuevo empezando por la inversión de la temperatura cinética.

Por otra parte, el análisis de errores de la inversión en el método de Twomey-Chahine es complicado. Por ello, una vez que se ha satisfecho el criterio de convergencia global, se realiza una última inversión del CO_2 utilizando un esquema análogo al de la inversión de T_k mediante el método de Levenverg-Marquardt. De este modo, se obtiene la información estadística necesaria para calcular los errores en la inversión de CO_2 .

El código de inversión simultánea de T_k - CO_2 descrito en esta sección se ha utilizado en el Capítulo 3 para evaluar el efecto de las incertidumbres en las constantes colisionales sobre los parámetros invertidos (T_k y CO_2). Asimismo, el código de inversión de T_k en no-ETL se ha utilizado para invertir la temperatura cinética en condiciones nocturnas necesarias para validarlas con las medidas de los lídares (Capítulo 3).

2.5. La inversión Abel: Aplicación a las medidas de la emisión del hidroxilo

El problema de la inversión de las medidas tangenciales (en el limbo) se simplifica notablemente cuando la emisión proviene de bandas que son ópticamente delgadas, es decir, para las que la atmósfera es casi transparente. Si la absorción de la radiación emergente es lo suficientemente pequeña ($\tau \ll 1$), la transmitancia \mathcal{T} se puede aproximar mediante:

$$\mathcal{T}_\nu(x) = \exp[-\tau(x)] \approx 1 - \tau(x) = 1 - \int_x^{x_{obs}} k_\nu(x') n_a(x') dx', \quad (2.52)$$

donde k_ν es el coeficiente de absorción y n_a es la concentración de absorbente, y, por tanto,

$$\frac{d\mathcal{T}_\nu}{dx} \approx k_\nu(x) n_a(x). \quad (2.53)$$

Entonces, la radiancia monocromática en el limbo (Ecuación 2.12) se puede expresar del siguiente modo:

$$L_\nu = \int_x J_\nu(x) \frac{d\mathcal{T}_\nu(x)}{dx} dx \approx \int_x J_\nu(x) k_\nu(x) n_a(x) dx \quad (2.54)$$

donde $J_\nu(x)$ es la función fuente.

Por otra parte, teniendo en cuenta la expresión del coeficiente de absorción de la Ecuación 2.8 y utilizando las relaciones de Einstein (Ecuaciones 2.5), la función fuente se puede escribir a partir de la Ecuación 2.9 mediante:

$$J_\nu = \frac{h\nu}{4\pi} \frac{A_{r,21} q_{r,2} n_2}{k_\nu n_a}, \quad (2.55)$$

donde h es la constante de Planck, c es la velocidad de la luz, n_2 es la población del nivel superior de la banda, $A_{r,12}$ es el coeficiente de Einstein de emisión espontánea y $q_{r,2}$ es el factor normalizado de la distribución de estados rotacionales del nivel superior de la banda definido a partir de $n_{2,J}/n_2$.

Sustituyendo esta última ecuación en la Ecuación 2.54, la radiancia monocromática en condiciones de ópticamente delgado se puede calcular mediante:

$$L_\nu \approx \frac{h\nu}{4\pi} A_{r,21} \int_{x_0}^{x_{obs}} q_{r,2} n_2 dx. \quad (2.56)$$

Esta aproximación es muy práctica ya que reduce notablemente los cálculos. Indica que la emisión en una frecuencia donde la atmósfera es casi transparente es directamente proporcional a la población del nivel superior de la banda responsable de la emisión.

Esta ecuación se aplica para emisiones en banda ancha con sólo integrar sobre la frecuencia. Si se define la función

$$\mathcal{A}_2 = \frac{h}{4\pi} \int_{\Delta\nu} q_{r,2} A_{r,21} F(\nu) d\nu, \quad (2.57)$$

donde la función $F(\nu)$ es la respuesta del instrumento en el intervalo de frecuencia $\Delta\nu$ del canal, entonces, la emisión proveniente de la banda vibracional $2 \rightarrow 1$ recibida en x_{obs} observando a una altura tangente x_i en el intervalo espectral $\Delta\nu$ es

$$L_i = \int_{\Delta\nu} L_\nu d\nu = \int_{x_i}^{x_{obs}} \mathcal{A}_2 n_2 dx. \quad (2.58)$$

Discretizando esta ecuación para integrar a lo largo de la línea de visión teniendo en cuenta la geometría de las observaciones en el limbo se obtiene:

$$L_i = \sum_{j \geq i} G_{ij} \mathcal{A}_{2,j} n_{2,j}, \quad (2.59)$$

donde la sumatoria en j tiene lugar a lo largo de las capas situadas por encima de la capa i y los elementos G_{ij} representan los factores geométricos de la integración entre x_i y x_{obs} y se calculan mediante

$$G_{ij} = \sqrt{(R_T + z_{j+1})^2 - (R_T + z_i)^2} - \sqrt{(R_T + z_j)^2 - (R_T + z_i)^2}, \quad (2.60)$$

donde R_T es el radio de la Tierra, y z_{j+1} y z_j son las alturas superior e inferior de la capa.

Teniendo en cuenta las N capas consideradas, se conforma un sistema de N ecuaciones que matricialmente se puede escribir como

$$\mathbf{L} = \mathbf{G}(\mathbf{A}\mathbf{n}) \quad \Rightarrow \quad \mathbf{A}\mathbf{n} = \mathbf{G}^{-1}\mathbf{L}, \quad (2.61)$$

donde \mathbf{G} es una matriz triangular con $N \times N$ elementos, $G_{ij}=0$ para $j < i$, \mathbf{L} es el vector de radiancias, \mathbf{A} es una matriz diagonal con elementos $A_{jj}=\mathcal{A}_j=\mathcal{A}_{2,j}$ y \mathbf{n} es el vector de poblaciones del nivel superior de la banda.

Este esquema se puede aplicar al caso de las emisiones de las bandas vibracionales del hidroxilo para deducir la población de los niveles vibracionales del OH pues estas bandas son ópticamente delgadas en la mesosfera. Suponiendo que únicamente un nivel ν contribuye a un determinado canal de medida \mathbf{L} , se tiene

$$\mathbf{A}[\text{OH}(\nu)] = \mathbf{G}^{-1}\mathbf{L}, \quad (2.62)$$

luego, para la capa j ,

$$(\mathbf{A}[\text{OH}(\nu)])_j = \mathcal{A}_j[\text{OH}(\nu)]_j = \sum_i (G^{-1})_{ji} L_i, \quad (2.63)$$

donde $(G^{-1})_{ji}$ son los elementos de la inversa de la matriz triangular \mathbf{G} . Despejando se obtiene una expresión para calcular la población o densidad del estado vibracional ν del OH:

$$[\text{OH}(\nu)]_j = \frac{\sum_i (G^{-1})_{ji} L_i}{\mathcal{A}_j}. \quad (2.64)$$

Para poder determinar $[\text{OH}(\nu)]_j$ necesitamos por tanto conocer \mathcal{A}_j . Con ese fin, se hace uso de una población de referencia del nivel vibracional $[\text{OH}(\nu)]^{ref}$ (calculada con un modelo fotoquímico) y, con un modelo de transporte radiativo, se calcula la radiancia en el limbo L^{ref} de modo que

$$\mathbf{A}^{ref}[\text{OH}(\nu)]^{ref} = \mathbf{G}^{-1}\mathbf{L}^{ref} \quad (2.65)$$

y, para cada capa j

$$\mathcal{A}_j^{ref}[\text{OH}(\nu)]_j^{ref} = \sum_k (G^{-1})_{jk} L_k^{ref} \quad \Rightarrow \quad \mathcal{A}_j^{ref} = \frac{\sum_k (G^{-1})_{jk} L_k^{ref}}{[\text{OH}(\nu)]_j^{ref}}, \quad (2.66)$$

donde la sumatoria en k tiene lugar a lo largo de todas las capas.

Suponiendo que la distribución rotacional q_r es casi constante, se puede considerar que $\mathcal{A}_j \approx \mathcal{A}_j^{ref}$, de modo que, sustituyendo la ecuación 2.66 en la 2.64 se tiene

$$[\text{OH}(\nu)]_j = \frac{\sum_i (G^{-1})_{ji} L_i}{\sum_k (G^{-1})_{jk} L_k^{ref}} [\text{OH}(\nu)]_j^{ref}. \quad (2.67)$$

Este esquema se puede generalizar para el caso en el que existan M bandas del hidroxilo que contribuyan en el intervalo espectral $\Delta\nu$. Considerando que la atmósfera es transparente para dichas bandas y que no hay solapamiento de líneas espectrales, la radiancia en el limbo integrada en frecuencia es:

$$L_i = \sum_{j \geq i} G_{ij} \sum_{\nu} \mathcal{A}_{\nu,j} [\text{OH}(\nu)]_j. \quad (2.68)$$

Entonces,

$$\mathcal{W}_j \sum_{\nu} [\text{OH}(\nu)]_j = \sum_i (G^{-1})_{ji} L_i, \quad (2.69)$$

donde se ha definido la variable normalizada $\mathcal{W}_j = \frac{\sum_{\nu} \mathcal{A}_{\nu,j} [\text{OH}(\nu)]_j}{\sum_{\nu} [\text{OH}(\nu)]_j}$ tal que $\mathcal{A}_{\nu,j}$ es la función de la Ecuación 2.57 para el nivel ν en la capa j y la sumatoria en ν es sobre los M niveles vibracionales responsables de las emisiones en el intervalo $\Delta\nu$.

Suponiendo que la distribución relativa de moléculas de OH en los estados vibracionales $\nu=1, M$ no varía demasiado con respecto a la de referencia o en el caso en que las funciones $\mathcal{A}_{\nu,j}$ no dependan fuertemente de ν , se puede considerar $\mathcal{W}_j \approx \mathcal{W}_j^{ref}$. Entonces, análoga a la Ecuación 2.67, se puede escribir

$$\sum_{\nu} [\text{OH}(\nu)]_j = \frac{\sum_i (G^{-1})_{ji} L_i}{\sum_k (G^{-1})_{jk} L_k^{ref}} \sum_{\nu} [\text{OH}(\nu)]_j^{ref}. \quad (2.70)$$

De este modo, se puede derivar la suma de las poblaciones de los niveles que contribuyen a la radiancia en un canal. Para obtener la población de M niveles, se deben utilizar M canales diferentes para conformar un sistema de M ecuaciones del tipo de la ecuación 2.70 y resolver para cada $\text{OH}(\nu)$.

Este esquema de inversión se ha utilizado en el Capítulo 5 para derivar las poblaciones de los estados vibracionales del hidroxilo y así evaluar la excitación de los estados $\text{CO}_2(\nu_3)$ debida al OH^* . Allí se dan detalles del modelo fotoquímico del OH con el que se calculan las densidades de referencia (Sección 5.3.1).

Parte II

Resultados

Capítulo 3

Inversión de T_k y CO_2 de SABER en no-ETL: Incertidumbres debidas a parámetros cinéticos

Síntesis

El conocimiento preciso de la temperatura cinética (T_k) y de la abundancia de dióxido de carbono en la mesosfera y la baja termosfera es necesario para poder determinar los procesos responsables no sólo del balance energético sino también de la dinámica y la química atmosféricas. El instrumento SABER proporciona medidas de las emisiones del CO_2 alrededor de $15 \mu\text{m}$ y de $4.3 \mu\text{m}$ de forma continuada y a escala global a partir de las cuales se obtienen perfiles de T_k y CO_2 invertidos de manera simultánea. Teniendo en cuenta que en la media-alta atmósfera las emisiones del CO_2 en estas longitudes de onda están afectadas por procesos de no-ETL, el código de inversión debe contar con un modelo capaz de calcular las poblaciones de los niveles vibracionales del CO_2 bajo dichas condiciones. En este tipo de modelos se incluyen los procesos colisionales que condicionan dichas poblaciones. Sin embargo, las constantes que los caracterizan no son del todo bien conocidas. En este trabajo, se realiza un estudio del efecto que tienen las incertidumbres en los parámetros colisionales sobre la T_k y el CO_2 invertidos de SABER con el fin de caracterizar este tipo de errores sistemáticos. Se identifican aquellos procesos cuyas constantes han de ser medidas con mayor precisión para poder cumplir los objetivos de SABER de invertir T_k y CO_2 con errores menores de 3 K hasta 100 km y 15% hasta 140 km respectivamente.

3.1. Introducción

Desde que SABER (Sounding of the Atmosphere using Broadband Emission Radiometry) fue lanzado el 7 de diciembre de 2001, ha estado midiendo en sus 10 canales ininterrumpidamente hasta la fecha. Este instrumento sondea la atmósfera terrestre en el limbo desde 10 hasta más de 300 km de altura midiendo las emisiones en longitudes de

onda comprendidas entre 1.27 y 15 μm con una alta relación señal-ruido. En la sección 1.4.1 se hace una descripción detallada del instrumento.

Uno de los principales objetivos de SABER es registrar la temperatura cinética hasta los 100 km con una precisión de 3 K tanto de día como de noche y de forma global, y así conformar el primer conjunto de medidas globales diurnas y nocturnas de la mesosfera y baja termosfera (en adelante, MBT). El principal interés de conseguir perfiles de presión y temperatura ($p\text{-}T_k$) es, no sólo para poder obtener otros parámetros físicos, sino para facilitar, entre otras cosas, la identificación de los procesos responsables del desarrollo de la fría mesopausa de los veranos polares y el cálculo preciso del balance energético en el infrarrojo (CO_2 en 15 μm) en la atmósfera terrestre.

Para obtener la T_k de manera precisa en estas regiones, también es necesario conocer la abundancia de dióxido de carbono. Por esto, otro de los propósitos de SABER es la determinación de la concentración de CO_2 en la región MBT con una precisión del 15 %. Por otra parte, la altura donde el CO_2 deja de estar uniformemente mezclado (denominada homopausa) ha estado tradicionalmente situada a 100 km. Trabajos publicados recientemente (ver p.e. *López-Puertas y col.*, 2000) apuntan que la homopausa se sitúa a alturas muy por debajo de ésta. El elevado número de perfiles de CO_2 que SABER proporciona diariamente en un amplio intervalo latitudinal (52°S-83°N alternado cada dos meses con 83°S-52°N) permitirá determinar dicha altura con mejor precisión.

El planteamiento del problema, en el que para derivar la temperatura cinética es necesario conocer el dióxido de carbono y viceversa, sugiere la inversión de ambos en la región MBT de manera simultánea. Con este fin, SABER está equipado con cuatro canales diseñados para registrar las emisiones del CO_2 en el limbo tanto alrededor de 15 μm (tres canales) como de 4.3 μm (un canal) (ver Figura 1.9). A partir de estas medidas se invierten simultáneamente los perfiles de $p\text{-}T_k$ y de CO_2 .

En estas regiones de la atmósfera de tan baja densidad las colisiones no son lo suficientemente frecuentes como para mantener condiciones de Equilibrio Termodinámico Local (ETL) y las poblaciones de los niveles emisores en dadas longitudes de onda se encuentran en no-ETL. En otras palabras, la función fuente en condiciones de no-ETL no coincide con la función de Planck a la temperatura local. De hecho, si se considera la emisión del CO_2 en la región MBT conforme a la función de Planck, los errores cometidos en la inversión de T_k y CO_2 pueden ser de hasta 30 ó 40 K y 80 % respectivamente. Surge por ello la necesidad de utilizar un código de inversión capaz de considerar procesos de no-ETL.

El código desarrollado para invertir las medidas de SABER en 15 μm y 4.3 μm incluye un módulo que calcula las poblaciones de los niveles vibracionales del CO_2 responsables de estas emisiones bajo condiciones de no-ETL. Para realizar los cálculos se consideran de forma detallada, junto a procesos de otro carácter (como los radiativos), las colisiones entre moléculas de la atmósfera. El conjunto de estas colisiones son, en parte, determinantes de

las poblaciones de los estados vibracionales del CO₂. Es por tanto de gran importancia considerar de modo adecuado estos procesos y, en particular, conocer de manera precisa las constantes o tasas colisionales que los caracterizan.

Hoy por hoy varias de estas constantes no están determinadas con gran precisión. Esto produce una indeterminación en el modelado de las poblaciones de los niveles vibracionales del CO₂ y, en consecuencia, en la temperatura cinética y el dióxido de carbono que derivadas de SABER. En este capítulo se analiza la importancia y el efecto que tienen las incertidumbres asociadas a estos parámetros cinéticos sobre la T_k y el CO₂ invertidos de las medidas de SABER en 15 μm y 4.3 μm respectivamente.

En la siguiente sección se analiza el comportamiento de las emisiones del CO₂ en 15 y 4.3 μm. En la sección 3.3 se describe de modo resumido el esquema utilizado para la inversión simultánea de T_k y CO₂ de las medidas de SABER así como los procesos que introducen mayores errores. En la sección 3.4 se presentan los errores inducidos en la T_k y el CO₂ debidos a las incertidumbres en los parámetros colisionales para tres condiciones atmosféricas (una típica y dos extremas). Se completa el capítulo con un resumen y una discusión.

3.2. Las emisiones diurnas del CO₂ en 15 y 4.3 μm

Las emisiones de la atmósfera terrestre en 15 y 4.3 μm son fundamentalmente debidas a la desexcitación del dióxido de carbono vibracionalmente excitado. Por tanto dependen de la población de los estados vibracionales involucrados. Los mecanismos que condicionan dichas poblaciones son las colisiones entre moléculas y los procesos de carácter radiativo. Los principales procesos colisionales que afectan a las poblaciones de los niveles vibracionales del CO₂ son de tipo: 1) *vibracional-traslacional* (V-T): en los que una molécula se excita o desexcita vibracionalmente a costa o en favor de la energía cinética de otra; 2) *vibracional-vibracional* (V-V): en los que una molécula sufre una desexcitación vibracional en favor de una excitación vibracional de otra; y 3) *electrónica-vibracional* (E-V): en los que, de modo análogo al tipo anterior, una molécula excitada electrónicamente se desexcita para excitar vibracionalmente a una segunda. Entre los procesos de origen radiativo se encuentran: 1) el intercambio de energía entre diferentes regiones atmosféricas (transporte radiativo); 2) la absorción de radiación solar; y 3) la emisión espontánea.

En las Figuras 3.1 y 3.2 se representan las temperaturas vibracionales (ver Ecuación 2.32) de los principales niveles del CO₂ responsables de las emisiones alrededor de 15 y 4.3 μm en condiciones diurnas para atmósferas típicas de latitudes medias (ángulo cenital solar (ACS) de 60°), verano polar (ACS=60°) e invierno polar (ACS=80°). Estas temperaturas vibracionales se han calculado incluyendo los procesos de la Tabla 3.3 (pág. 71) y utilizando los valores nominales de las tasas colisionales.

En general, por debajo de la estratopausa los estados del CO₂ están en condiciones

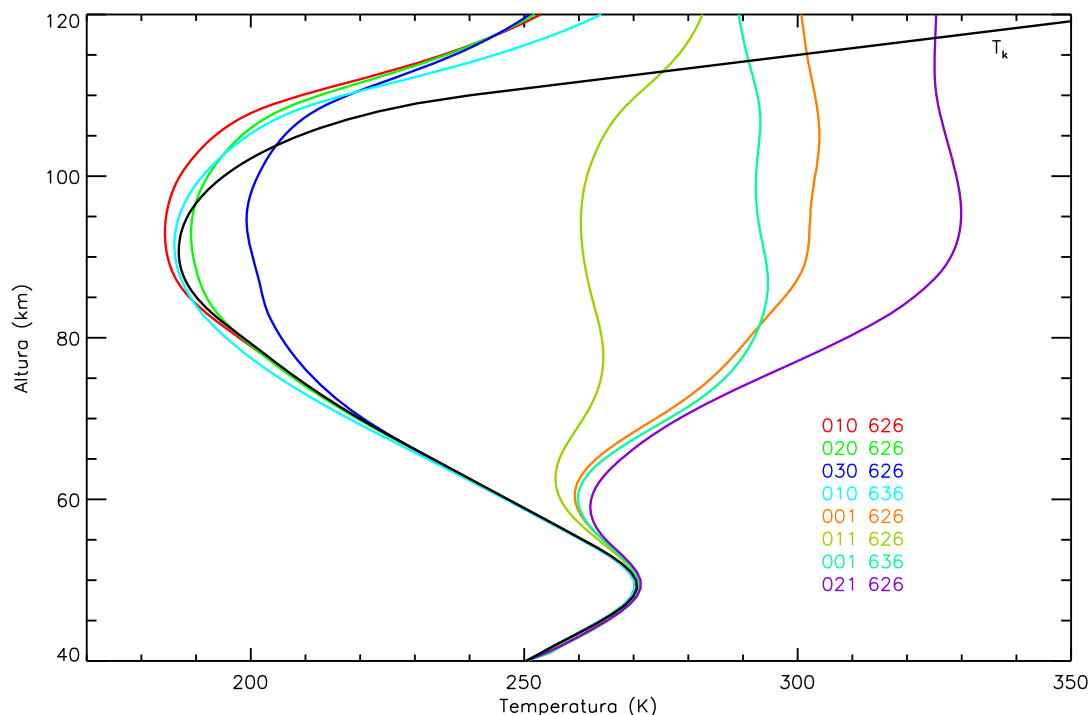


Figura 3.1: Temperaturas vibracionales de los principales niveles del CO_2 responsables de las emisiones en $15 \mu\text{m}$ (grupo izdo.) y en $4.3 \mu\text{m}$ (grupo dcho.) de día en latitudes medias.

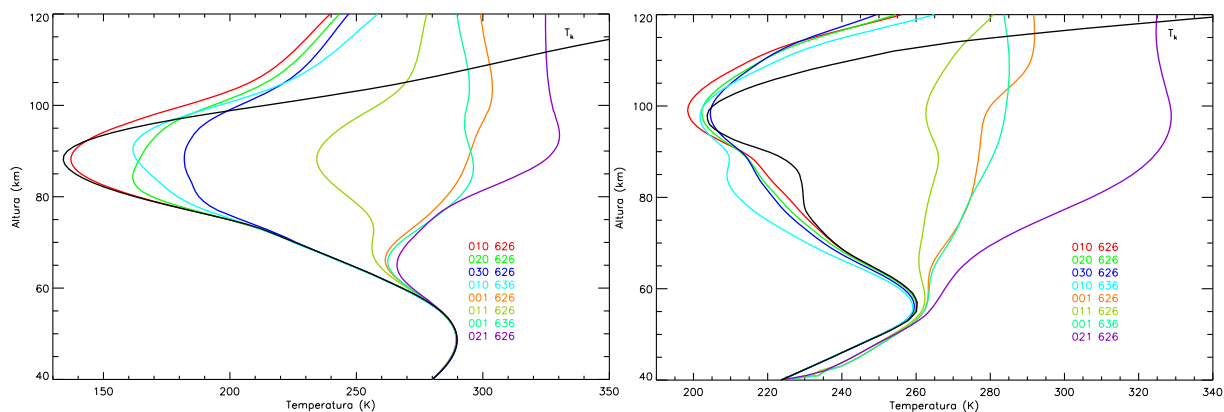


Figura 3.2: Como en la Figura 3.1 pero en verano polar (izda.) y en invierno polar (dcha.)

de ETL ya que, por ser la densidad de moléculas lo suficientemente elevada, dominan los procesos colisionales térmicos (V-T). Estos procesos son los responsables del intercambio de la energía cinética del medio con la energía vibracional de las partículas y son los causantes de que las poblaciones de los niveles vibracionales obedezcan una distribución de Boltzmann. Esto quiere decir que la temperatura vibracional coincide con la temperatura cinética local ($T_v = T_v$). En cambio, por encima de esta altura, muchos de estos estados se empiezan a separar de estas condiciones. Esto es debido a la baja densidad de partículas

en estas regiones atmosféricas que resulta en una menor frecuencia de colisiones. En consecuencia, las poblaciones de los estados vibracionales están determinadas no sólo por las colisiones de carácter térmico sino por la combinación de las mismas con procesos de tipo radiativo y con colisiones donde hay intercambio de energía vibracional (V-V).

Para entender el comportamiento de las temperaturas vibracionales de los niveles de CO₂, es útil recordar algunas consideraciones de carácter general:

- a) Los niveles vibracionales de energía elevada están poco poblados. Por esto, el número de colisiones en las que intervienen moléculas excitadas en estos niveles es pequeño. En concreto, las colisiones de tipo V-T son menos frecuentes por lo que dichos niveles tienden a estar más alejados del ETL. En ese sentido, y en ausencia de otros procesos que dominen, cuanto más energético sea un nivel vibracional más separada estará su temperatura vibracional de la temperatura cinética local.
- b) La excitación de los niveles vibracionales en la alta mesosfera debido a la absorción de la radiación ascendente será tanto mayor cuanto mayor sea la temperatura de la capa donde se genera esa radiación. De esto se deducen dos aspectos importantes:
 - I) En condiciones de verano polar, donde la temperatura cinética de la estratopausa es muy elevada, la excitación de los niveles vibracionales en la mesopausa debida a absorción de energía proveniente de la baja mesosfera es mayor que en otras condiciones.
 - II) Las bandas más débiles dejan de ser ópticamente espesas a alturas inferiores. Eso quiere decir que el flujo ascendente en esa banda proviene de capas más bajas. Teniendo en cuenta la estructura térmica de la mesosfera, la temperatura cinética de las capas más bajas es mayor, luego el flujo ascendente será mayor. En definitiva, la excitación por absorción de radiación ascendente será mayor en los niveles vibracionales correspondientes a bandas más débiles.
- c) Los posibles mecanismos de excitación por absorción de radiación solar y la posterior transferencia de dicha energía son de gran importancia. Los niveles vibracionales superiores de bandas en las que se absorbe radiación solar o aquellos que, ya sea mediante procesos V-V o procesos de desexcitación radiativa, estén directamente conectados a los mismos, tienen temperaturas vibracionales altamente dependientes del ángulo cenital solar. Además, cuanto mayor sea la población del nivel inferior de dicha banda y cuanto más cercana esté la energía de dicha banda a la energía en la que la radiación solar es máxima ($\lambda_{\max}=0.5 \mu\text{m}$), mayor será la excitación del nivel superior debida a absorción de radiación solar.

Estos conceptos serán de aplicación directa en los casos en que alguna de las situaciones descritas arriba sea dominante o para diferenciar comportamientos de niveles que se

encuentran bajo las mismas condiciones (por ejemplo, niveles cuyos mecanismos de excitación son del mismo tipo). El razonamiento es más complicado si hay procesos que pueblan los niveles de mayor o igual importancia que la de los anteriores. Por tanto, al analizar el comportamiento de la T_v de un cierto nivel se deben tener en cuenta, además de estos conceptos, la importancia de los posibles mecanismos de excitación en los que el nivel en cuestión esté involucrado. A continuación se describe el comportamiento de las temperaturas vibracionales de los principales niveles del CO_2 .

Poblaciones de los niveles en 15 y 4.3 μm

En cuanto a los niveles en 15 μm (niveles ν_2), el primer nivel excitado (01^10), tanto del isótopo principal como de los isótopos minoritarios, y los segundos niveles excitados (02^00 , 02^20 y 10^00 , representados por 020) se mantienen en ETL hasta unos 90 km en latitudes medias. El grupo de niveles 030 (y también, aunque no representados, el grupo 040) poseen poblaciones mayores a las correspondientes al ETL (es decir, $T_v > T_k$) por encima de aproximadamente 70 km. Esto se debe a que, aparte de que son grupos de niveles correspondientes a bandas débiles por lo que están más excitados por absorción de radiación ascendente, se excitan en condiciones diurnas mediante intercambio de energía vibracional con el nivel 00^01 . Por encima de 100 km, la densidad es tan baja que únicamente las colisiones con el abundante oxígeno atómico y la absorción de radiación ascendente condicionan las poblaciones de los niveles ν_2 . Por esto, las temperaturas vibracionales son significativamente menores que la T_k .

En verano polar, todos los niveles en 15 μm excepto el nivel 01^10 del isótopo principal se separan del ETL alrededor de 75 km. En este caso los efectos de no-ETL son mayores porque la temperatura cinética en la baja mesosfera es muy alta y en la alta mesosfera muy baja. Esto se traduce en dos efectos combinados. Por un lado, la radiación proveniente de la baja mesosfera es mayor por lo que la excitación por absorción de flujo ascendente también lo es. Por otro lado, al tener una mesosfera alta más fría, las colisiones de tipo V-T son menos frecuentes en esta región. Por ello los niveles están más alejados del ETL que en los otros casos, es decir, la diferencia entre las temperaturas vibracionales y la temperatura cinética es mayor.

En invierno polar, también el nivel 01^10 está en condiciones de no-ETL por encima de 75 km. Entre 75 y 90 km, la T_k sufre un cambio de pendiente con el consiguiente aumento de la misma. A pesar de que esto aumenta la tasa de las colisiones térmicas, las pérdidas radiativas son muy elevadas y, ni siquiera para el caso del nivel 01^10 las colisiones son lo suficientemente frecuentes como para compensar dicho cambio. Además, la T_k de la baja mesosfera es menor que en los otros casos. Por todo ello, los estados en 15 μm tienen poblaciones menores a las que les corresponderían en condiciones de ETL. En relación a los niveles correspondientes a los grupos 030 y 040, se une el hecho de que, por ser el ángulo cenital solar muy elevado, la excitación del nivel 00^01 , parcial responsable de la

población de los grupos mencionados, es menor que en los casos de las otras dos atmósferas consideradas.

La principal fuente de excitación de los **niveles en 4.3 μm** (niveles ν_3) en condiciones diurnas es la absorción de radiación solar. El nivel base absorbe radiación en 4.3 μm y en 2.7 μm para poblar los niveles 00⁰1 y los del grupo 021 (es decir, 02²1 02⁰1 10⁰1) respectivamente. El nivel 01¹1, sin embargo, se excita mediante la absorción de radiación solar en 4.3 μm por parte del nivel 01¹0. Al estar menos poblado el nivel 01¹0 que el base, el nivel 01¹1, aun siendo más energético que el nivel 00⁰1, está menos alejado del ETL. Por otra parte, el intercambio de energía vibracional con el nitrógeno molecular excitado es un proceso determinante en la población de estos niveles. Este mecanismo es el responsable de la distribución de la energía solar absorbida entre todos los niveles en 4.3 μm de los isótopos del CO₂. Los niveles ν_3 se separan del ETL desde la baja mesosfera y tienen un comportamiento similar (principalmente función del ángulo cenital solar) en las tres atmósferas consideradas.

Radiancias del CO₂ en 15 y 4.3 μm

En la Figura 3.3 se representan las radiancias en el canal estrecho en 15 μm (canal 1) y en el canal en 4.3 μm de SABER (canal 7) para las tres atmósferas de referencia. Han sido calculadas mediante el modelo línea-a-línea LINEPAK, (*Gordley y col.*, 1994) utilizando las temperaturas vibracionales del CO₂ de las Figuras 3.1 y 3.2, y las bandas mostradas en las Figuras 3.1 y 3.2. Estas radiancias sintéticas se utilizan en las siguientes secciones para simular inversiones de T_k-CO₂ y realizar el estudio de sensibilidad a los parámetros cinéticos.

Las emisiones alrededor de 15 μm disminuyen al aumentar la altura de observación debido a la disminución de la concentración de CO₂ con la altura. La diferencia que se observa entre las radiancias para cada una de las tres atmósferas refleja el diferente comportamiento de las temperaturas vibracionales de los niveles responsables de la emisión en esta región espectral (fundamentalmente los niveles fundamentales de los isótopos 626 y 636). Por debajo de 70 km, estos niveles están en ETL. Por tanto, y teniendo en cuenta que en estas regiones atmosféricas la temperatura cinética es mayor en el verano polar y menor en invierno polar, la radiancia en 15 μm es máxima en el primer caso y mínima en el segundo. Entre 70 y 100 km, aunque algo más separados del ETL que en alturas inferiores, la T_v de estos niveles continúa reflejando la T_k local de modo que la radiancia es mayor para el caso de invierno polar y menor para el de verano polar. Por encima de 100 km, la radiancia es similar en los tres casos considerados, aún teniendo en cuenta que en verano polar la temperatura cinética es significativamente más elevada. Esto se debe a que, en estas regiones, la radiancia en 15 μm contiene poca información sobre la T_k ya que la población de los niveles del CO₂ está dominada por procesos radiativos. La radiancia en latitudes medias presenta un valor intermedio en todo el intervalo de alturas

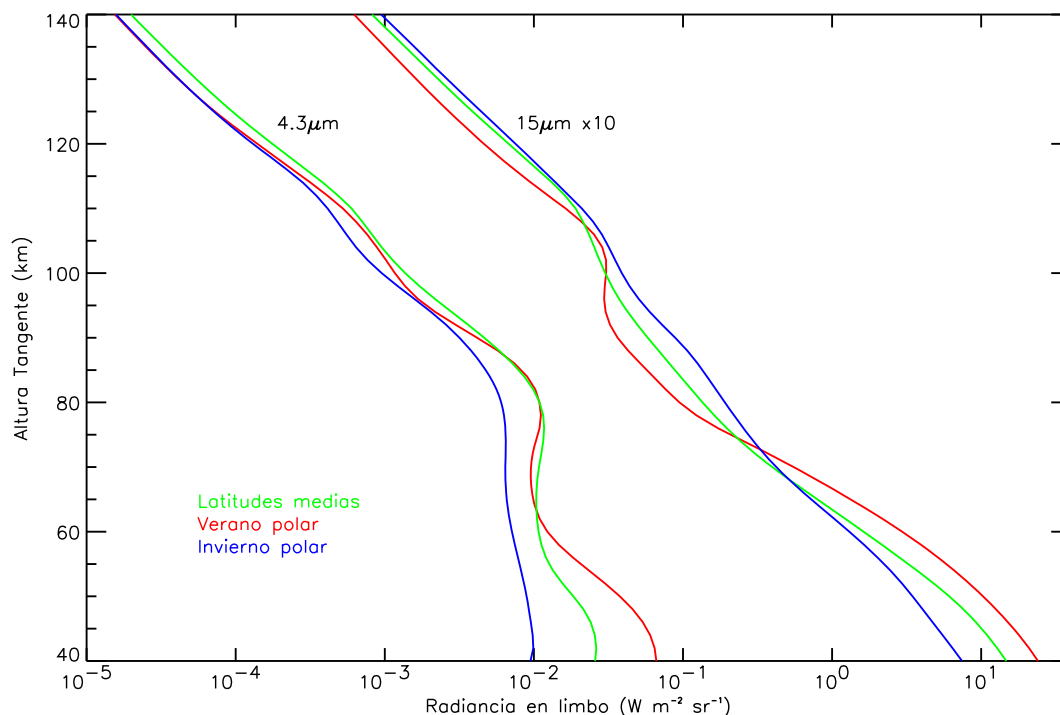


Figura 3.3: Radiancias sintéticas en los canales en $4.3 \mu m$ (grupo izda.) y $15 \mu m$ (grupo dcha.; escalada en un factor 10) de SABER simuladas para condiciones medias (verde), verano polar (rojo) e invierno polar (azul).

considerado.

La radiancia en $4.3 \mu m$ disminuye al aumentar la altura tangente excepto en la mesosfera media. En esta región, como se verá más adelante, la banda fundamental del isótopo principal es ópticamente espesa y son los niveles en $2.7 \mu m$ (grupo 021) los principales responsables de las emisiones en esta longitud de onda. Sus temperaturas vibracionales aumentan significativamente a estas alturas y, a pesar de que la densidad de CO_2 disminuye con la altura, la radiancia alrededor de $4.3 \mu m$ permanece casi constante entre 60 y 85 km. Por otra parte, por debajo de 60 km, los niveles vibracionales del CO_2 están en ETL por lo que la radiancia en $4.3 \mu m$ depende de la T_k , es decir, es mayor en verano polar y menor en invierno polar. Entre 60 y 90 km, la excitación principal de los niveles vibracionales del CO_2 en $4.3 \mu m$ proviene de la excitación por absorción de radiación solar. Por tanto, la radiancia depende fundamentalmente del ángulo cenital solar (ACS), siendo mayor para los casos en los que se ha considerado un ACS menor (atmósferas de latitudes medias y verano polar). Por encima de la mesopausa, la radiancia es similar para los tres casos.

Con el fin de estudiar el comportamiento de las emisiones de cada banda vibracional del CO_2 y de otras especies en los canales de SABER en 15 y $4.3 \mu m$, se realiza a continuación un análisis de la contribución de estas bandas a las radiancias totales para el caso de latitudes medias.

Tabla 3.1: Bandas del CO₂ y del O₃ que contribuyen a la radiancia en el canal en 15 μm de SABER.

Especie	Isótopo	Grupo	Nivel ^a Superior	Nivel Inferior	Núm. Onda [cm ⁻¹]	Intensidad ^b [×10 ⁻²² cm ⁻¹ cm ²]	
CO ₂	626	FB	01 ¹ 0	00 ⁰ 0	667.380	79451.727	
			FH	02 ⁰ 0	01 ¹ 0	618.029	1364.291
				02 ² 0	01 ¹ 0	667.752	6257.199
	10 ⁰ 0	01 ¹ 0		720.805	1395.613		
	626	SH	03 ¹ 0	02 ⁰ 0	647.062	212.882	
			03 ³ 0	02 ² 0	668.115	368.838	
			11 ¹ 0	10 ⁰ 0	688.671	144.014	
	636	FB	01 ¹ 0	00 ⁰ 0	648.478	824.749	
	636	FH	02 ⁰ 0	01 ¹ 0	617.350	19.480	
			02 ² 0	01 ¹ 0	648.786	70.505	
			10 ⁰ 0	01 ¹ 0	721.584	17.052	
	628	FB	01 ¹ 0	00 ⁰ 0	662.374	317.399	
	628	FH	02 ² 0	01 ¹ 0	662.768	25.356	
			10 ⁰ 0	01 ¹ 0	703.470	7.930	
	627	FB	01 ¹ 0	00 ⁰ 0	664.729	59.857	
627	FH	02 ² 0	01 ¹ 0	665.114	4.701		
		10 ⁰ 0	01 ¹ 0	711.299	1.219		
O ₃	666	FB	01 ¹ 0	00 ⁰ 0	700.931	(0.233 ^c)	

^aNotación de Herzberg^bValores a $T=296$ K.^cCoefficiente de Einstein (en s⁻¹).

En la Tabla 3.1 se muestran las principales bandas vibracionales del CO₂ que contribuyen a las emisiones atmosféricas **alrededor de 15 μm** y sus características espectrales. En las Figuras 3.4 y 3.5 se representan las contribuciones absoluta y relativa de estas bandas a la radiancia en el limbo alrededor de 15 μm para latitudes medias durante el día en condiciones de no-ETL.

Por encima de 100 km, la radiancia proviene casi en su totalidad (hasta un 90 %) de las emisiones de la banda fundamental (FB) en 15 μm del isótopo principal de CO₂, es decir, la banda 01¹0-00⁰0. Por debajo de esta altura el espesor óptico de esta banda aumenta y otras bandas, especialmente el grupo de las primeras bandas calientes del mismo isótopo (FH) y las bandas fundamentales de los isótopos minoritarios (FB(ISO)), empiezan a contribuir a la radiancia de manera significativa. Alrededor de 90 km, la contribución de las primeras bandas calientes del isótopo 626 es de más de un 30 %. A 75 km, la contribución de las bandas fundamentales de los isótopos minoritarios es

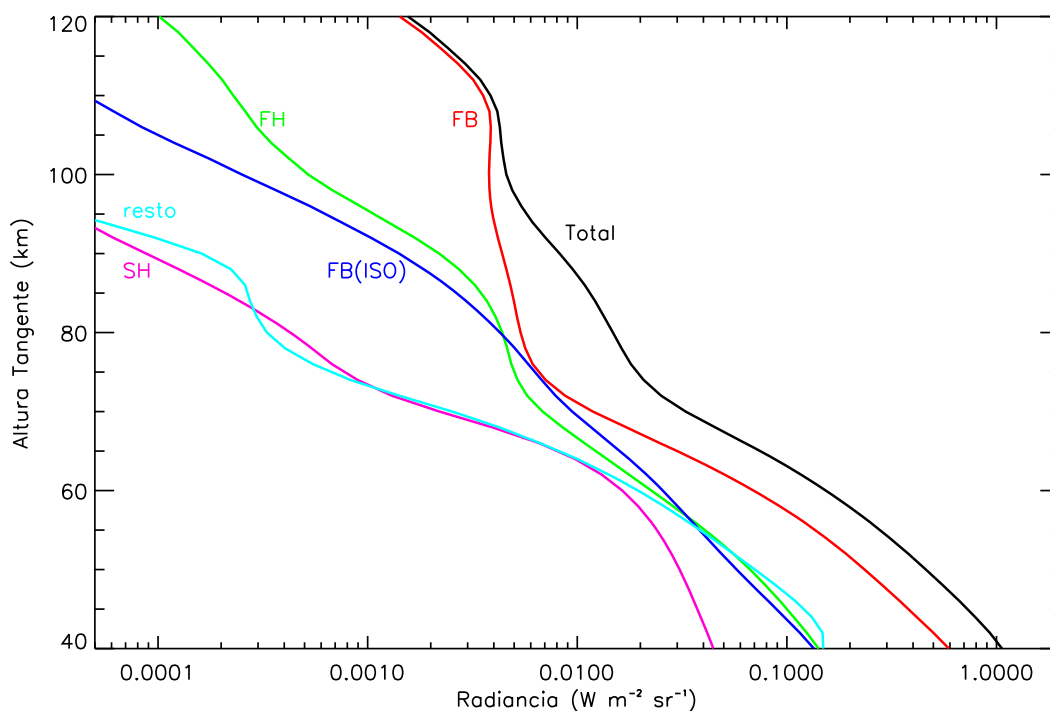


Figura 3.4: Contribuciones de las bandas fundamentales de los isótopos mayoritario (rojo) y minoritario (azul), primeras (verde) y segundas (rosa) bandas calientes del 626, y primeras bandas calientes de los minoritarios del CO_2 junto a la 010-000 del O_3 (celeste) a la radiancia total (negro) en el canal en $15\ \mu m$ de SABER durante el día en latitudes medias.

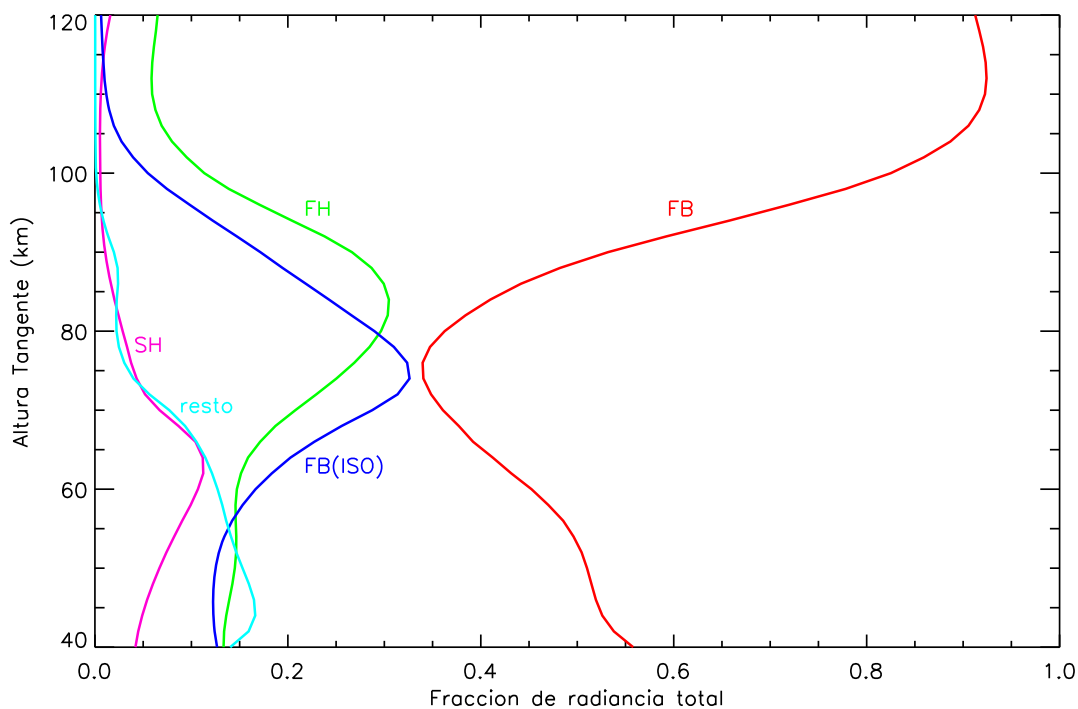


Figura 3.5: Contribuciones relativas de las principales bandas del CO_2 al canal en $15\ \mu m$ de SABER durante el día en latitudes medias. Los colores son iguales a los de la Figura 3.4.

comparable a la del isótopo mayoritario, es decir alrededor de un 35 % de la radiancia total. Alrededor de 65 km, la emisión de las segundas bandas calientes (SH) supera el 10 %. A alturas inferiores, la contribución de la banda fundamental vuelve a aumentar aunque la suma total de las contribuciones del resto de las bandas varía entre un 60 y un 45 %. Como se observa en las figuras, para realizar simulaciones precisas de la radiancia en 15 μm por debajo de 60 km, es necesario modelar las emisiones provenientes tanto de la banda fundamental ν_2 del O₃ como de las primeras bandas calientes (FH) de los isótopos minoritarios (representadas en la figuras mediante 'resto') ya que suponen algo más del 15 % de la radiancia total.

En resumen, en la baja termosfera la banda fundamental del isótopo 626 del CO₂ es la principal responsable de la radiancia en el limbo alrededor de 15 μm. Sin embargo, en la mesosfera su contribución es equiparable a la dada por las primeras bandas calientes del 626 y las bandas fundamentales de los isótopos minoritarios. Por debajo de 60 km, si bien la radiancia proviene sobre todo de las emisiones la banda fundamental del 626, la contribución del resto de bandas es de gran importancia.

En la Tabla 3.2 se muestran las bandas del CO₂ responsables de las emisiones **alrededor de 4.3 μm**. En las Figuras 3.6 y 3.7 se representan las contribuciones absolutas y

Tabla 3.2: Bandas del CO₂ que contribuyen a la radiancia en el canal en 4.3 μm de SABER.

Isótopo	Grupo	Nivel ^a Superior	Nivel Inferior	Núm. Onda [cm ⁻¹]	Intensidad ^b [× 10 ⁻²² cm ⁻¹ cm ²]
626	FB	00 ⁰ 1	00 ⁰ 0	2349.143	955357.125
626	FH	01 ¹ 1	01 ¹ 0	2336.632	73666.258
626	SH	02 ² 1	02 ² 0	2324.141	2838.857
		02 ⁰ 1	02 ⁰ 0	2327.433	1789.326
		10 ⁰ 1	10 ⁰ 0	2326.598	1079.329
626	TH	03 ¹ 1	03 ¹ 0	2315.235	14.610
		03 ³ 1	03 ³ 0	2311.667	10.260
		11 ¹ 1	11 ¹ 0	2313.773	72.010
626	FrH	04 ⁰ 1	04 ⁰ 0	2305.256	3.630
		04 ² 1	04 ² 0	2302.963	6.073
		12 ⁰ 1	12 ⁰ 0	2306.692	1.961
		04 ⁴ 1	04 ⁴ 0	2299.214	3.908
		12 ² 1	12 ² 0	2301.053	2.550
		20 ⁰ 1	20 ⁰ 0	2302.525	1.069
636	FB	00 ⁰ 1	00 ⁰ 0	2283.488	9598.150
628	FB	00 ⁰ 1	00 ⁰ 0	2332.113	3518.852
627	FB	00 ⁰ 1	00 ⁰ 0	2340.014	647.575

^aNotación de Herzberg

^bValores a $T=296$ K.

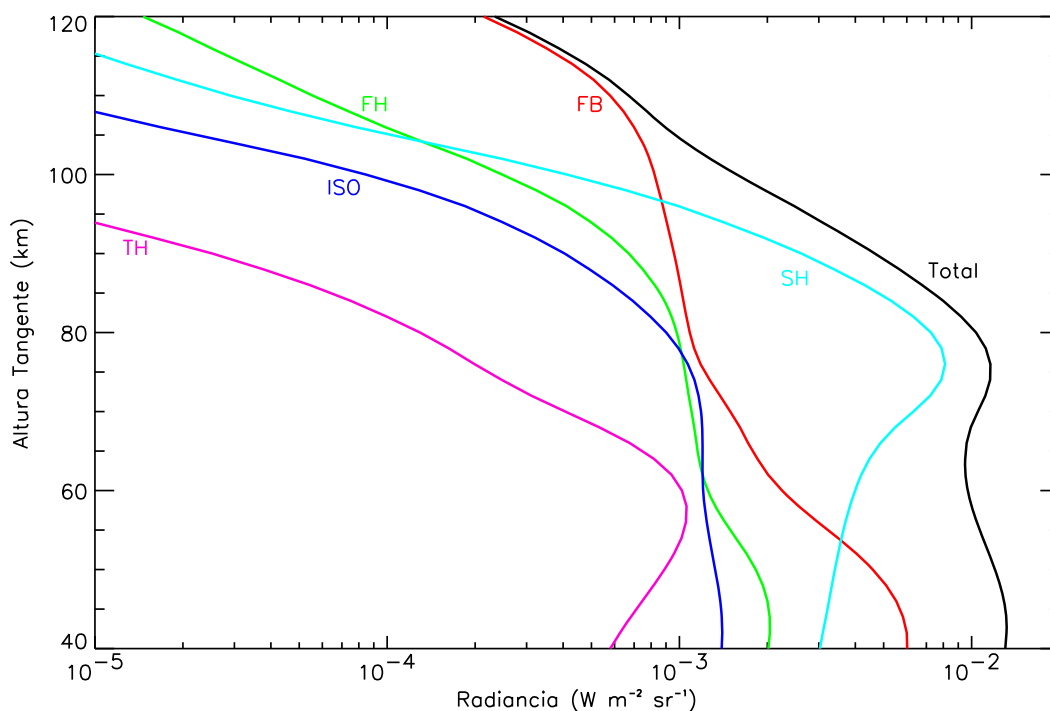


Figura 3.6: Contribuciones de las bandas fundamentales de los isótopos mayoritario (rojo) y minoritarios (azul) y primera (verde), segundas (celeste) y terceras (rosa) bandas calientes del CO_2 a la radiancia total (negro) en el canal en $4.3 \mu\text{m}$ de SABER durante el día en latitudes medias.

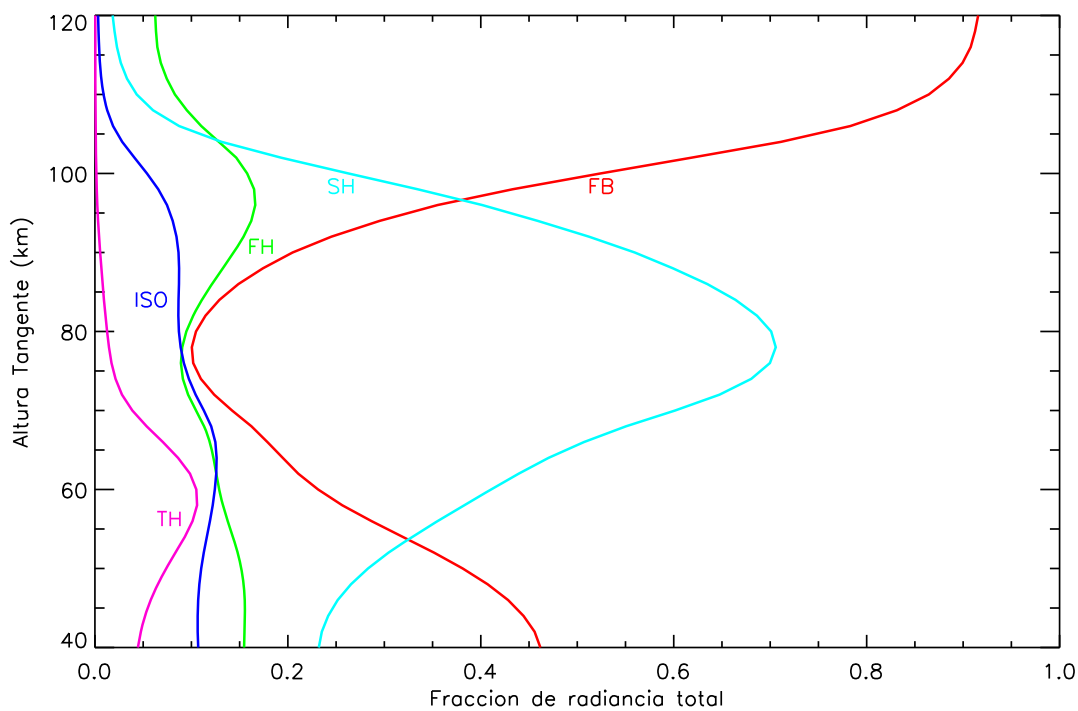


Figura 3.7: Contribuciones relativas de las principales bandas del CO_2 al canal de SABER en $4.3 \mu\text{m}$ durante el día en latitudes medias. Los colores son iguales a los de la Figura 3.6.

relativas de dichas bandas a la radiancia total en $4.3 \mu\text{m}$ en condiciones diurnas.

La emisión de banda fundamental (FB) en $4.3 \mu\text{m}$ del isótopo principal del CO_2 (banda $00^0 1-00^0 0$) constituye la principal contribución a la radiancia por encima de 100 km. A esta altura, la primera banda caliente (FH ó $01^1 1-01^1 0$) de este mismo isótopo alcanza casi un 20 % del valor de la radiancia total y las segundas bandas calientes casi un 30 %. La banda fundamental empieza a ser ópticamente espesa a alturas elevadas. De hecho, entre 80 y 105 km, la emisión proveniente de esta banda permanece casi constante. Además, a medida que se desciende en altura, su contribución relativa disminuye drásticamente siendo menor del 20 % entre 60 y 90 km. En esta región, el grupo de las segundas bandas calientes del CO_2 626 dominan la radiancia en el canal en $4.3 \mu\text{m}$, alcanzando una contribución relativa de hasta un 70 %. Por debajo de 60 km aumenta de nuevo la contribución de la banda fundamental aunque la contribución del resto de las bandas supone más del 50 %. Aún teniendo en cuenta que la contribución de los isótopos minoritarios y de las terceras y cuartas bandas calientes del principal no superan a ninguna altura considerada más del 10 % de la radiancia total, es necesario modelarlas para realizar cálculos precisos de la radiancia en el limbo alrededor de $4.3 \mu\text{m}$.

El resto de bandas que según la base de datos espectroscópica HITRAN (*Rothman y col.*, 2003) contribuyen en las frecuencias de estos dos canales suponen menos de un 1 % de la radiancia total de SABER en $15 \mu\text{m}$ y $4.3 \mu\text{m}$.

3.3. La inversión simultánea de las radiancias de SABER en 15 y $4.3 \mu\text{m}$

El código utilizado para invertir las radiancias de SABER en perfiles de T_k y de CO_2 es el desarrollado por *Mertens y col.* [2002]. Con dicho código se pueden invertir simultáneamente perfiles de ambas magnitudes a partir de medidas de emisiones atmosféricas en el limbo en $15 \mu\text{m}$ y $4.3 \mu\text{m}$. Está compuesto por dos módulos: 1) el modelo directo, y 2) el modelo inverso. El modelo directo se compone a su vez del modelo de no-ETL, basado en el desarrollado por *López-Puertas y col.* [1986a, 1986b, 1998] y *López-Puertas y Taylor* [2001] y del modelo de radiancia en el limbo BANDPAK, desarrollado por *Marshall y col.* [1994]. El modelo inverso se divide asimismo en dos módulos independientes: el de inversión de temperatura cinética y el de inversión de dióxido de carbono.

De forma resumida, el método consiste en buscar una combinación de perfiles de CO_2 y T_k de modo que se reproduzcan simultáneamente las medidas en 4.3 y $15 \mu\text{m}$ dentro de los errores de las medidas. Para ello, se calculan las poblaciones de los niveles del CO_2 responsables de las emisiones con el modelo de no-ETL utilizando perfiles iniciales de CO_2 y T_k proporcionados por modelos climatológicos. Haciendo uso de dichas poblaciones, se simulan las radiancias en 15 y $4.3 \mu\text{m}$ con BANDPAK y se comparan con las medidas de

SABER correspondientes. En caso de que las diferencias sean menores que cierto valor (relacionado con el ruido del instrumento), los perfiles utilizados se aceptan como solución. En caso contrario, se actualizan dichos perfiles y se repite el proceso de modo iterativo hasta que simulaciones y medidas converjan.

El código utiliza la técnica de inversión denominada ‘deshojado de cebolla’ (en inglés, *onion peeling*) tanto para la inversión de T_k como de CO_2 , que consiste en invertir el parámetro empezando en la capa superior e ir descendiendo en altura suponiendo que las soluciones para capas superiores son correctas. El módulo de inversión en no-ETL de T_k utiliza el método de Levenberg-Marquardt para ajustar la temperatura en cada altura mientras que el de CO_2 utiliza el método de Twomey-Chahine modificado para radiancias en el limbo. En la Sección 2.4 se hace una descripción detallada de este código.

El modelo de no-ETL calcula de manera precisa las poblaciones de los estados vibracionales del CO_2 (o temperaturas vibracionales) incluyendo efectos de no-ETL necesarias para realizar los cálculos de radiancia en 15 y 4.3 μm . Para ello, y para un conjunto de 33 niveles vibracionales del CO_2 , considera procesos de carácter tanto colisional como radiativo, es decir,

- Colisiones vibracional-traslacional (V-T)
- Colisiones de intercambio de energía vibracional (V-V)
- Emisión espontánea
- Emisión inducida
- Absorción de radiación solar
- Absorción de flujo ascendente
- Intercambio de energía entre las distintas capas de la atmósfera.

En la Tabla 3.3 se muestran los procesos colisionales incluidos en el modelo de no-ETL para calcular las temperaturas vibracionales de los estados del CO_2 junto a las tasas colisionales nominales adoptadas en el código operacional de SABER.

Para realizar la inversión de la radiancia alrededor 15 μm en temperatura cinética se considera la contribución de las 17 bandas del CO_2 en no-ETL y la banda del O_3 en ETL mostradas en la Tabla 3.1. Además, se añade la contribución del resto de bandas del CO_2 que, según HITRAN (*Rothman y col., 2003*), emiten dentro del filtro del canal en 15 μm . Estas bandas se tratan de manera pseudo-vibracional, esto es, manteniendo la relación entre las poblaciones en no-ETL y ETL igual a la correspondiente a la primera banda caliente en 15 μm del isótopo 626 del CO_2 .

Tabla 3.3: Procesos colisionales incluidos en el modelo de no-ETL del CO_2 . Se indican las incertidumbres en las constantes colisionales consideradas en este trabajo.

No.	Proceso	Constante colisional ^a		Factor de incertidumbre ^b
		Valores nominales		
1a	$CO_2^i(\nu_2) + N_2 \rightleftharpoons CO_2^i(\nu_2-1) + N_2$	$[7 \times 10^{-17} T^{1/2} + 6.7 \times 10^{-10} \exp(-83.8/T^{1/3})] \times A$	$0.7/0.8-1.25$	
1b	$CO_2^i(\nu_2) + O_2 \rightleftharpoons CO_2^i(\nu_2-1) + O_2$	$[7 \times 10^{-17} T^{1/2} + 1.0 \times 10^{-9} \exp(-83.8/T^{1/3})] \times A$	$0.8-1.25$	
2	$CO_2^i(\nu_2) + O(^3P) \rightleftharpoons CO_2^i(\nu_2-1) + O(^3P)$	$3.5 \times 10^{-13} \sqrt{T} + 2.3 \times 10^{-9} \exp(-76.75/T^{1/3})$	$0.5-1$	
3	$CO_2(\nu_3) + N_2 \rightleftharpoons CO_2(\nu_1, \nu_2 \geq 2) + N_2$	$1.1 \times 10^{-15} + 2.3 \times 10^{-40} T^9 +$ $1.14 \times 10^{-10} \exp(-72.3/T^{1/3})$	$0.8-1.2$	
4	$CO_2(\nu_3) + O_2 \rightleftharpoons CO_2(\nu_1, \nu_2 \geq 2) + O_2$	$1.82 \times 10^{-15} + 2.0 \times 10^{-31} T^6 +$ $3.1 \times 10^{-11} \exp(-63.3/T^{1/3})$	$0.8-1.2$	
5	$CO_2(\nu_3) + O(^3P) \rightleftharpoons CO_2(\nu_1, \nu_2) + O(^3P)$	$2 \times 10^{-13} (T/300)^{1/2}$		
6	$CO_2(001) + CO_2 \rightleftharpoons CO_2(020) + CO_2(010)$	1.0×10^{-15}		
7	$CO_2(001) + O_2 \rightleftharpoons CO_2(010) + O_2(1)$	3×10^{-15}		
8	$CO_2^i(\nu_2) + CO_2^j(\nu_2') \rightleftharpoons CO_2^i(\nu_2-1) + CO_2^j(\nu_2'+1)$	1.2×10^{-11}		
9	$CO_2^i(\nu_3) + N_2 \rightleftharpoons CO_2^i(\nu_3-1) + N_2(1)$	$5.0 \times 10^{-13} (300/T)^{1/2}$	$0.85-1.2$	
10	$CO_2^i(\nu_3) + CO_2^j(\nu_3') \rightleftharpoons CO_2^i(\nu_3-1) + CO_2^j(\nu_3'+1)$	$6.8 \times 10^{-12} \nu_3(T)^{1/2}$		
11	$N_2 + O(^1D) \rightleftharpoons N_2(1) + O(^3P)$	$2.4 \times 10^{-11} (\epsilon=0.25)$	$0.67-1.5$	
12	$N_2 + OH(\nu \leq 9) \rightleftharpoons N_2(1) + OH(\nu-1)$	$4\nu \times 10^{-14}$		
13	$N_2(1) + O_2 \rightleftharpoons N_2 + O_2(1)$	$2.6 \times 10^{-19} + 5 \times 10^{-13} \exp(-73.9/T^{1/3})$		
14	$N_2(1) + O(^3P) \rightleftharpoons N_2 + O(^3P)$	$3.2 \times 10^{-15} (T/300)^{2.9}$	$0.67-1.5$	

^a T es la temperatura en K. i y j indican isótopos diferentes. La constante A es 1, 3, 4.5 y 6.75 para ν_2 igual a 1, 2, 3 y 4 respectivamente.

^bTasas en el sentido directo del proceso y en $cm^3 s^{-1}$. Las constantes en sentido inverso según balance detallado son $k^i = k \exp[-\Delta E/k_B T]$.
^cVer discusión en el texto.

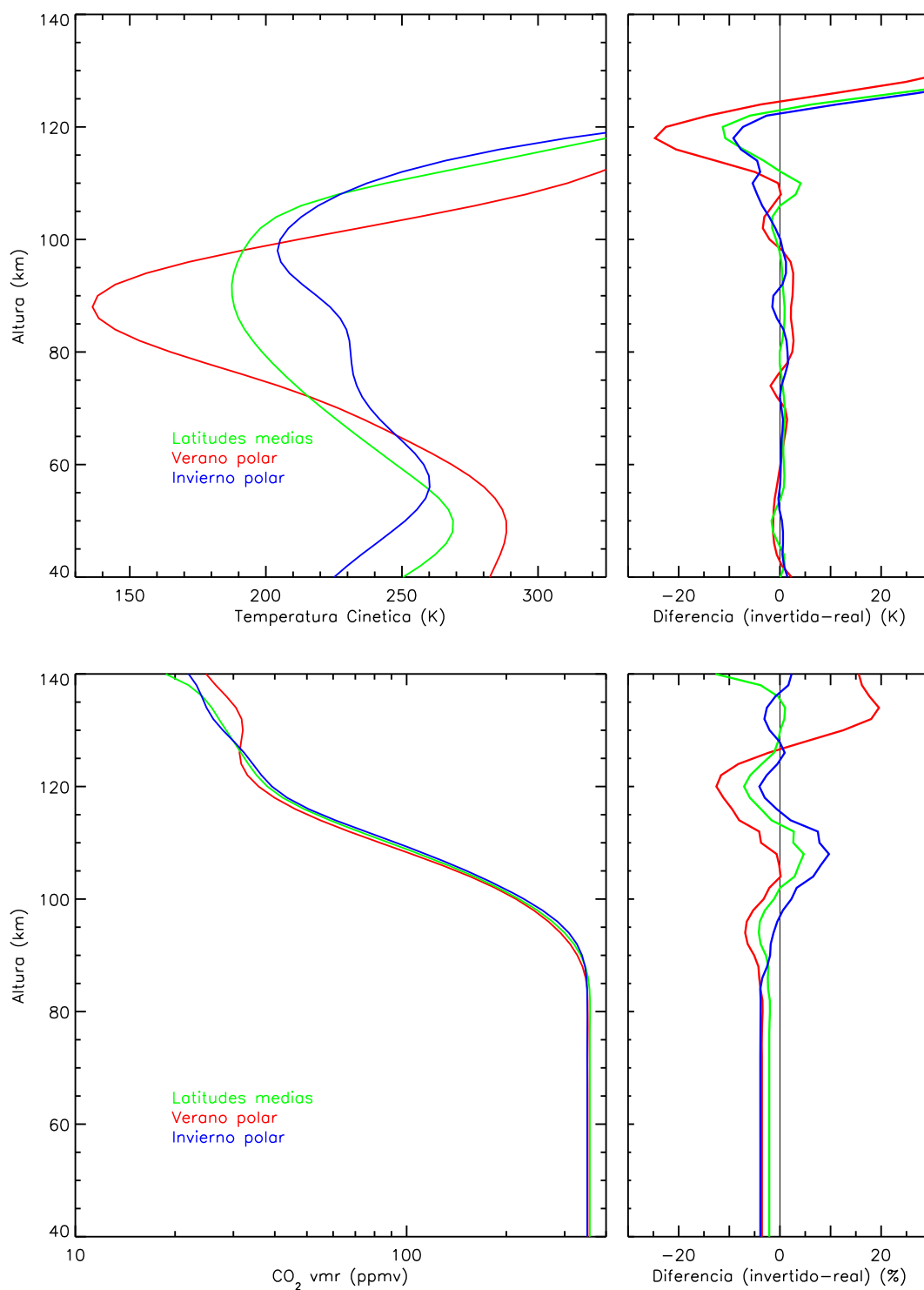


Figura 3.8: Perfiles de temperatura cinética (arriba) y dióxido de carbono (abajo) invertidos simultáneamente utilizando las radiancias nominales de la Figura 3.3 para condiciones medias (verde), verano polar (rojo) e invierno polar (azul). Los paneles derechos muestran las diferencias con respecto a los perfiles reales.

En relación a la inversión de la radiancia del canal en $4.3 \mu\text{m}$, el modelo incluye las 17 bandas del CO_2 que se muestran en la Tabla 3.2. Ninguna otra especie atmosférica contribuye de manera significativa en el filtro de este canal.

En la Figura 3.8 se han representado la temperatura cinética y el dióxido de carbono invertidos simultáneamente a partir de las radiancias sintéticas de la Figura 3.3. Se han mantenido las constantes colisionales nominales y, por tanto, corresponden a los perfiles invertidos de T_k y CO_2 nominales. Se representan también las diferencias entre los perfiles invertidos y los perfiles reales, o lo que es lo mismo, los utilizados para calcular las radiancias sintéticas. Hay que recordar que el nivel de ruido en los canales en 15 y $4.3 \mu\text{m}$ es de 2.45×10^{-4} y $8.02 \times 10^{-7} \text{ Wm}^{-2}\text{sr}^{-1}$ respectivamente, es decir, la relación señal ruido es menor que 1 por debajo de 130 km y 200 km respectivamente. Los errores en la T_k invertida son menores de 2 K por debajo de 100 km para los tres escenarios. El error en la inversión del CO_2 es de menos del 10% en todo el intervalo de altura excepto el 20% encontrado en condiciones de verano polar por encima de 130 km . En *Mertens y col.* [2002] se analizan de manera detallada los errores en la inversión simultánea de T_k y CO_2 producidos al utilizar este código y se describen de forma resumida en la Sección 4.2. Los errores en función de la altura debidos al ruido se muestran en las Tablas 3.11–3.16 del final de este Capítulo.

No obstante, las radiancias simuladas por el modelo directo dependen de las temperaturas vibracionales de los estados del CO_2 involucrados que, a su vez dependen del valor que toman las constantes que definen las colisiones entre las moléculas en la atmósfera. En última instancia, afectan a los perfiles de T_k y CO_2 invertidos. Por tanto, es importante conocer las incertidumbres que acompañan a los valores de estas constantes y así poder realizar un estudio de sensibilidad de los resultados a dichos valores y de balance de errores sistemáticos en las magnitudes invertidas. No sólo eso, teniendo en cuenta que el oxígeno atómico es uno de los principales responsables de las poblaciones de los niveles del CO_2 en la baja termosfera y que no hay medidas simultáneas del mismo, su incertidumbre también induce errores en sobre la T_k y el CO_2 invertidos. Estos se pueden estimar variando el parámetro colisional correspondiente.

3.3.1. Parámetros colisionales e incertidumbres asociadas

De los procesos mostrados en la Tabla 3.3, se han identificado aquellos que pueden tener un efecto significativo sobre los resultados de T_k y CO_2 invertidos. Estos siete procesos y sus correspondientes incertidumbres se indican en la misma tabla. A continuación se discute el efecto de cada uno de ellos sobre las poblaciones de los estados vibracionales del CO_2 y su incertidumbre actual.

Las colisiones del dióxido de carbono con el nitrógeno molecular y el oxígeno molecular (procesos 1a y 1b) son las responsables de que los estados ν_2 estén en ETL hasta la

Tabla 3.4: Sumario de valores para el ritmo de relajación de $\text{CO}_2(\nu_2)$ por el nitrógeno y el oxígeno moleculares.

Constante [$10^{-15} \times \text{cm}^3 \text{s}^{-1}$]		Temperatura [K]	Cita	Método
N ₂	O ₂			
3.5	4.5	296	<i>Simpson y col.</i> [1977]	Med. Lab.
3.1	–	300	<i>Allen y col.</i> [1977]	Med. Lab.
3.1	4.0	294	<i>Taine y col.</i> [1978]	Med. Lab.
3.6	–	296	<i>Taine y Lepoutre</i> [1979]	Med. Lab.
3.7	–	295	<i>Allen y col.</i> [1980]	Med. Lab.
3.4	–	295	<i>Lunt y col.</i> [1985]	
3.7	4.9	300	<i>Wintersteiner y col.</i> [1992]	Parametr.
3.1	5.2	290	<i>Siddles y col.</i> [1994]	Med. Lab.

media mesosfera. *Taine y col.* [1978] y *Allen y col.* [1980] midieron la tasa de colisiones con el nitrógeno molecular a temperaturas atmosféricas pero sólo para estados vibracionales de baja energía. Asimismo, hay referencias de dicho valor en *Simpson y col.* [1977], *Allen y col.* [1977], *Taine y Lepoutre* [1979] y *Lunt y col.* [1985]. Más recientemente, esta constante ha sido medida por *Siddles y col.* [1994]. Todas estas medidas proporcionaron valores similares (ver Tabla 3.4) y dentro del mismo margen de error experimental. El valor nominal utilizado en este trabajo es la parametrización obtenida por *Wintersteiner y col.* [1992] mediante el ajuste de los datos experimentales con una incertidumbre de $-30\%/+25\%$ para temperaturas cinéticas menores de 300 K y de $-20\%/+25\%$ para temperaturas mayores.

En cuanto a la relajación del $\text{CO}_2(\nu_2)$ por el oxígeno molecular, se encuentran referencias a esta constante en *Simpson y col.* [1977], *Taine y col.* y *Siddles y col.* [1994]. Del mismo modo que para el caso del nitrógeno molecular se ha adoptado como nominal la parametrización sugerida por *Wintersteiner y col.* [1992] con una incertidumbre de $-20\%/+25\%$.

La mayor influencia sobre las poblaciones de los estados $\text{CO}_2(\nu_2)$ en la termosfera terrestre viene determinada por las colisiones con el $\text{O}(^3\text{P})$ (proceso 2). Por esto, el tratamiento de este proceso es crucial para determinar el enfriamiento radiativo en la termosfera. Hasta principios de la década pasada se carecía de valores fiables de la constante colisional de este proceso a temperaturas atmosféricas ya que no se disponía de medidas directas de la misma. Los valores encontrados en la bibliografía para esta constante se resumen en la Tabla 3.5 y, alrededor de 300 K, varían desde $6 \times 10^{-12} \text{cm}^3 \text{s}^{-1}$ (*Sharma y Wintersteiner*, 1990) hasta $1.5 \times 10^{-12} \text{cm}^3 \text{s}^{-1}$ (*Shved y col.*, 1991; *Pollock y col.*, 1993). Recientemente, *Khvorostovskaya y col.* [2002] han realizado medidas de laboratorio a temperaturas entre 206 y 358 K y han sugerido un valor de $1.5 \times 10^{-12} \text{cm}^3 \text{s}^{-1}$. También *Castle*

Tabla 3.5: Sumario de valores para la tasa de relajación de $CO_2(\nu_2)$ por el oxígeno atómico.

Constante [$10^{-12} \times \text{cm}^3 \text{s}^{-1}$]	Temperatura [K]	Cita	Método
6.0	–	<i>Sharma y Wintersteiner</i> [1990]	Obs. Atm.
1.4	300	<i>Shved y col.</i> [1991]	Med. Lab.
3-6	–	<i>López-Puertas y col.</i> [1992]	Obs. Atm.
1.2	300	<i>Pollock y col.</i> [1993]	Med. Lab.
0.5	301	<i>Lilenfeld y col.</i> [1994]	Med. Lab.
1.5	–	<i>Vollman y col.</i> [1997]	Obs. Atm.
1.5	300	<i>Khvorostovskaya y col.</i> [2002]	Med. Lab.
3	300	<i>Castle y col.</i> [2003]	Med. Lab.

y col. [2003] presentaron resultados preliminares con un valor de $3 \times 10^{-12} \text{cm}^3 \text{s}^{-1}$ a partir de un experimento de laboratorio que aún continúa en marcha. Otras referencias se pueden encontrar en *López-Puertas y col.* [1992], *Lilenfeld* [1994] y *Vollman y col.* [1997].

En este trabajo, se ha adoptado el valor proporcionado por *Sharma y Wintersteiner* [1990] a partir de observaciones atmosféricas y corroborado por el análisis de los datos de ATMOS realizado por *López-Puertas y col.* [1992]. La elección de este valor se basa en que corresponde al elegido para realizar la inversión operacional. Hay que hacer notar que la dependencia de esta constante con la temperatura en el intervalo de temperaturas de la baja termosfera no ha sido determinada mediante medidas de laboratorio. Tal y como aconsejan *Sharma y Wintersteiner*, aquí se considera que la constante es función de la

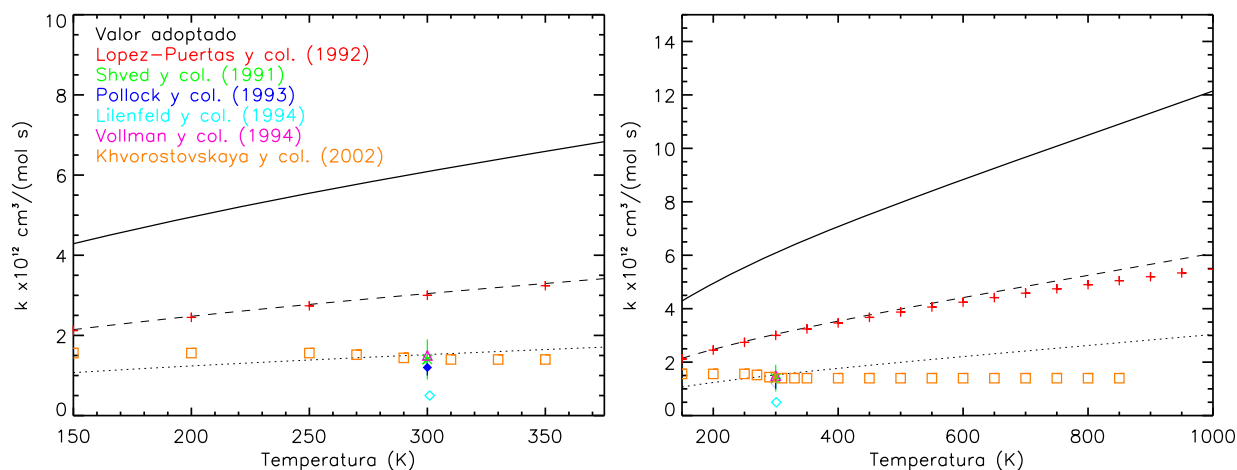


Figura 3.9: Ritmo de relajación del $CO_2(010)$ por el $O(^3P)$. Los símbolos corresponden a los valores de la bibliografía (ver texto) y las líneas a los adoptados en este trabajo (continua: nominal; discontinua: mín. (-50 %); punteada: -75 %). El panel dcho. es una extensión del izdo.

raíz cuadrada de la temperatura cinética.

Como se ha dicho anteriormente, la concentración de oxígeno atómico también influye de manera importante sobre las poblaciones de los niveles ν_2 en la baja termosfera. Éste es un compuesto muy variable en la alta mesosfera y termosfera y, sin embargo, se carece de medidas simultáneas de su razón de mezcla. Por esto, hay que considerar también una incertidumbre en el $O(^3P)$ utilizado. Los efectos de una variación en su concentración son análogos a los cambios en la constante colisional del proceso 2.

Salvo *Vollman y col.* [1997], las medidas atmosféricas sugieren un valor de $6 \times 10^{-12} \text{ cm}^3 \text{ s}^{-1}$ mientras que las de laboratorio un valor unas cuatro veces inferior. Esto supone que el valor elegido aquí es un límite superior de esta constante. Por esto, considerando conjuntamente las indeterminaciones en la constante colisional de este proceso y en la abundancia de $O(^3P)$, se ha estudiado el efecto sobre las magnitudes elegidas de una incertidumbre de un -50% y -75% y de un $+50\%$.

Parte de la energía solar absorbida en $4.3 \mu\text{m}$ por parte de moléculas en el nivel $00^0 1$ se transforma en última instancia en energía cinética tras su relajación hacia los estados $\nu_2 \geq 2$ mediante colisiones con el nitrógeno y oxígeno moleculares (procesos 3 y 4). Además, estos mecanismos pueblan los niveles $\nu_2 \geq 3$ en condiciones diurnas. Uno de los puntos desconocidos actualmente es la distribución final de los estados tras estas colisiones. El valor nominal utilizado aquí es un ajuste polinómico de los valores medidos por *Inoue y Tsuchiya* [1975], *Siddles y col.* [1994] y *Rosser y col.* [1969] para el proceso 3 y de los medidos por *Siddles y col.* [1994] y *Rosser y Gerry* [1969] para el proceso 4 (ver Tabla 3.6). Además, en este trabajo se ha adoptado el valor medido por *Kroeker y col.* [1989] para las colisiones del isótopo 636 de CO_2 , que es unas tres veces superior a la correspondiente al isótopo principal. Se ha tomado una incertidumbre de $\pm 20\%$ justificada por el error en las medidas mencionadas.

Las colisiones entre oxígeno molecular y el $\text{CO}_2(\nu_3)$ (proceso 5) no influyen significativamente sobre la población de los niveles ν_3 . Sin embargo, estos niveles están fuertemente acoplados con el $\text{N}_2(1)$ que sí se desactiva eficazmente al colisionar con el $O(^3P)$ (proceso

Tabla 3.6: Sumario de valores para la tasa de relajación de $\text{CO}_2(\nu_3)$ por el nitrógeno y el oxígeno moleculares hacia niveles $\text{CO}_2(\nu_1, \nu_2)$.

Constante		Temperatura [K]	Cita	Método
N_2	O_2			
3.2	–	296	<i>Rosser y col.</i> [1969]	Med. Lab.
–	4.4	300	<i>Rosser y Gerry</i> [1969]	Med. Lab.
3.5	–	301	<i>Inoue y Tsuchiya</i> [1975]	.
3.2	4.2	290	<i>Siddles y col.</i> [1994]	Med. Lab.

14; ver abajo).

El proceso 6 tiene un efecto poco importante sobre las temperaturas vibracionales de los estados del CO_2 por lo que las posibles incertidumbres en su constante colisional no afectan a las mismas.

El intercambio de energía vibracional del $O_2(1)$ tanto con el CO_2 (proceso 7) como con el $N_2(1)$ (proceso 13) es significativo a la hora de calcular la T_v del primero pero no la del resto. Por ello, es irrelevante considerar los efectos de las incertidumbres en las constantes que caracterizan estos procesos en el caso del CO_2 .

Tanto el proceso 8 como el 10 son importantes en las atmósferas de otros planetas (como Venus y Marte) pero no en la terrestre, que es el caso sujeto a estudio en este trabajo.

El intercambio de energía vibracional entre el nitrógeno molecular y los estados $CO_2(\nu_3)$ (proceso 9) es el mecanismo más importante en cuanto a la redistribución de energía solar entre los niveles ν_3 . De hecho, constituye el acoplamiento entre los niveles ν_3 , especialmente entre el nivel 00^01 y los niveles del grupo 021. Además, este proceso permite la transferencia de energía del $O(^1D)$ al CO_2 a través del N_2 . En condiciones nocturnas (como se verá en el Capítulo 5), considerar este proceso es esencial para determinar de manera precisa la concentración de CO_2 ya que permite la transferencia de energía del $OH(\nu)$ al CO_2 y constituye uno de los principales mecanismos de excitación del primer nivel excitado en $4.3 \mu m$.

Por todo esto, este proceso es muy importante en cuanto a la determinación de las poblaciones de los estados en $4.3 \mu m$. Esta constante ha sido medida en varias ocasiones (ver Tabla 3.7), como por ejemplo, por *Rosser y col.* [1969] y por *Gueguen y col.* [1975]. *Nebel y col.* [1994] obtuvieron un valor similar al sugerido por *Inoue y Tsuchiya* [1975] al analizar las medidas del instrumento SPIRE. *López-Puertas y Taylor* [1989] necesitaron utilizar el doble de dicho valor para explicar las medidas de SAMS en $4.3 \mu m$. Sin embargo, en la revisión de estas medidas y en el análisis de las de ISAMS (*López-Puertas y Taylor*, 1998b)

Tabla 3.7: Sumario de valores para la tasa de colisiones V-V entre el $CO_2(\nu_3)$ y el $N_2(1)$.

Constante [$10^{-13} \times cm^3 s^{-1}$]	Temperatura [K]	Cita	Método
5.2	300	<i>Rosser y col.</i> [1969]	Med. Lab.
4.8	302	<i>Inoue y Tsuchiya</i> [1975]	Med. Lab.
6	300	<i>Gueguen y col.</i> [1975]	Med. Lab.
10	–	<i>López-Puertas y Taylor</i> [1989]	Obs. Atm.
5	–	<i>Nebel y col.</i> [1994]	Obs. Atm.
4.9-5	–	<i>López-Puertas y col.</i> [1998b]	Obs. Atm.
5-6	–	<i>López-Puertas y Funke</i> [Com. Pers.]	Obs. Atm.

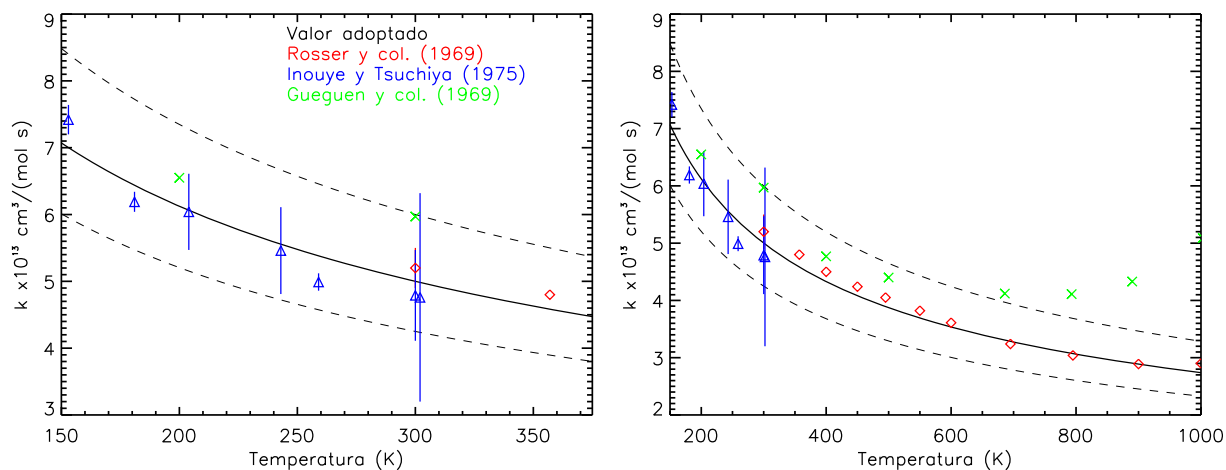


Figura 3.10: Como en la Figura 3.9 pero para la tasa de intercambio de energía vibracional entre el CO_2 y en N_2 .

también obtuvieron un valor similar al de *Inoue y Tsuchiya*. Las recientes medidas del instrumento MIPAS sugieren $5\text{-}6 \times 10^{-13} (300/T)^{1/2} \text{cm}^3 \text{s}^{-1}$ (*López-Puertas y Funke*, comunicación privada). Aquí, se ha adoptado como valor nominal $5 \times 10^{-13} (300/T)^{1/2} \text{cm}^3 \text{s}^{-1}$ (similar al sugerido por *Inoue y Tsuchiya*) introduciendo una incertidumbre de $-15\%/20\%$ (ver Figura 3.10).

Durante el día, el oxígeno atómico electrónicamente excitado $\text{O}(^1\text{D})$ transfiere energía a los niveles ν_3 del CO_2 a través del $\text{N}_2(1)$ previamente excitado por el primero (proceso 11). Este mecanismo tiene mayor efecto alrededor de 90 km aunque es importante para determinar las poblaciones de los estados ν_3 en la mesosfera y la baja termosfera. La

Tabla 3.8: Sumario de valores para la tasa de colisiones entre el $\text{N}_2(1)$ y el $\text{O}(^1\text{D})$ y la eficiencia ϵ de dicho proceso.

Constante [$10^{-11} \times \text{cm}^3 \text{s}^{-1}$]	Temperatura [K]	Cita	Método
2.4	295	<i>Amimoto y col.</i> [1979]	Med. Lab.
2.5	295	<i>Wine y Ravishankara</i> [1981]	Med. Lab.
2.6	298	<i>DeMore y col.</i> [1997]	Med. Lab.
2.4	–	<i>Edwards y col.</i> [1996]	Obs. Atm.
3.1	295	<i>Ravishankara y col.</i> [2002]	Med. Lab.
ϵ		Cita	Método
5		<i>Walker y col.</i> [1969]	Med. Lab.
35		<i>Slanger y Black</i> [1974]	Med. Lab.
25		<i>Harris y Adams</i> [1983]	Med. Lab.
25		<i>Edwards y col.</i> [1996]	Obs. Atm.

Tabla 3.9: Sumario de valores para la tasa de relajación del $N_2(1)$ en colisiones con oxígeno atómico.

Constante [$10^{-15} \times \text{cm}^3 \text{s}^{-1}$]	Temperatura [K]	Cita	Método
3.2	300	<i>McNeal y col.</i> [1974]	Med. Lab.

tasa de las colisiones entre el $O(^1D)$ y el N_2 está bastante bien determinada. Como se muestra en la Tabla 3.8, se pueden encontrar referencias a la misma en *Amimoto y col.* [1979], *Wine y Ravishankara* [1981] y *DeMore y col.* [1997], que midieron valores similares. Recientemente *Ravishankara y col.* [2002] han obtenido un valor de esta constante algo mayor que el sugerido por el resto de autores. Por otra parte, en la desactivación de una molécula de $O(^1D)$ se pueden llegar a activar hasta 6.8 moléculas de $N_2(1)$ ya que la energía del primero es 6.8 veces mayor que la del segundo. Sin embargo, la eficiencia ϵ de dicho proceso está entre el 5 % sugerido por *Walker y col.* [1969] y el 35 % sugerido por *Slanger y Black* [1974]. *Harris y Adams* [1983] midieron una eficiencia de 25 % que fue corroborada por el valor inferido por *Edwards y col.* [1996] en el análisis de los datos en $10 \mu\text{m}$ de UARS/CLAES. Se ha tomado como eficiencia nominal el valor intermedio sugerido por *Harris y Adams* [1983] y como constante colisional nominal la sugerida por *Amimoto y col.* [1979]. Hoy por hoy la incertidumbre asociada a estos valores no se conoce muy bien. La que se ha considerado en este trabajo, en la que se engloba tanto la incertidumbre de ϵ como la del ritmo colisional, es de -30 %/+50 %.

La tasa de intercambio de energía vibracional entre el radical hidroxilo y el nitrógeno molecular mediante el proceso 12 es fundamental para caracterizar la población de los estados ν_3 del CO_2 en condiciones nocturnas. En este capítulo se consideran tan sólo casos bajo condiciones diurnas pero en el Capítulo 5 se realiza un análisis exhaustivo de las emisiones en $4.3 \mu\text{m}$ durante la noche y el efecto de este proceso sobre las mismas.

Las colisiones del nitrógeno molecular vibracionalmente excitado con el oxígeno atómico (proceso 14) es el mecanismo más eficaz en desactivar al primero en la alta mesosfera y la baja mesosfera. Debido al fuerte acoplamiento entre el $N_2(1)$ y los niveles ν_3 del CO_2 , este proceso afecta finalmente a los niveles en $4.3 \mu\text{m}$. Tan sólo existe una referencia a este valor (*McNeal y col.*, 1974; ver Tabla 3.9), quienes la midieron entre 300 y 700 K, por lo que se ha tomado ésta como nominal introduciendo una dependencia cúbica con la temperatura. La incertidumbre considerada está entre -30 % y +50 % acorde con el error en las medidas de la constante.

3.4. Errores en T_k y CO_2 asociados a parámetros colisionales

Las posibles variaciones en las tasas colisionales producen cambios en las temperaturas vibracionales modeladas y, por ende, cambios en la temperatura cinética y el dióxido de carbono invertidos. Con el objetivo de evaluar la importancia de este efecto, se ha llevado a cabo un estudio para cada una de las constantes mencionadas en la sección anterior.

Para ello, se han modelado las temperaturas vibracionales de los niveles del CO_2 utilizando las tasas colisionales **nominales** (Figuras 3.1 y 3.2, pág. 60) y se ha calculado las radiancias en los canales de SABER en 15 y 4.3 μm haciendo uso de un modelo de transferencia radiativa línea-a-línea LINEPAK (*Gordley y col.*, 1994) (Figura 3.3, pág. 64). Estos perfiles de radiancia sintética son la entrada para todos los casos de inversión que se realizan a continuación. En segundo lugar, se ha llevado a cabo la inversión simultánea de perfiles de $T_k\text{-CO}_2$, también manteniendo las constantes colisionales nominales, obteniendo así los perfiles invertidos nominales de temperatura cinética y dióxido de carbono (ver Figura 3.8, pág. 72). Además, para cada una de las constantes detalladas en la sección 3.3.1 se ha llevado a cabo el siguiente proceso:

- I) Se han calculado las temperaturas vibracionales para cada valor máximo y mínimo de la constante (ver Tabla 3.3), manteniendo el valor nominal para el resto de los parámetros, y se han comparado con las obtenidas en el caso nominal; y
- II) Se ha realizado una inversión simultánea de $T_k\text{-CO}_2$ introduciendo los valores máximos y mínimos de cada constante en el modelo de no-ETL, manteniendo el valor nominal para el resto, y se han comparado con los invertidos en el caso nominal.

La diferencia entre los perfiles invertidos utilizando las nuevas constantes y los nominales constituyen el error en la T_k y CO_2 de SABER debido a la incertidumbre en los parámetros colisionales. Hay que notar que las diferencias de concentración de CO_2 se han calculado en unidades de razón de mezcla (ppmv) en lugar de unidades de densidad (cm^{-3}). Si bien no se espera invertir la T_k de manera fiable por encima de 105 km, esta decisión se ha tomado para mantener la consistencia con los resultados por debajo de dicha altura, donde sí se invierte la razón de mezcla del CO_2 . Al proporcionar diferencias relativas a la concentración, los errores no varían significativamente por el hecho expresar la abundancia de CO_2 en unas unidades u otras.

Con el fin de realizar un estudio lo más fiable posible en relación con la inversión de las medidas reales de SABER, en este trabajo se ha ajustado el código del mismo modo que se hace en la inversión operacional de $T_k\text{-CO}_2$, es decir, manteniendo los mismos niveles y bandas vibracionales, la misma parametrización del flujo solar y los mismos procesos colisionales y radiativos.

Tabla 3.10: Atmósferas de referencia utilizadas en este estudio.

Estación/Latitud	Nombre	Fuente	ACS ^a
Latitudes medias	U.S. Std. Atm. 1976	FASCODE3 (#6)	60°
Verano Polar	COSPAR CIRA '86 (80°S)	<i>Fleming y col.</i> [1990]	60°
Invierno Polar	COSPAR CIRA '86 (80°N)	<i>Fleming y col.</i> [1990]	80°

^aÁngulo Cenital Solar.

Asimismo, se han situado los límites inferior y superior del modelo a las mismas alturas que en el código operacional. En todos los casos examinados, se ha invertido la T_k entre 40 y 140 km y el CO_2 entre 60 y 140 km con separación vertical de 2 km. Las temperaturas vibracionales de los niveles del CO_2 se han calculado entre 40 y 160 km con separación de 2 km. Se han tomado como perfiles *a priori* de ambos parámetros físicos los generados por el modelo TIME-GCM (*Roble y Ridley*, 1994; *Roble*, 2000) correspondientes a las mismas latitudes y épocas del año. Teniendo en cuenta su variabilidad natural, se ha considerado la desviación estándar de la T_k *a priori* como una función de la altura de modo que por debajo de 80 km toma el valor de 10 K, entre 80 y 100 km el valor de 40 K y por encima de 100 km el valor de 100 K. Teniendo en cuenta el desconocimiento actual de la concentración de CO_2 por encima de la homopausa, se ha tomado la desviación estándar del CO_2 *a priori* como un 50 % de la razón de mezcla local del CO_2 en todo el intervalo de altura. Por otra parte, se ha considerado que la desviación estándar de la radiancia es el ruido del instrumento.

Para realizar este estudio de sensibilidad, se han utilizado las tres atmósferas de referencia, representativas de condiciones atmosféricas terrestres típicas y extremas, que se muestran en la Tabla 3.10.

Antes de describir los resultados resulta de gran utilidad hacer algunas consideraciones de carácter general sobre la respuesta de la T_k y el CO_2 invertidos a cambios en las constantes en el modelo de no-ETL.

La función del código es buscar perfiles de T_k y CO_2 que reproduzcan simultáneamente las radiancias sintéticas en 15 y 4.3 μm dentro de los niveles de ruido. Dichas radiancias son una entrada fija del código y, además, se reproducen (dentro de los niveles del ruido de las medidas) con los perfiles invertidos de T_k y CO_2 de la inversión nominal (aquella en la que se utilizan las tasas nominales). Si tras la variación de algún parámetro en el modelo de no-ETL se produce un cambio de las temperaturas vibracionales con respecto al caso nominal, el código ajusta la T_k y el CO_2 de modo que la radiancia simulada sea la misma (dentro de los niveles del ruido de la medida) que en el caso de la inversión nominal y, así, se reproduzcan los perfiles sintéticos de radiancia. En definitiva, el código compensa los posibles cambios en las temperaturas vibracionales mediante variaciones en la T_k y el CO_2 . En este sentido, si las T_v de los niveles del CO_2 tienden a aumentar al variar una cierta constante colisional (lo cual produce un aumento en la radiancia), el

sistema responde disminuyendo o bien la T_k (para que las T_v disminuyan) o bien la razón de mezcla de CO_2 de modo que, en cualquier caso, la radiancia simulada permanezca constante e igual a la sintética tanto en 15 como en 4.3 μm .

Por otra parte, en cuanto al comportamiento de las temperaturas vibracionales y de los parámetros invertidos, conviene recordar que:

- a) Un aumento de las constantes colisionales de los procesos V-T se traduce en una mayor efectividad en la transformación de energía cinética en energía vibracional. Esto hace que las poblaciones de los estados vibracionales involucrados se acerquen a las correspondientes al ETL, es decir, que la T_v se acerque a la temperatura cinética local. Una disminución de las constantes producen el efecto contrario, es decir, que las poblaciones se desvíen más de las de ETL. Estos efectos serán mayores sobre las poblaciones de niveles más alejadas del ETL.
- b) El aumento de las constantes de los procesos V-V producen un mayor intercambio de energía vibracional, o sea, un mayor acoplamiento entre los estados vibracionales en juego. Esto hace que las T_v de los niveles en cuestión se acerquen más la una a la otra. El efecto contrario sucede en el caso de disminuir estas constantes.
- c) Variaciones del mismo orden en las T_v surtirán cambios mayores en la T_k invertida para los casos en que los estados estén más alejados del ETL ya que, cuando un nivel está principalmente poblado por procesos de no-ETL, la influencia de la T_k local sobre ellos es menor. Por tanto, para variar su población (y así ajustar la radiancia simulada a la radiancia sintética), los cambios en la T_k que deben hacerse son de mayor magnitud.
- d) Los efectos sobre las temperaturas vibracionales debidos a un aumento o una disminución de una constante colisional no son simétricos, debido a la no linealidad del problema. Por tanto, tampoco lo serán los efectos sobre la T_k y el CO_2 invertidos.

Aunque el estudio descrito más arriba se ha realizado para cada una de las atmósferas de referencia seleccionadas, se presenta un análisis detallado para cada proceso sólo en el caso de condiciones medias. En la Sección 3.5 se muestra el efecto global de todas las incertidumbres sobre la T_k y el CO_2 invertidos simultáneamente para las tres atmósferas. Dichos efectos se resumen al final de este capítulo en las Tablas 3.11-3.16 de manera individual para cada proceso y para cada atmósfera.

Proceso 1: $\text{CO}_2^i(\nu_2) + \text{M}(\text{N}_2, \text{O}_2) \leftrightarrow \text{CO}_2^i(\nu_2-1) + \text{M}(\text{N}_2, \text{O}_2)$

En la Figura 3.11 se muestra el efecto sobre las temperaturas vibracionales de los principales niveles vibracionales del dióxido de carbono producido por la variación de la constante colisional de estos procesos en -20 % y +25 % para el caso de latitudes medias.

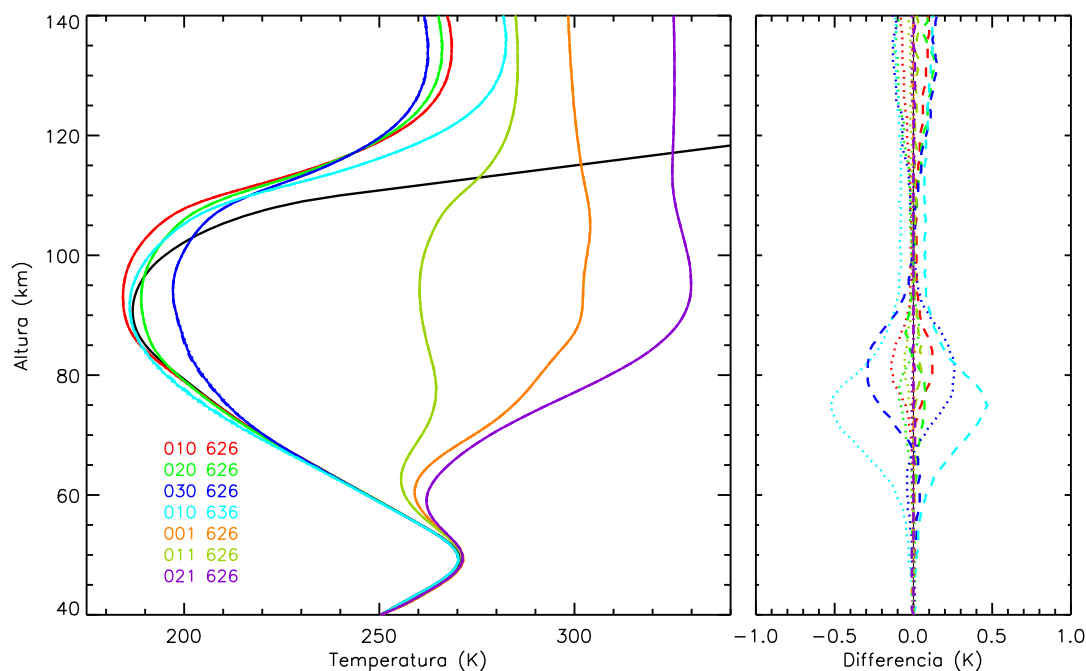


Figura 3.11: Efecto sobre las T_v de los principales niveles del CO_2 producido por la variación de la constante colisional del proceso $\text{CO}_2^i(\nu_2)+\text{M}\leftrightarrow\text{CO}_2^i(\nu_2-1)+\text{M}$ en -20% (punteadas) y $+25\%$ (discontinuas) en latitudes medias con $\text{ACS}=60^\circ$ (las líneas continuas corresponden a la inversión nominal) y diferencias con las T_v nominales (panel dcho.).

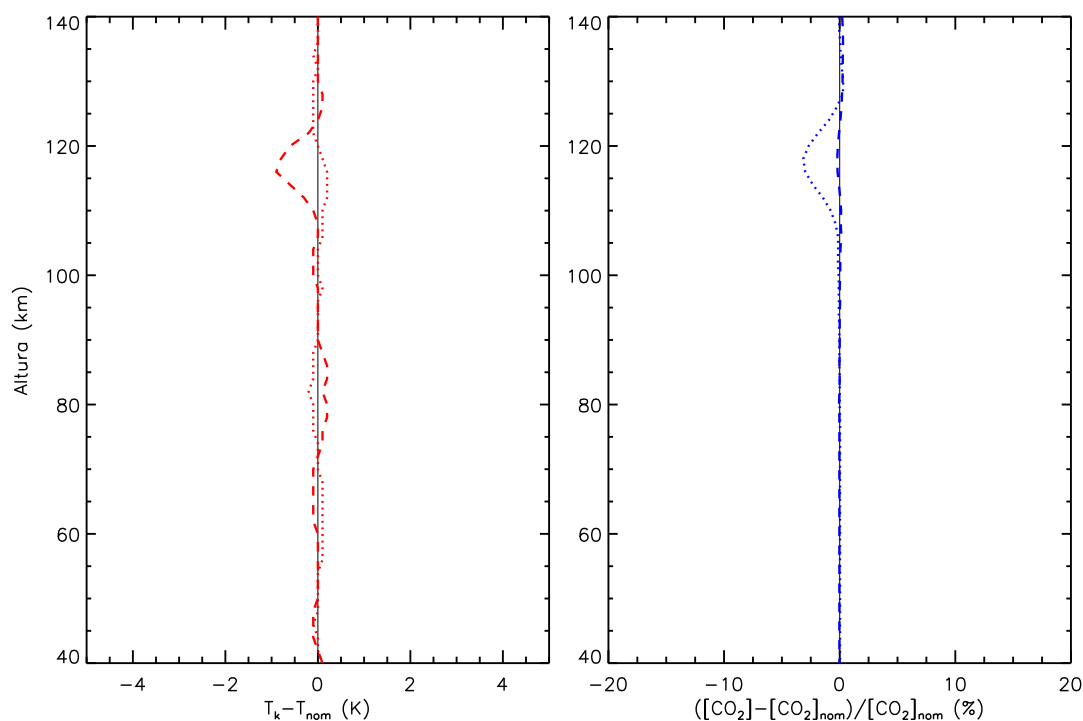


Figura 3.12: Efecto sobre la T_k (rojo) y la razón de mezcla de CO_2 (azul) invertidos debido al cambio en la constante colisional del proceso $\text{CO}_2^i(\nu_2)+\text{M}\leftrightarrow\text{CO}_2^i(\nu_2-1)+\text{M}$ en latitudes medias ($\text{ACS}=60^\circ$). Estas diferencias son respecto a las magnitudes invertidas nominales. (Línea discontinua: valor máx. de la tasa; Línea punteada: valor mín. de la tasa.)

Esta constante afecta a los niveles ν_2 del CO_2 , que los mantiene en ETL en la mesosfera. No se observan cambios significativos en las T_v de los niveles fundamentales del CO_2 en $15 \mu\text{m}$ ni al aumentar ni al disminuir esta tasa en latitudes medias pues estos niveles están en ETL por encima de 85 km. Las T_v del resto de estados, aunque en condiciones de no-ETL, tampoco sufren cambios significativos por ser la incertidumbre en la constante colisional suficientemente pequeña. En todo caso, el efecto es opuesto para los niveles 01^10 que para el resto y, para estos últimos, al tener una T_v mayor que la cinética, disminuyen las poblaciones al aumentar la constante. La influencia sobre la T_k y el CO_2 invertidos es casi despreciable (ver Figura 3.12).

En el caso de verano polar, las poblaciones de los estados $\text{CO}_2(\nu_2)$ están alejadas del ETL desde alturas inferiores por lo que el efecto de variar esta constante es mayor. De hecho, aunque no se muestran gráficamente, las T_v de los niveles de los grupos de niveles más energéticos (020, 030, 040) del isótopo 626 y las de los fundamentales (01^10) de los isótopos minoritarios aumentan algo menos de 1.5 K alrededor de 80 km al disminuir la constante en un 20 %. Esta dependencia inversa se debe a que sus T_v son mayores que la T_k . Teniendo en cuenta que la emisión de los niveles 01^10 de los isótopos minoritarios constituye la principal contribución a la radiancia en $15 \mu\text{m}$, esto resulta en un cambio en la T_k invertida de -1.3 K a 80 km. La razón de mezcla del CO_2 apenas sufre cambio ya que ni esta variación de la T_k a 80 km ni la variación de esta constante tienen efecto sobre las T_v de los niveles en $4.3 \mu\text{m}$.

El comportamiento en el invierno polar es opuesto al de verano polar, es decir, la disminución de esta constante produce una disminución de las T_v . Las poblaciones de los niveles en $15 \mu\text{m}$ son menores que en ETL alrededor de 80 km y, por ello, al disminuir la constante colisional se produce una disminución en las T_v , que alcanza 1.5 K en el caso del nivel 01^10 del isótopo 636. Esto se compensa con un aumento en la T_k invertida de 1 K a 78 km. El efecto es algo menor que en verano polar porque las poblaciones de los niveles ν_2 son más sensibles a la T_k en este caso por estar más cercanas al ETL.

Proceso 2: $\text{CO}_2^i(\nu_2) + \text{O}(^3\text{P}) \leftrightarrow \text{CO}_2^i(\nu_2-1) + \text{O}(^3\text{P})$

Este proceso es crucial para determinar la temperatura cinética en la alta mesosfera y la baja termosfera a partir de medidas de emisiones del CO_2 en $15 \mu\text{m}$ ya que de él dependen en gran medida las temperaturas vibracionales de los niveles $\text{CO}_2(\nu_2)$ en dicha región. En concreto, tiene efecto allí donde el oxígeno atómico es más abundante, es decir, por encima de 80 km. Variar esta constante colisional es equivalente a cambiar la concentración de oxígeno atómico. Por ello, los resultados de esta sección sobre cambios en la constante son igualmente válidos para variaciones de $\text{O}(^3\text{P})$.

En la Figura 3.13 se representan las T_v de los niveles del CO_2 en el caso nominal y la influencia de cambios en la tasa de relajación del $\text{CO}_2(\nu_2)$ por el $\text{O}(^3\text{P})$ en $\pm 50\%$ para latitudes medias. Por debajo de 85 km no se aprecian cambios en las poblaciones de los

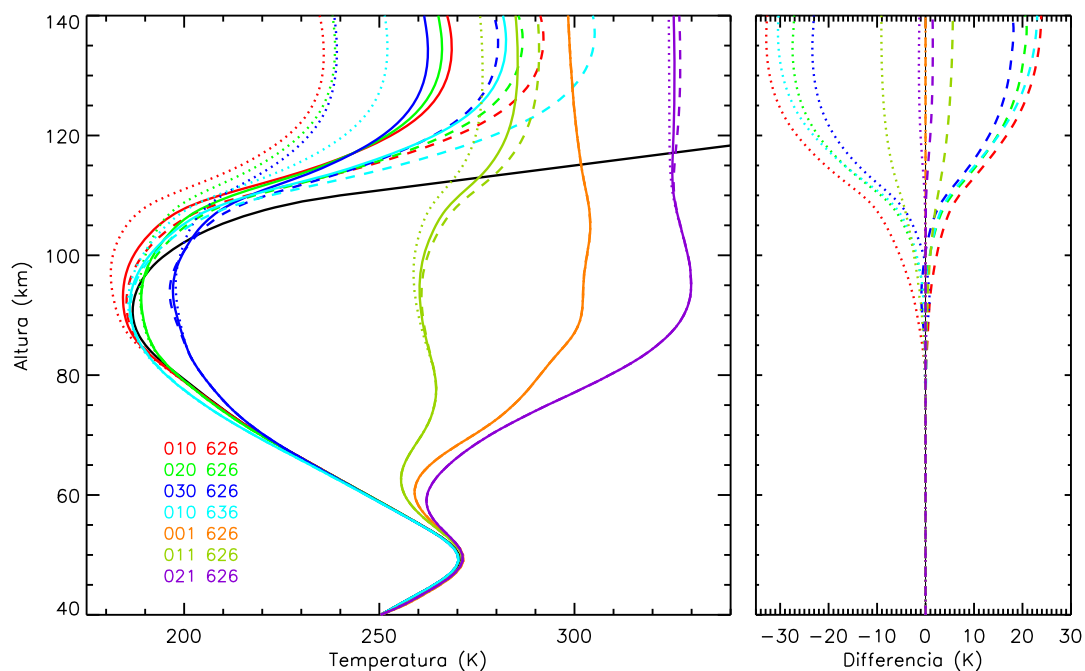


Figura 3.13: Como en la Figura 3.11 pero para la variación de la constante colisional del proceso $\text{CO}_2^i(\nu_2)+\text{O}(^3\text{P})\leftrightarrow\text{CO}_2^i(\nu_2-1)+\text{O}(^3\text{P})$ o la concentración de $\text{O}(^3\text{P})$ en -50% (punteada) y $+50\%$ (discontinua).

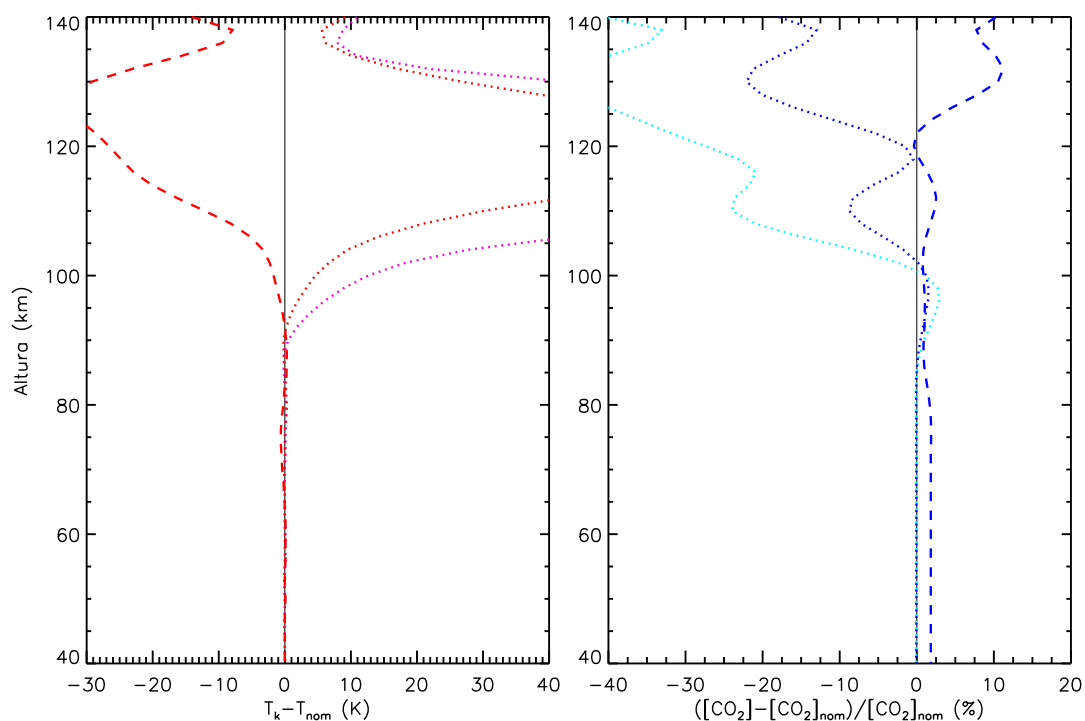


Figura 3.14: Como en la Figura 3.12 pero para la variación de la constante colisional del proceso $\text{CO}_2^i(\nu_2)+\text{O}(^3\text{P})\leftrightarrow\text{CO}_2^i(\nu_2-1)+\text{O}(^3\text{P})$ en -75% (punteadas rosa y celeste), -50% (punteadas roja y azul) y $+50\%$ (discontinua).

niveles al variar esta constante. La influencia más importante se observa en las T_v de los niveles ν_2 con diferencias con respecto al caso nominal de unos -2.5 K a 90 km, -5 K a 100 km y más de -25 K a 120 km para el 01^{10} al disminuir la constante o el $O(^3P)$ en un 50 %. Tal y como se muestra en la Figura 3.14, a 90 km, esto produce un aumento en la T_k invertida de sólo 0.2 K pero a 100 km es de 4.5 K. Debido a que la T_k local tiene poca influencia sobre las T_v por encima de 110 km, el cambio en la T_k en esas regiones es proporcionalmente mayor (más de 30 K). Esto impone, en definitiva, el límite superior de inversión de la temperatura de las medidas de SABER en $15 \mu\text{m}$.

Los errores en la T_k invertida debidos a incertidumbres en esta constante obtenidos aquí para latitudes medias están en concordancia con los de *Mertens y col.* [2001], si bien ellos no invertían simultáneamente el CO_2 , por lo que eran algo menores, y no extendían los cálculos a condiciones extremas.

El segundo nivel excitado en $4.3 \mu\text{m}$ (01^{11}) también se ve afectado porque se excita por absorción de radiación solar por parte del nivel 01^{10} . Por esto, la población del primero está condicionada por la del segundo. Su T_v disminuye 2 K a 100 km. Sin embargo, la contribución de este nivel a la radiancia en $4.3 \mu\text{m}$ a esas alturas es pequeña por lo que la concentración de CO_2 invertida no varía. Los cambios que se observan en la razón de mezcla del CO_2 se deben a ajustes por cambios de presión originados por los cambios en la temperatura. Aumentos en la temperatura cinética producen aumentos en la presión y, por tanto, aumentos en la densidad. Para mantener las radiancias en $4.3 \mu\text{m}$ igual a las nominales es necesario disminuir la razón de mezcla del CO_2 . No obstante los cambios no son significativos por debajo de 120 km y alcanzan más del 20 % a 130 km.

En el caso de verano polar el efecto de variar esta tasa en ± 50 % es más acusado que en latitudes medias. Aunque no representados, los cambios en las temperaturas vibracionales se aprecian desde los 80 km. En concreto las T_v de los niveles fundamentales de los isótopos minoritarios se incrementan en 4 K a 90 km al disminuir la constante colisional. Esto se refleja en un cambio en la T_k invertida de unos -4 K. Además el comportamiento por debajo de 95 km es opuesto a por encima de esa altura. Esto sucede porque por debajo de 95 km las poblaciones de los niveles ν_2 son mayores que en ETL mientras que por encima son menores. Por tanto, al disminuir este ritmo de relajación, aumentan por debajo de 95 km y disminuyen por encima. A 100 km, la disminución en la T_v del nivel 01^{10} del isótopo principal alcanza -11 K lo que produce un aumento de 19 K en la T_k invertida. De nuevo los reajustes en la razón de mezcla del CO_2 invertido se deben a cambios en la presión y son significativos por encima de 125 km donde alcanzan el -30 %.

En cuanto al invierno polar, la disminución de esta constante produce una disminución de las T_v por ser las poblaciones de los niveles $\text{CO}_2(\nu_2)$ iguales o menores que las de ETL en todo el intervalo de altura en el que tiene efecto. Además, el efecto es perceptible desde 80 km. La disminución de la T_v del nivel 01^{10} del isótopo 626 es de 4 K a 90 km y la del isótopo 636 es de 3 K. Esto se compensa con un aumento en la T_k invertida de 3.6 K. A

110 km, la disminución en la T_v del nivel 01¹0 del 626 es de 12 K, que se refleja en un aumento de la T_k invertida de 24.1 K. De nuevo, esta amplificación del efecto se debe a que, a estas alturas, la población de los estados vibracionales depende débilmente de la T_k local. El CO₂ invertido no experimenta cambios mayores del 2 % por debajo de 100 km. Disminuye un 13 % a 110 km y un 23 % al disminuir la constante o el O(³P) en un 50 %.

Teniendo en cuenta que en el código de inversión de SABER se utiliza como valor nominal el límite superior de esta tasa colisional ($6 \times 10^{-12} \text{ cm}^3 \text{ s}^{-1}$), se ha considerado aquí el efecto en latitudes medias si el valor nominal fuera $3 \times 10^{-12} \text{ cm}^3 \text{ s}^{-1}$ y se disminuyese en un 50 % (lo cual es análogo a reducir la tasa operacional de SABER en un 75 %). Reducir la constante en un 50 % sobre un valor de 3×10^{-12} produce un efecto mayor sobre los parámetros invertidos que reducirla en la misma proporción sobre un valor de 6×10^{-12} . Esto es debido a que en el primer caso los estados vibracionales están más alejados del ETL por ser la constante menor. El aumento en la T_k invertida a 100 km es de 7 K y a 105 km es de 23 K. La consecuente disminución en la abundancia de CO₂ es de un 15 % a 110 km y más del 25 % a 130 km.

Procesos 3 y 4: $\text{CO}_2(\nu_3) + \text{M}(\text{N}_2, \text{O}_2) \leftrightarrow \text{CO}_2(\nu_1, \nu_2) + \text{M}(\text{N}_2, \text{O}_2)$

Estos procesos conectan los estados ν_2 más energéticos (grupos 030 y 040) con los estados ν_3 , luego los cambios en las constantes colisionales que los caracterizan afectan sobre todo a dichos niveles.

Según se observa en la Figura 3.15, los cambios en estas constantes dentro del intervalo de incertidumbre considerado aquí no tienen un efecto demasiado grande sobre las poblaciones de los niveles vibracionales del CO₂. En todo caso, al aumentar el valor de las constantes, la población de los niveles en 4.3 μm disminuye en favor de un aumento en la población de los niveles en 15 μm con $\nu_2 \geq 3$. Las T_v del primer y segundo niveles excitados en 4.3 μm (00⁰1 y 01¹1) varían sobre -1 K a 65 km al aumentar estas constantes en un 20 %. Sin embargo, a estas alturas, las contribuciones de la banda fundamental y la primera banda caliente a la radiancia en 4.3 μm es pequeña (ver Figura 3.5). De hecho, el grupo de segundas bandas calientes (021-020) es el responsable de estas emisiones y las T_v de los niveles 021 apenas varían. Esto hace que los cambios en la razón de mezcla del CO₂ invertida debidos a la variación de estas constantes sean despreciables (ver Figura 3.16). Asimismo, el cambio en la T_v del grupo 030 no supera ± 0.5 K a 80 km. Por esto, y teniendo en cuenta la reducida contribución de la segunda banda caliente a las emisiones en 15 μm , tampoco la T_k invertida sufre cambios.

En el caso de verano polar, el comportamiento de las poblaciones de los niveles vibracionales del CO₂ al modificar estas constantes es similar al del caso de latitudes medias. La T_v de los niveles en 4.3 μm cambia menos de 1.5 K a 70 km y la del grupo 030 algo más de 1 K a 80 km. Esto no produce variaciones significativas en las radiancias en 15 y 4.3 μm por lo que ni la T_k ni el CO₂ invertidos se ven afectados por la incertidumbre

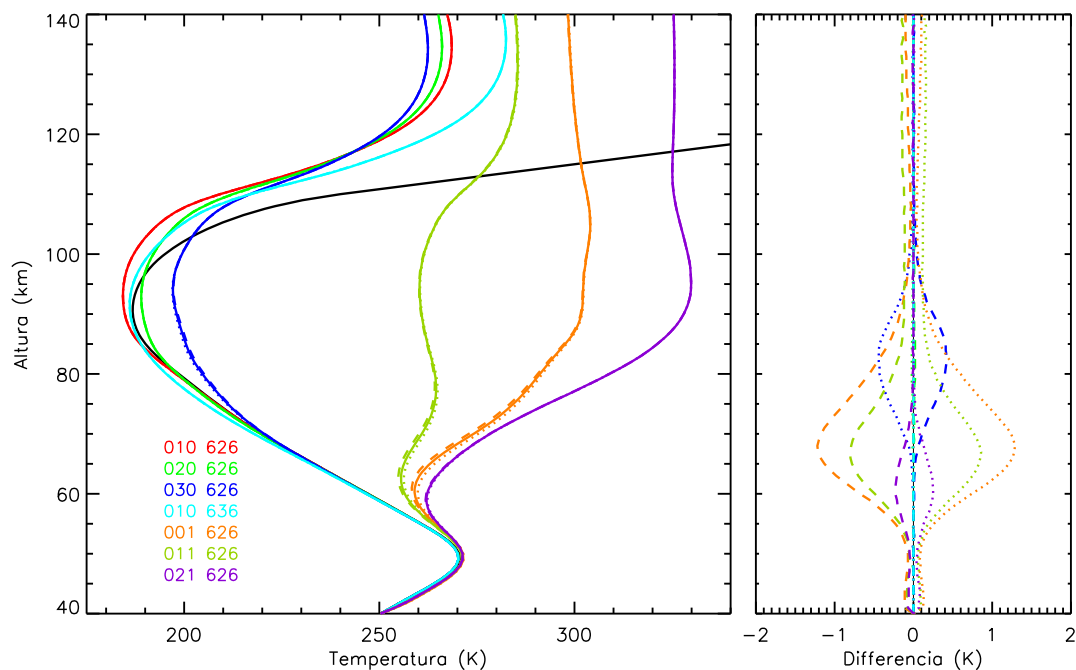


Figura 3.15: Como en la Figura 3.11 pero para la variación de la constante colisional de los procesos $\text{CO}_2(\nu_3)+\text{M}\leftrightarrow\text{CO}_2(\nu_1,\nu_2)+\text{M}$ en -20 % (punteada) y +20 % (discontinua).

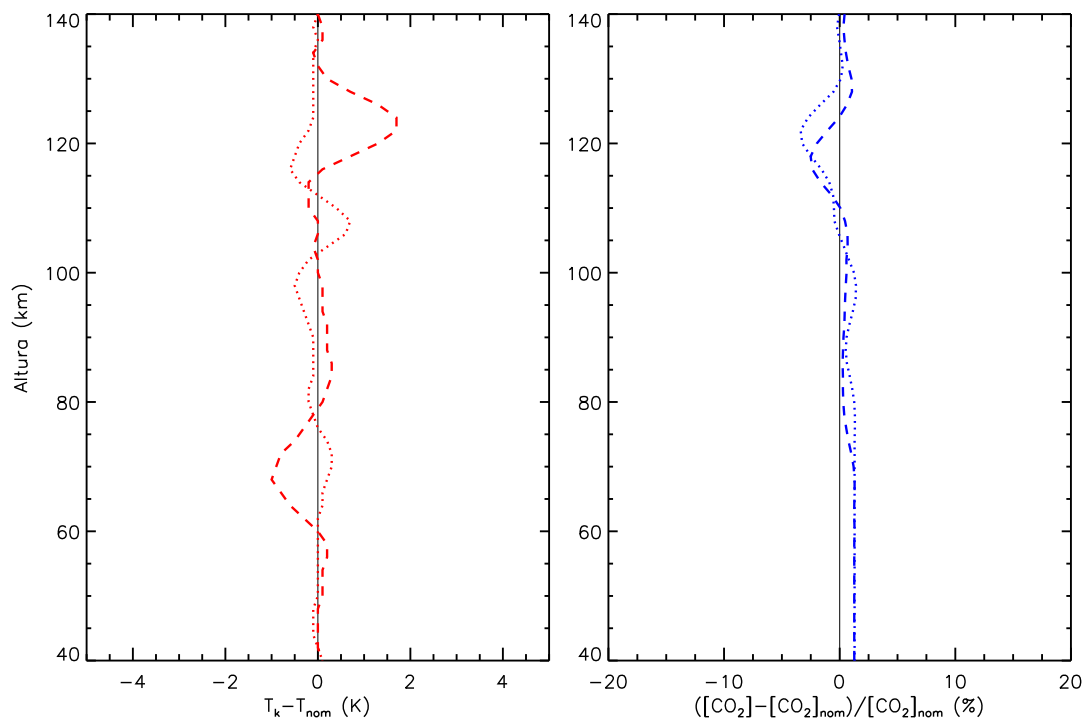


Figura 3.16: Como en la Figura 3.12 pero para la variación de la constante colisional de los procesos $\text{CO}_2(\nu_3)+\text{M}\leftrightarrow\text{CO}_2(\nu_1,\nu_2)+\text{M}$.

considerada en estas constantes.

El caso de invierno polar es análogo a los anteriores aunque el cambio en la T_v de los niveles en $4.3 \mu\text{m}$ es aún menos acusado ($<0.8 \text{ K}$). Por ello, la T_k y el CO_2 invertidos no sufren cambios significativos al variar estas constantes.

Proceso 9: $\text{CO}_2^i(\nu_3) + \text{N}_2 \leftrightarrow \text{CO}_2^i(\nu_3-1) + \text{N}_2(1)$

Este proceso permite la redistribución de la energía solar absorbida en el infrarrojo entre los niveles ν_3 de los isótopos del CO_2 . Por tanto, afecta a la T_v de dichos estados y, además, aunque en mucha menor medida, a la de los niveles en $15 \mu\text{m}$ más energéticos, que están conectados con los primeros a través de los procesos 3 y 4.

Las variaciones de las temperaturas vibracionales debidas a la incertidumbre en este proceso en latitudes medias se representan en la Figura 3.17. Por debajo de 100 km, los estados vibracionales que más acusan los cambios en esta constante son los del grupo 021. Al ser la T_v de estos niveles mayor que la del $\text{N}_2(1)$, la T_v de los primeros aumenta casi 1.5 K al disminuir la constante en un 15 %. No se aprecia un cambio significativo en la T_v del primer nivel excitado 00^01 ya que está casi totalmente acoplado con el $\text{N}_2(1)$ (tienen idénticas T_v) y reducir la constante en esta proporción no es suficiente como para desacoplarlos. La pequeña disminución de 0.5 K en la T_v del 00^01 alrededor de 80 km se debe a que, al reducir esta constante colisional, la población del $\text{N}_2(1)$ disminuye por ser menor la transferencia de energía vibracional desde los niveles 021 (que están altamente excitados por el Sol a estas alturas). Las variaciones en la T_v de los grupos 030 y 040 es casi despreciable. El cambio en la población del nivel 00^01 se propaga por encima de 90 km debido al transporte radiativo desde capas inferiores aunque su temperatura vibracional sólo disminuye en 0.3 K al reducir esta constante.

El efecto sobre la T_k y el CO_2 invertidos simultáneamente se muestra en la Figura 3.18. En la baja termosfera, la disminución en la T_v del nivel 00^01 al reducir esta constante se compensa con un aumento de la concentración de CO_2 de un 3 % a 110 km. Como la banda fundamental 01^10-00^00 (responsable de las emisiones en $15 \mu\text{m}$ en esta región) es ópticamente delgada a estas alturas, la radiancia en $15 \mu\text{m}$ es directamente proporcional a la razón de mezcla del dióxido de carbono (ver Ecuación 2.56) luego tiende a aumentar al hacerlo el CO_2 . Por esto, para reproducir la radiancia simulada, la T_k invertida disminuye 2.5 K. Por debajo de 100 km, el comportamiento es contrario ya que son las segundas bandas calientes (021-020) las responsables de las emisiones en $4.3 \mu\text{m}$ y la T_v de los estados 021 aumenta. En este caso, el CO_2 invertido disminuye un 2 % a 80 km y la T_k invertida aumenta 0.9 K. Por encima de 100 km, el efecto al incrementar la constante colisional en un 20 % es opuesto al descrito arriba, con cambios de CO_2 y T_k de -6 % y 0.7 K respectivamente a 110 km. A 80 km, las diferencias son de -5.4 % y 1 K, que no es lo esperado pero que posiblemente sea debido a la no-linealidad del problema.

El comportamiento en condiciones de verano polar es similar aunque más acusado,

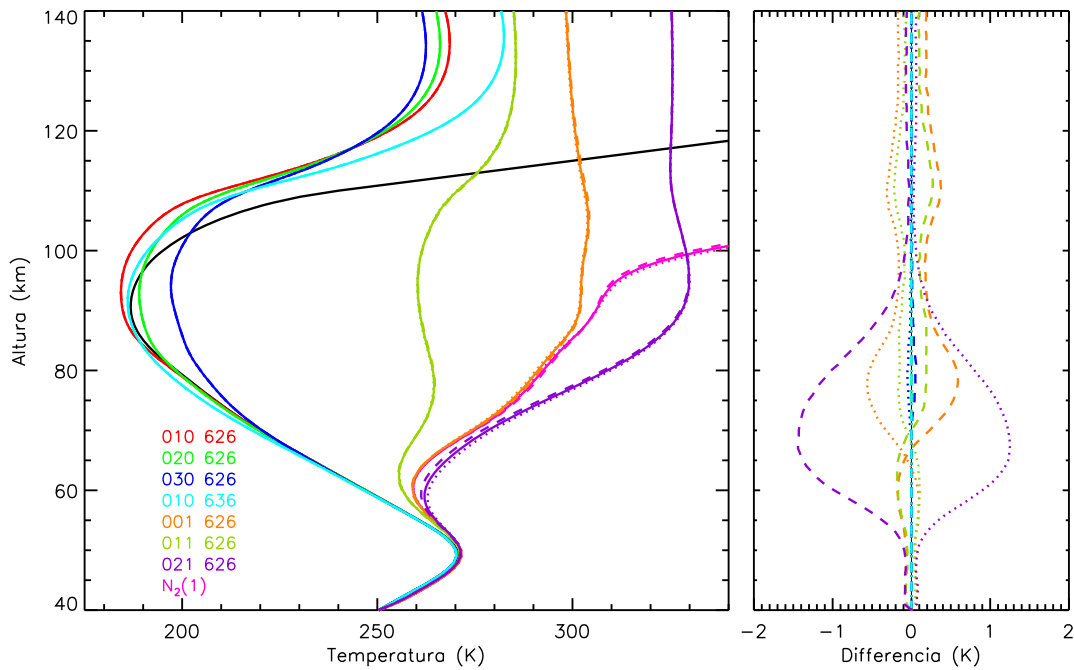


Figura 3.17: Como en la Figura 3.11 pero para la variación de la constante colisional del proceso $\text{CO}_2^i(\nu_3)+\text{N}_2\leftrightarrow\text{CO}_2^i(\nu_3-1)+\text{N}_2(1)$ en -15 % (punteada) y +20 % (discontinua). Se incluye la T_v del $\text{N}_2(1)$ (rosa).

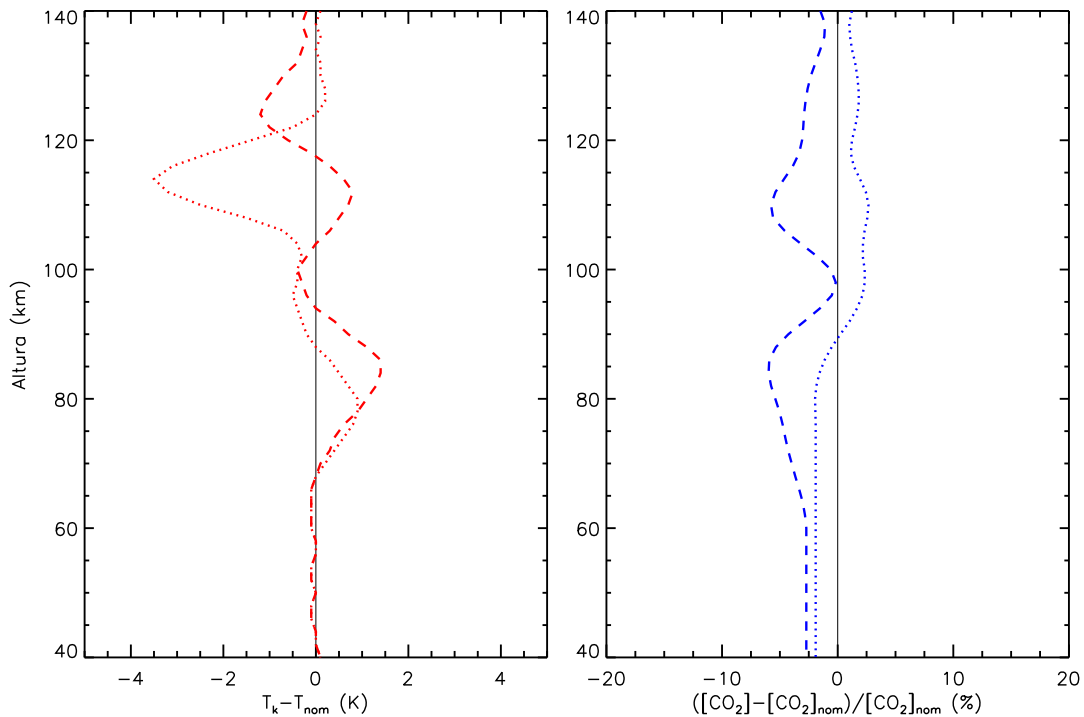


Figura 3.18: Como en la Figura 3.12 pero para la variación de la constante colisional del proceso $\text{CO}_2^i(\nu_3)+\text{N}_2\leftrightarrow\text{CO}_2^i(\nu_3-1)+\text{N}_2(1)$.

especialmente para el caso de la T_k . Esto se debe a que, al estar los niveles más separados del ETL que en el caso de latitudes medias, son necesarios cambios mayores en la T_k para compensar las variaciones de las T_v de los niveles ν_2 del CO_2 . Al disminuir la constante colisional, el CO_2 aumenta algo más del 5% en la baja termosfera y la T_k disminuye unos 8 K a 110 km. Alrededor de 65 km se observa un aumento de la T_k de 6 K que, como en latitudes medias, no es esperado pero puede deberse a inestabilidades de la inversión en estas condiciones extremas.

En el invierno polar, las diferencias con respecto a la inversión nominal son menores ya que este proceso redistribuye la energía solar absorbida por los niveles $\text{CO}_2(\nu_3)$ y, al ser el ángulo cenital solar mayor en este caso, los efectos son menores. En todo caso, al disminuir la constante, las variaciones máximas del CO_2 y de la T_k invertidos son de +3% y -1 K respectivamente alrededor de 84 y 100 km.

Proceso 11: $\text{N}_2 + \text{O}(^1\text{D}) \leftrightarrow \text{N}_2(1) + \text{O}(^3\text{P})$

Este mecanismo excita el $\text{N}_2(1)$ que, a través del proceso 9, finalmente activa los niveles en 4.3 μm del CO_2 . Por tanto, las variaciones en la constante colisional de este proceso afectan a las poblaciones de los niveles ν_3 . Por otra parte, también dan idea de los errores en la T_k y CO_2 invertidos debidos a incertidumbres en la concentración de $\text{O}(^1\text{D})$.

En latitudes medias, aumentar esta constante en un 50% supone un aumento de la T_v del nivel 00⁰1 de 2 K a 110 km. Esto se traduce en una disminución del 20% en la concentración de CO_2 . Como en el caso del proceso anterior, al disminuir el CO_2 en la baja termosfera, la radiancia en 15 μm disminuye. Esto se compensa con un aumento en la T_k invertida de 10 K a 110 km.

El efecto de esta constante sobre los parámetros invertidos se extiende hasta los 90 km. Aunque el cambio en la T_v del 00⁰1 es máximo a esta altura, en esta región la banda fundamental en 4.3 μm es ópticamente espesa, por lo que su contribución a la radiancia es menor del 20%. Las temperaturas vibracionales del resto de niveles apenas varían y, en consecuencia, el cambio de CO_2 es casi despreciable. Por tanto, por debajo de la mesopausa los cambios en los parámetros invertidos debidos a la incertidumbre de esta constante no son elevados (aunque el hecho de que el CO_2 disminuya en 6% a 85 km al disminuir esta constante se traduce en un aumento de la T_k de 1.6 K).

Un detalle interesante es que el máximo del cambio en la T_k invertida (114 km) no sucede a la misma altura que el del cambio en el CO_2 (108 km) aunque el primero se deba al segundo. Esto es una muestra de la no linealidad del problema. En este caso concreto, la altura del máximo de la diferencia en T_k es superior. Esto se debe a que, al disminuir la altura aumenta el espesor óptico por lo que la dependencia de la radiancia en 15 μm con respecto a la razón de mezcla del CO_2 (y por tanto la T_k invertida) es menor.

En verano polar, si bien las variaciones máximas en la T_k y el CO_2 invertidos son del mismo orden que en latitudes medias, el efecto de esta constante sobre la T_k es mayor

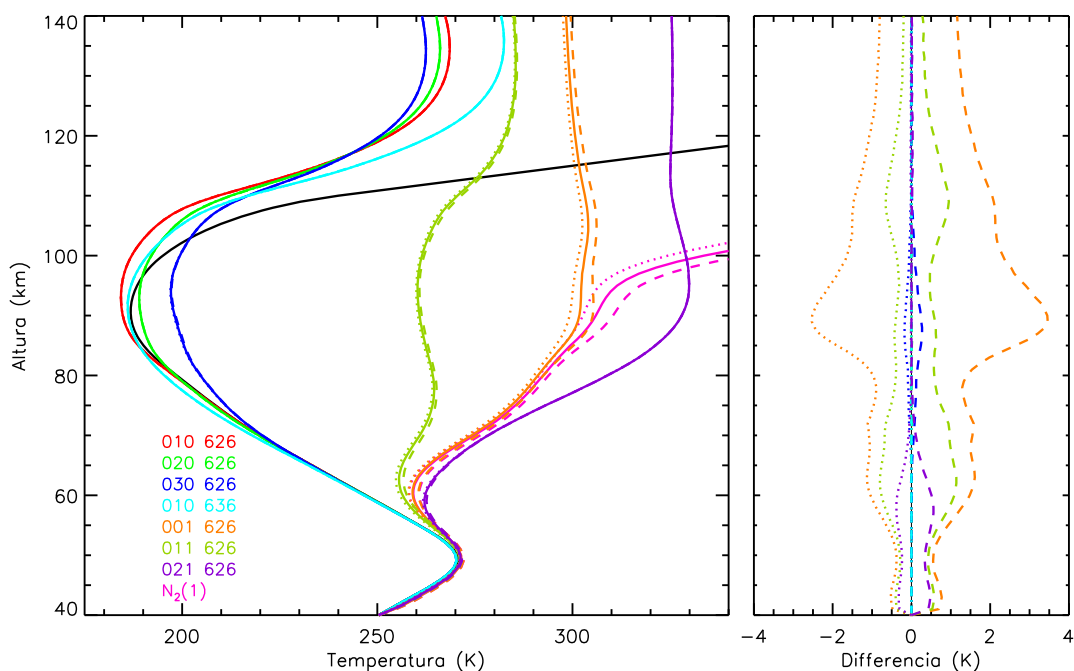


Figura 3.19: Como en la Figura 3.11 pero para la variación de la constante colisional del proceso $\text{N}_2 + \text{O}(^1\text{D}) \leftrightarrow \text{N}_2(1) + \text{O}(^3\text{P})$ en un factor $1/3$ (punteada) y un factor 1.5 (discontinua). Se incluye la T_v del $\text{N}_2(1)$ (rosa).

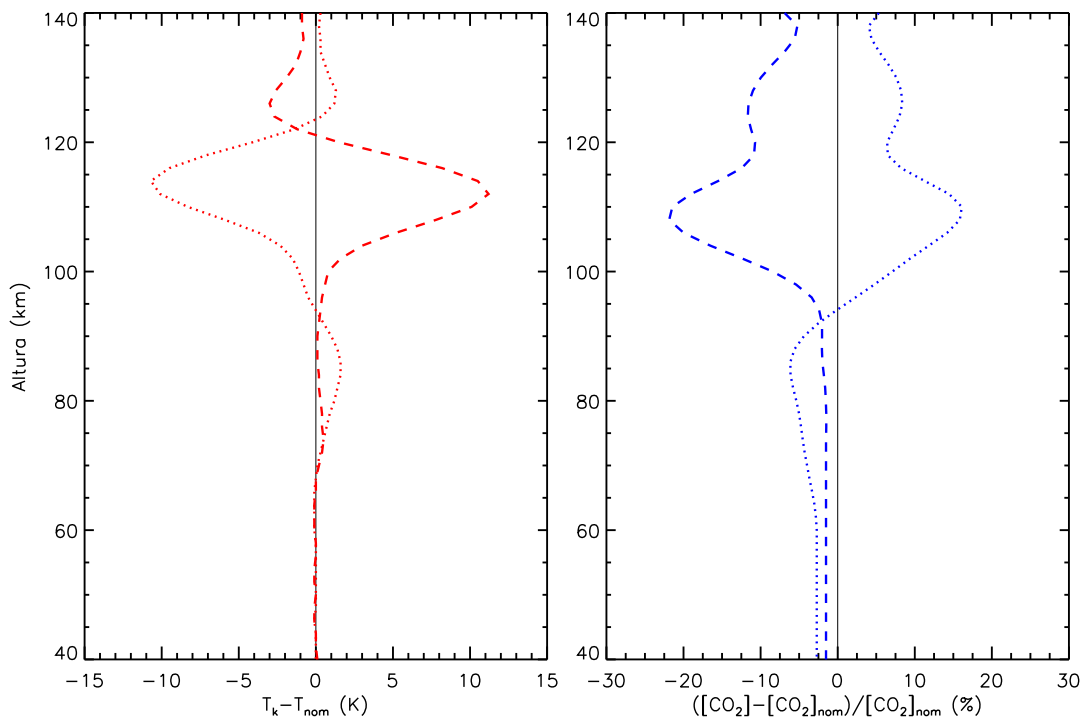


Figura 3.20: Como en la Figura 3.12 pero para la variación de la constante colisional del proceso $\text{N}_2 + \text{O}(^1\text{D}) \leftrightarrow \text{N}_2(1) + \text{O}(^3\text{P})$.

alrededor de 100 km por estar los niveles significativamente más alejados del ETL en este caso. A esta altura, mientras el incremento de la constante supone un aumento de la T_k invertida en latitudes medias de 1 K, en verano polar aumenta 4 K y ya a 104 km alcanza los 9 K. El CO_2 disminuye un 13 % a 100 km y a 104 km un 20 %.

Las variaciones en la T_v de los niveles $\text{CO}_2(\nu_3)$ en invierno polar son mucho menores que en los dos casos anteriores ya que están menos alejados de las condiciones de ETL. Los cambios en la T_k y el CO_2 invertidos son de algo más de +4 K y -11 % respectivamente a 110 km al aumentar la constante. Por debajo de 100 km, las variaciones son despreciables.

Proceso 14: $\text{N}_2(1)+\text{O}(^3\text{P})\leftrightarrow\text{N}_2+\text{O}(^3\text{P})$

Del mismo modo que el proceso anterior, este mecanismo afecta indirectamente a las poblaciones de los niveles ν_3 del CO_2 ya que condiciona la población del nitrógeno molecular vibracionalmente excitado. Debido a que el oxígeno atómico empieza a ser abundante por encima de 85 km, es allí donde esta constante surte mayor efecto.

Si se aumenta esta constante, la población del nivel $\text{N}_2(1)$ disminuye por debajo de 100 km al haber una transformación más eficaz de su energía vibracional en energía cinética. Esto hace que, debido a la actuación del proceso 9, disminuya también la población de los niveles en $4.3 \mu\text{m}$. En concreto, la T_v del primer nivel excitado (principal contribuyente a la radiancia en $4.3 \mu\text{m}$ en la baja termosfera) disminuye 0.8 K a 110 km debido no sólo al efecto local de esta constante, sino al propagado desde capas inferiores mediante transporte radiativo. También el estado 01^11 sufre cambios aunque de menor magnitud. Estas variaciones se compensan con un aumento del CO_2 del 9 % a 110 km. Esto a su vez induce una disminución de la T_k a esta altura de 4.6 K.

El aumento en el dióxido de carbono es algo mayor de lo esperado¹ porque, al disminuir la T_k disminuye la presión (en algo menos del 4 %). En consecuencia, disminuye la densidad total lo cual, para reproducir la radiancia sintética en $4.3 \mu\text{m}$, se suple con un aumento de la razón de mezcla de CO_2 invertida. Por debajo de 100 km, aparte del nivel 00^01 (cuya T_v disminuye 0.6 K a 90 km al aumentar este ritmo de relajación), ningún otro estado vibracional sufre variaciones por lo que el efecto sobre los parámetros invertidos es nulo.

El comportamiento es similar en verano polar aunque, de nuevo, los efectos son mayores. En este caso, el aumento del CO_2 invertido al disminuir la constante es de casi un 20 % a 110 km por lo que la T_k invertida disminuye 7.5 K. Por debajo de 104 km, los cambios en ambas magnitudes son poco relevantes.

En invierno polar, el efecto de esta constante sobre la T_k y el CO_2 invertidos es bastante menos importante no superando los 3 K y el 6 %, respectivamente, a ninguna altura del intervalo estudiado.

¹En condiciones de ópticamente delgado un cambio en la T_v de 0.8 K genera un cambio del 3 % en las radiancias alrededor de $4.3 \mu\text{m}$ a la T_v del nivel 00^01 a 110 km (300 K).

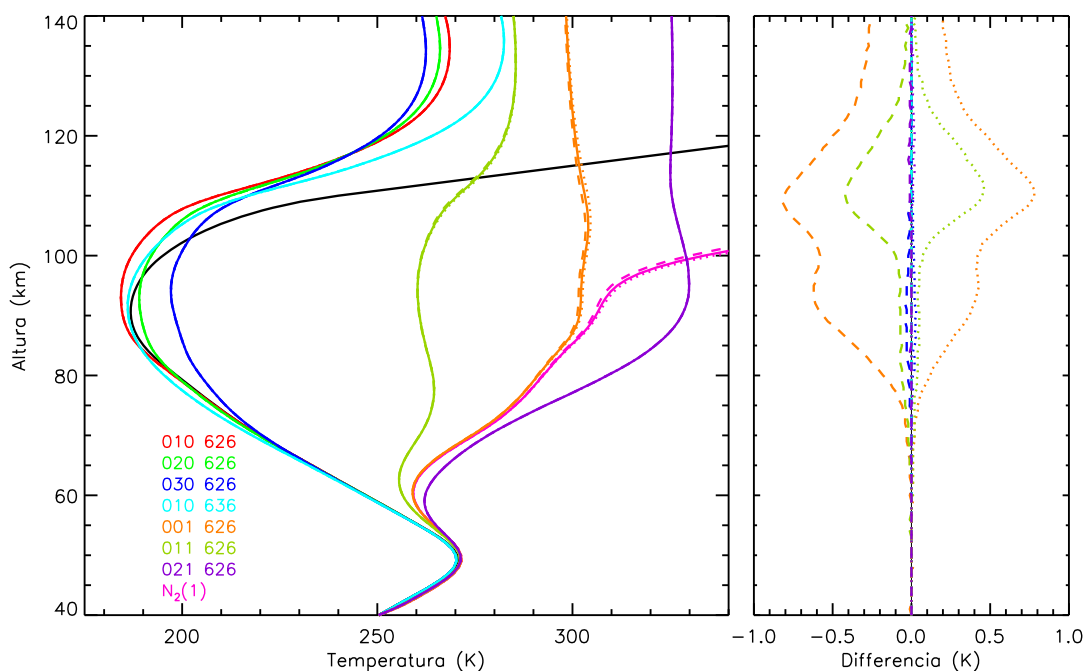


Figura 3.21: Como en la Figura 3.11 pero para la variación de la constante colisional del proceso $N_2(1)+O(^3P)\leftrightarrow N_2+O(^3P)$ en un factor $1/3$ (punteada) y un factor 1.5 (discontinua).

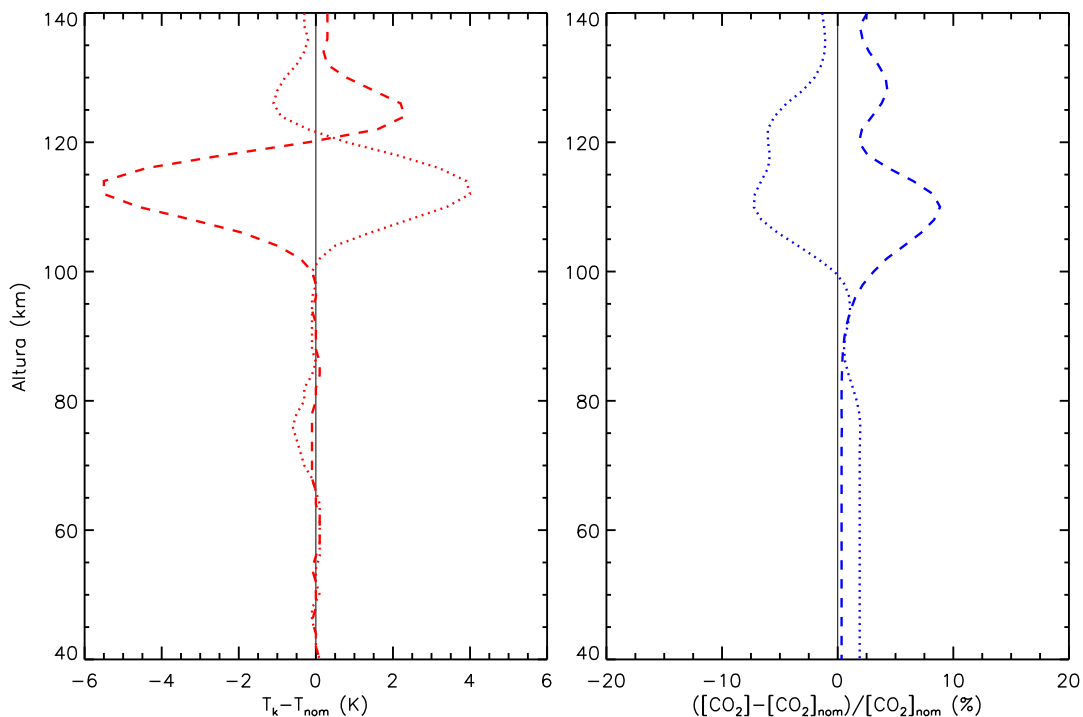


Figura 3.22: Como en la Figura 3.12 pero para la variación de la constante colisional del proceso $N_2(1)+O(^3P)\leftrightarrow N_2+O(^3P)$. Se incluye la T_v del $N_2(1)$ (rosa).

3.5. Resumen y discusión

SABER está realizando medidas de emisiones atmosféricas alrededor de 15 y 4.3 μm a partir de las cuales se invierten la temperatura cinética y la abundancia del dióxido de carbono. Uno de los objetivos de este instrumento es invertir la T_k hasta 100 km con errores menores de 3 K, y el CO_2 hasta 140 km con errores menores del 15 %.

En este capítulo se han analizado los errores en dichos parámetros producidos por las incertidumbres en las constantes que caracterizan los procesos colisionales que tienen lugar en la atmósfera. Las Figuras 3.23-3.28 muestran el efecto conjunto de todas las incertidumbres en las constantes consideradas sobre los perfiles de temperatura cinética y dióxido de carbono invertidos simultáneamente para tres atmósferas de referencia. Los perfiles envolventes se han calculado mediante la raíz de la suma de los cuadrados de los errores debidos a la incertidumbre en cada una de las constantes. Asimismo, en las Tablas 3.11-3.14, se muestran los errores en la T_k y CO_2 invertidos para las alturas de interés. La columna ‘Total’ indica el efecto global de las incertidumbres en las constantes. Además, la columna denominada ‘Ruido’ da cuenta del error producido por el ruido del instrumento.

En **latitudes medias** los errores en la temperatura cinética asociados a los parámetros cinéticos son menores de 3 K por debajo de 100 km. A 100 km el error es de $-2/+5$ K, fundamentalmente debido a la incertidumbre bien del ritmo de relajación del $\text{CO}_2(010)$ con el oxígeno atómico o bien de la concentración de este último. A 110 km, los errores ascienden a $-15/32$ K, bastante más elevados que el debido al ruido del instrumento (12 K).

Aunque por encima de esta altura no se espera invertir perfiles fiables de T_k , no hay que olvidar que la inversión de CO_2 se realiza de forma simultánea. Esto quiere decir que los valores de temperatura cinética utilizada en esta región tienen importancia ya que condicionan la presión y, por tanto, la densidad total. En consecuencia, la razón de mezcla del CO_2 invertida por encima de esta altura es función de la T_k invertida.

Las incertidumbres en la abundancia de dióxido de carbono debidas a los errores en los parámetros colisionales son menores del 15 % hasta 105 km. La mayor fuente de error por encima de esta altura es la incertidumbre del 50 % en la tasa y la eficiencia de la excitación del $\text{N}_2(1)$ por parte del $\text{O}(^1\text{D})$ (o de la abundancia de este último). Sin embargo, el modelado de este proceso afecta a los parámetros invertidos principalmente entre 105 y 115 km. Luego, por encima de esta última altura, este error desciende hasta estar por debajo del 15 % alrededor de 120 km. Empieza entonces a dominar el efecto de $k_{\text{CO}_2-\text{O}}$ ó de $[\text{O}]$ que produce un error en el CO_2 de -25 % a 130 km. Este error indirecto se genera por variaciones en la densidad total debidas a cambios en la T_k (y presión).

En **verano polar** la temperatura cinética invertida presenta errores debidos a incertidumbres en las constantes colisionales mayores de 3 K por encima de 85 km. Esto sucede

porque la tasa de relajación de los estados $\text{CO}_2(\nu_2)$ por el oxígeno atómico empieza a ser importante a alturas menores que en las otras dos atmósferas de referencia por estar los estados vibracionales más alejados del ETL. A 90 km, el error es de $-4.2/+3.7$ K. A partir de la mesopausa empiezan además a acumularse los errores derivados de incertidumbres en otras constantes, como la de colisiones entre el nitrógeno molecular y el oxígeno atómico electrónicamente excitado (O^1D). Si bien dicha constante aisladamente no influye de manera importante hasta 100 km, su efecto sobre la T_k invertida (a través de su efecto sobre la concentración de CO_2) aparece desde los 90 km. Los errores globales debidos a los parámetros colisionales son de $-6.5/+20$ K a 100 km. A partir de 102 km, se añade además el error (también indirecto por afectar en primera instancia al CO_2) de las incertidumbres en la tasa de relajación del $\text{N}_2(1)$ por el O^3P . El efecto acumulado de las incertidumbres en estas tres tasas colisionales hacen que el error a 105 km sea de $-14/+42$ K, es decir, muy por encima del error de 7.5 K debido al ruido.

Los errores en la razón de mezcla de CO_2 en estas condiciones asociados a las constantes colisionales son menores del 15 % hasta 100 km. A partir de esta altura, las incertidumbres que más influyen son las que más afectan al modelado de las poblaciones de los niveles $\text{CO}_2(\nu_3)$ (colisiones entre el O^1D y el N_2 o bien incertidumbre en la concentración del primero y relajación del $\text{N}_2(1)$ por el O^3P) junto al ritmo de colisiones entre el $\text{CO}_2(\nu_2)$ y el O^3P . Alrededor de 100 km los errores globales son de $-25/+20$ %. Aunque estos errores presentan una leve disminución alrededor de 120 km, porque a esta altura desaparecen los efectos de las colisiones entre el nitrógeno molecular con el O^1D y el O^3P , los errores son mayores del 15 % entre 100 y 140 km. Alcanzan el valor máximo a 125 km con un $-33/+17$ %.

En **invierno polar** los errores en la T_k invertida debidos a parámetros cinéticos son menores de 3 K hasta los 90 km. A esta altura aparece el efecto de la incertidumbre en la tasa de colisiones entre el $\text{CO}_2(\nu_2)$ y el O^3P . El resto de parámetros no tienen un efecto significativo sobre la T_k a ninguna altura de interés y en los intervalos de incertidumbre considerados. A 100 km el error es de $-1.5/+4.5$ K y a 110 km de $-9/+25$ K.

Los errores en el CO_2 invertido son menores en el caso de invierno polar que en los otros dos casos ya que se ha considerado un ángulo cenital mayor con lo que los estados $\text{CO}_2(\nu_3)$ están menos alejados del ETL. Estos errores no superan el 15 % hasta alcanzados los 110 km. Aunque el efecto de la incertidumbre en las tasas colisionales no es significativo para los procesos considerados aisladamente, el error acumulado a dicha altura es de $-20/+10$ %. Éste se debe fundamentalmente a la combinación del error debido a la tasa de relajación del $\text{CO}_2(\nu_2)$ en colisiones con el O^3P y a la de transferencia de energía del O^1D al $\text{N}_2(1)$. Este error global disminuye a 120 km donde es tan sólo de $-8/+5$ % y vuelve a aumentar por encima de esa altura. A 130 km es de $-25/+10$ %.

Teniendo en cuenta las incertidumbres actuales de las constantes colisionales del modelo de no-ETL, la temperatura cinética se puede invertir (simultáneamente a la $[\text{CO}_2]$)

a partir de las medidas en $15 \mu\text{m}$ de SABER con errores menores de 3 K por debajo de 100 km en condiciones de latitudes medias. Sin embargo, en condiciones polares, esta altura se reduce a 85-90 km.

El CO_2 se puede invertir (simultáneamente a la T_k) a partir de las medidas de SABER en $4.3 \mu\text{m}$ con errores menores del 15 % por debajo de 105-110 km excepto en casos de condiciones de verano polar en las que esta altura se reduce a 100 km.

Para reducir estos errores sistemáticos y aumentar la altura a la que estas magnitudes se puedan invertir de forma precisa, es necesario determinar con mayor precisión las tasas de colisiones de $\text{CO}_2(\nu_2)\text{-O}(^3\text{P})$ y $\text{N}_2(1)\text{-O}(^1\text{D})$. También es deseable disminuir la incertidumbre en la tasa de colisiones $\text{N}_2(1)\text{-O}(^3\text{P})$ ya que no hay medidas recientes de esta tasa colisional.

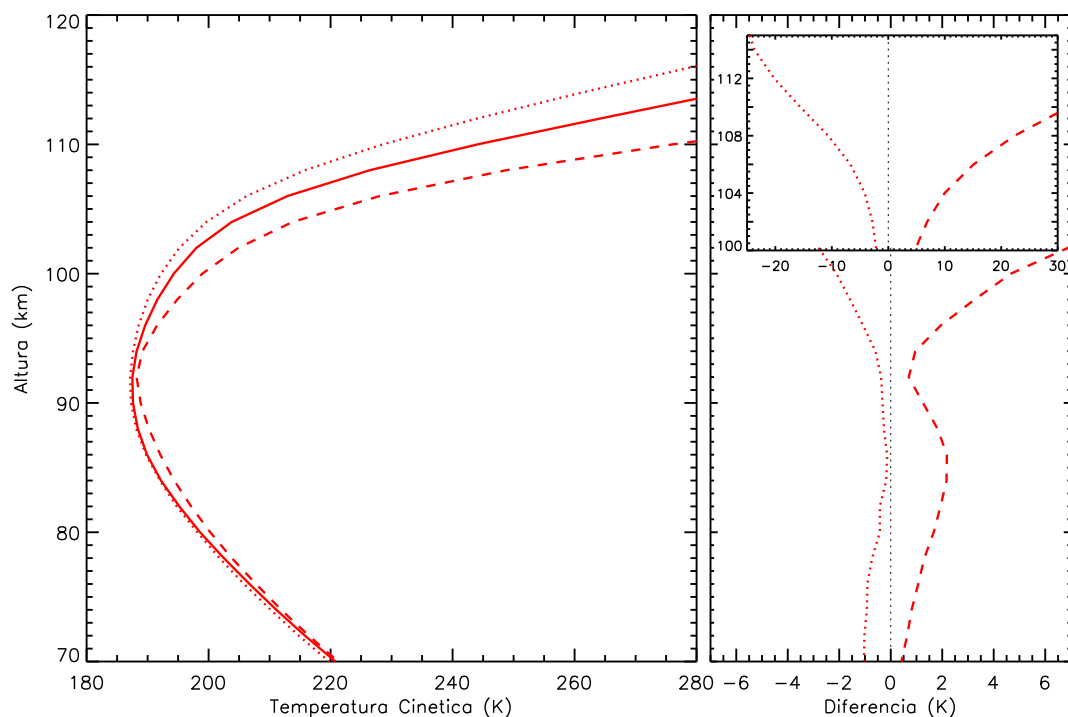


Figura 3.23: Efecto global sobre la T_k invertida debido a incertidumbres en las constantes colisionales objeto de estudio en latitudes medias para ACS=60°. (Línea sólida: caso nominal; línea punteada: valor mínimo; línea discontinua: valor máximo). El panel derecho muestra las diferencias con respecto al caso nominal.

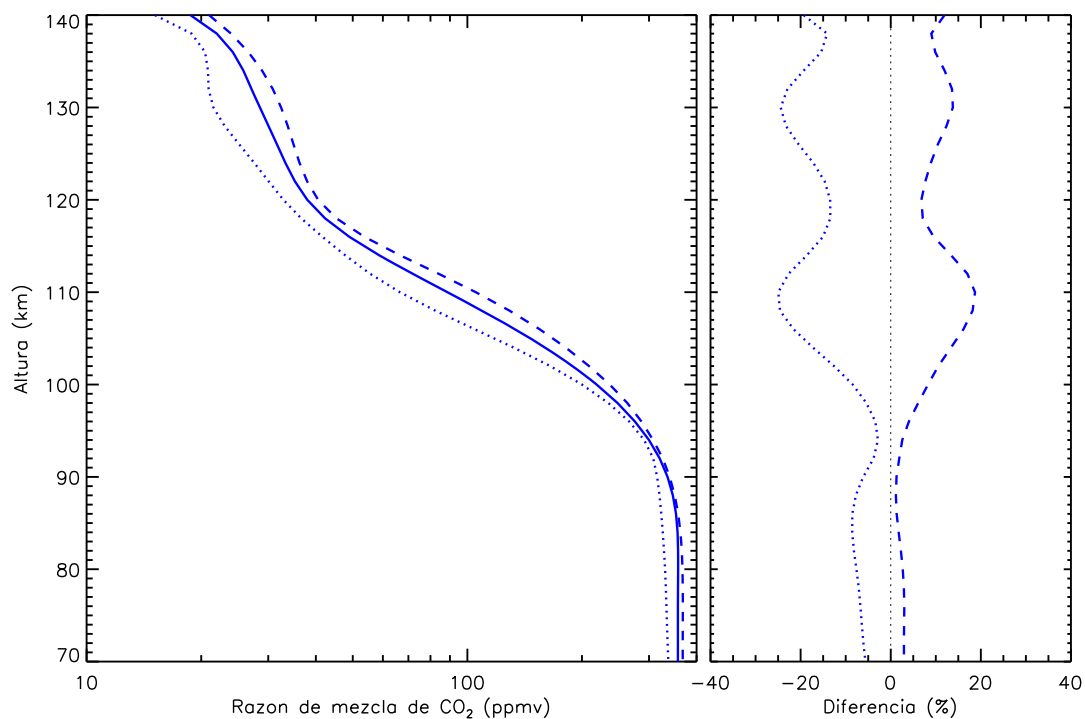


Figura 3.24: Como en la Figura 3.23 pero para el CO_2 invertido.

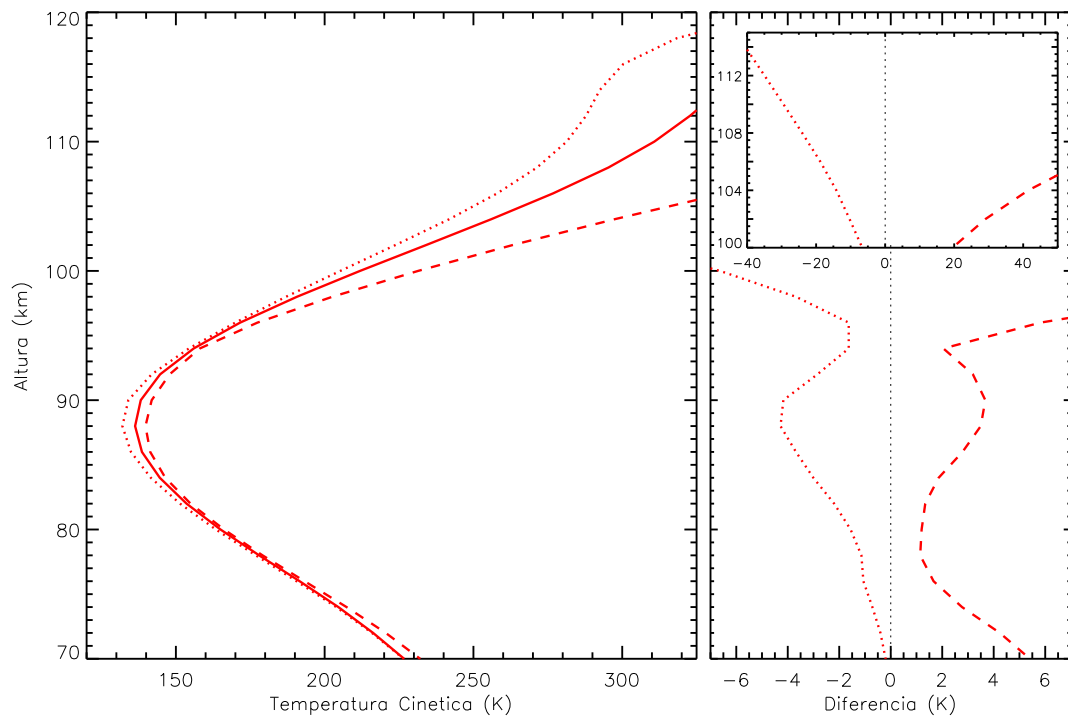


Figura 3.25: Como en la Figura 3.23 pero para verano polar ($ACS=60^\circ$).

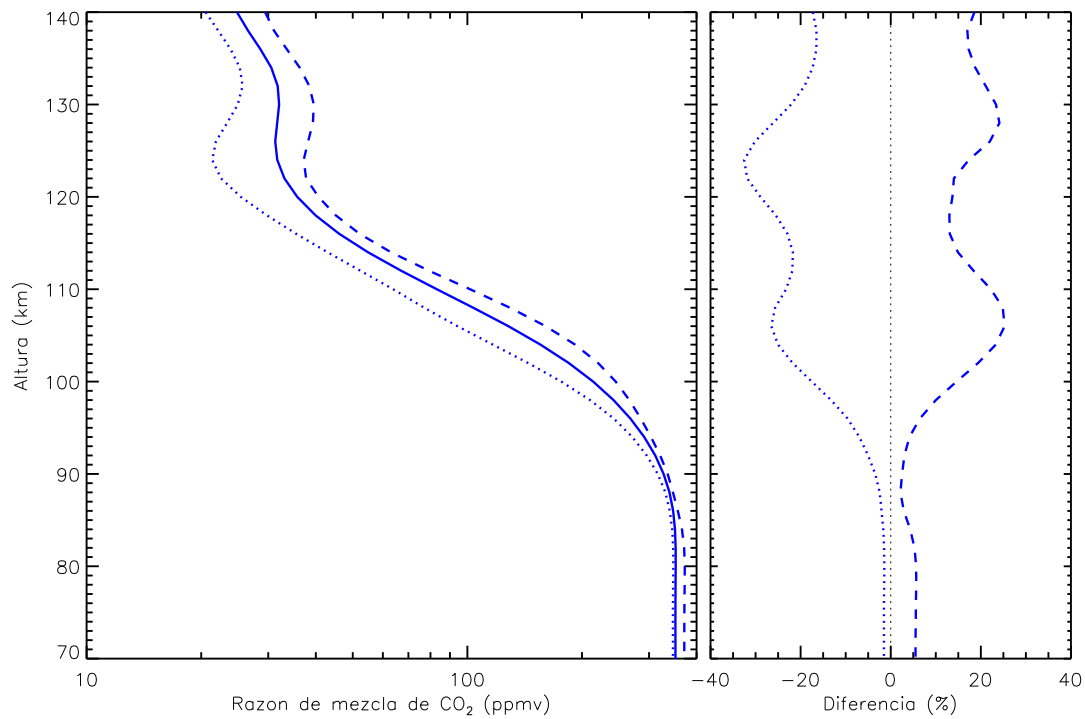


Figura 3.26: Como en la Figura 3.24 pero para verano polar ($ACS=60^\circ$).

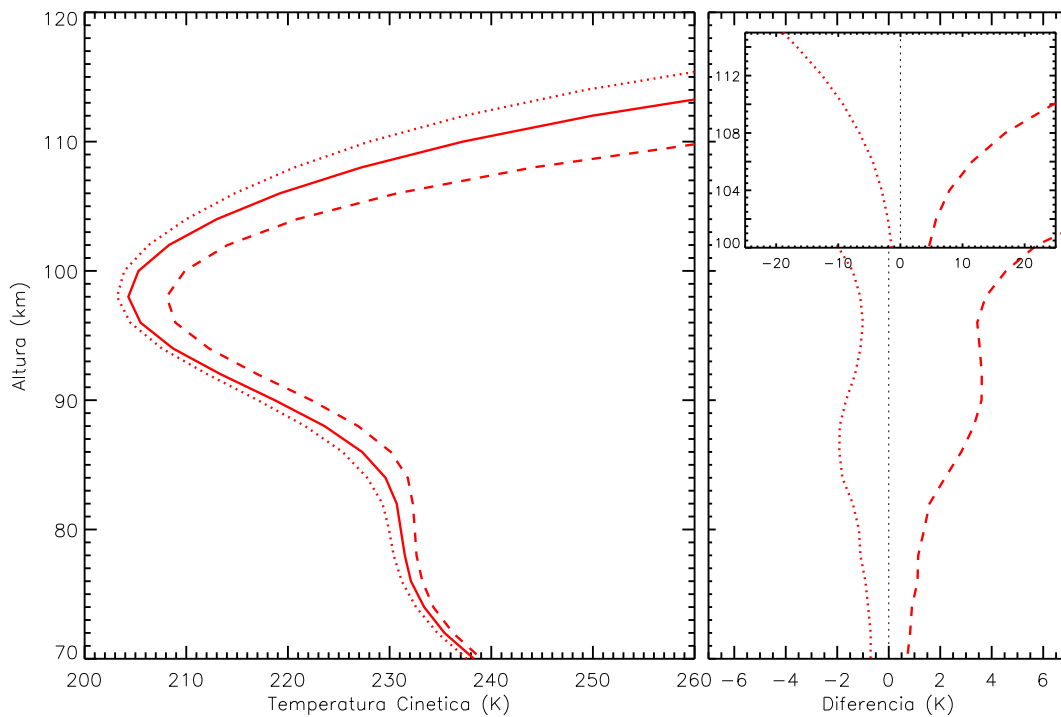


Figura 3.27: Como en la Figura 3.23 pero para invierno polar ($ACS=80^\circ$).

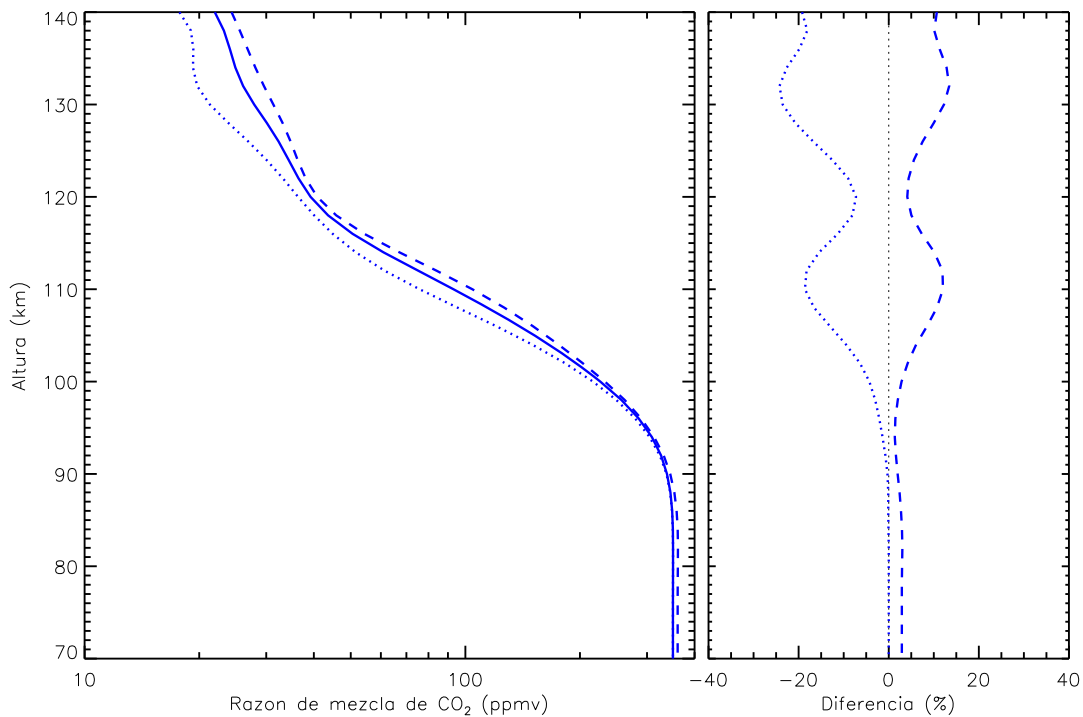


Figura 3.28: Como en la Figura 3.24 pero para invierno polar ($ACS=80^\circ$).

Tabla 3.11: Incertidumbres en la temperatura cinética invertida (en K) debidas a la incertidumbre indicada en la tasa colisional k_i para latitudes medias (ACS=60°). La columna 'TOTAL' corresponde a la raíz de la suma de cuadrados de las anteriores. La columna 'Ruido' indica el error debido al ruido del instrumento.

z [km]	T_k [K]	k_1					k_2 ó k_3					k_4 y k_9					k_{11}					k_{14}					TOTAL		Ruido [K]
		-20%	+25%	-50%	+50%	-20%	+20%	-20%	+20%	-15%	+20%	-30%	+50%	-30%	+50%	-30%	+50%	-30%	+50%	-30%	+50%	-30%	+50%	neg	pos				
70.0	220.8	0.0	-0.1	-0.1	-0.4	0.3	-0.9	0.2	0.1	0.1	0.2	0.1	0.2	0.1	0.2	0.1	0.2	0.1	0.2	0.1	0.2	0.1	0.2	-1.0	0.4	0.4			
72.0	215.8	0.0	0.0	0.0	-0.5	0.3	-0.8	0.4	0.3	0.3	0.4	0.3	0.4	0.3	0.4	0.3	0.4	0.3	0.4	0.3	0.4	0.3	0.4	-1.0	0.6	0.6			
74.0	211.1	0.0	0.1	0.0	-0.6	0.2	-0.5	0.6	0.4	0.5	0.5	0.4	0.6	0.4	0.5	0.5	0.4	0.6	0.4	0.5	0.5	0.4	0.6	-0.9	0.8	0.7			
76.0	206.7	-0.1	0.1	0.0	-0.6	0.0	-0.3	0.8	0.6	0.7	0.4	0.6	0.8	0.6	0.7	0.4	0.6	0.8	0.6	0.7	0.4	0.6	0.8	-0.9	1.1	0.7			
78.0	202.5	-0.1	0.2	0.2	-0.5	-0.1	-0.1	0.9	0.9	0.9	0.9	0.9	0.9	0.9	0.9	0.9	0.9	0.9	0.9	0.9	0.9	0.9	0.9	-0.7	1.3	0.7			
80.0	198.6	-0.1	0.2	0.3	-0.2	-0.2	0.1	0.9	1.1	1.2	0.3	1.1	1.2	0.3	1.2	0.3	1.1	1.2	0.3	1.2	0.3	1.1	1.2	-0.4	1.7	0.9			
82.0	195.2	-0.2	0.1	0.2	-0.1	-0.2	0.2	0.7	1.3	1.4	0.2	1.3	1.4	0.2	1.4	0.2	1.3	1.4	0.2	1.4	0.2	1.3	1.4	-0.4	1.9	1.0			
84.0	192.2	-0.1	0.2	0.1	0.2	-0.1	0.3	0.5	1.4	1.6	0.2	1.4	1.6	0.2	1.6	0.2	1.4	1.6	0.2	1.6	0.2	1.4	1.6	-0.2	2.2	1.0			
86.0	189.9	-0.1	0.2	0.0	0.3	-0.1	0.3	0.3	1.4	1.6	0.1	1.4	1.6	0.1	1.6	0.1	1.4	1.6	0.1	1.6	0.1	1.4	1.6	-0.1	2.2	1.1			
88.0	188.4	-0.1	0.1	-0.2	0.3	-0.1	0.2	0.0	1.1	1.4	0.1	1.1	1.4	0.1	1.4	0.1	1.1	1.4	0.1	1.4	0.1	1.1	1.4	-0.3	1.8	1.5			
90.0	187.6	0.0	0.0	-0.2	0.2	-0.1	0.2	-0.2	0.7	1.0	0.1	0.7	1.0	0.1	1.0	0.1	0.7	1.0	0.1	1.0	0.1	0.7	1.0	-0.3	1.3	2.0			
92.0	187.5	0.0	0.0	0.2	0.0	-0.2	0.2	-0.3	0.4	0.5	0.2	0.4	0.5	0.2	0.5	0.2	0.4	0.5	0.2	0.5	0.2	0.4	0.5	-0.4	0.7	2.4			
94.0	188.2	0.0	0.0	0.9	-0.3	-0.3	0.1	-0.4	0.0	0.0	0.3	0.0	-0.4	0.0	0.0	0.3	0.0	-0.4	0.0	0.0	0.3	0.0	-0.6	1.0	2.4				
96.0	189.6	0.0	0.0	1.9	-0.7	-0.4	0.1	-0.5	-0.2	-0.5	0.4	-0.2	-0.5	0.4	-0.5	0.4	-0.2	-0.5	0.4	-0.5	0.4	-0.2	-1.1	1.9	2.3				
98.0	191.6	0.1	0.0	3.2	-1.2	-0.5	0.1	-0.4	-0.3	-0.8	0.6	-0.3	-0.8	0.6	-0.8	0.6	-0.3	-0.8	0.6	-0.8	0.6	-0.3	-1.6	3.3	2.8				
100.0	194.3	0.0	-0.1	4.6	-1.7	-0.4	0.0	-0.4	-0.4	-1.1	0.8	-0.4	-1.1	0.8	-1.1	0.8	-0.4	-1.1	0.8	-1.1	0.8	-0.4	-2.1	4.7	3.8				
102.0	198.0	0.0	-0.1	6.7	-2.3	-0.2	0.0	-0.3	-0.2	-1.5	1.6	-0.2	-1.5	1.6	-1.5	1.6	-0.2	-1.5	1.6	-1.5	1.6	-0.4	-2.8	6.9	4.5				
104.0	203.8	0.0	-0.1	9.5	-3.3	0.2	-0.1	-0.4	0.0	-2.3	3.0	0.0	-2.3	3.0	-2.3	3.0	0.0	-2.3	3.0	-2.3	3.0	-4.2	-4.2	10.0	5.0				
106.0	212.9	0.1	0.0	14.1	-5.2	0.6	0.0	-0.7	0.3	-3.7	5.2	0.3	-3.7	5.2	-3.7	5.2	0.3	-3.7	5.2	-3.7	5.2	-6.7	-6.7	15.1	6.7				
108.0	226.4	0.1	0.0	20.8	-8.1	0.7	0.0	-1.5	0.5	-5.9	7.8	0.5	-5.9	7.8	-5.9	7.8	0.5	-5.9	7.8	-5.9	7.8	-10.6	-10.6	22.4	9.4				
110.0	244.1	0.1	-0.1	30.1	-12.1	0.4	-0.2	-2.5	0.7	-8.3	10.1	0.7	-8.3	10.1	-8.3	10.1	0.7	-8.3	10.1	-8.3	10.1	-15.6	-15.6	31.9	12.0				
114.0	284.8	0.2	-0.6	55.2	-20.1	-0.4	-0.2	-3.5	0.6	-10.7	10.5	0.6	-10.7	10.5	-10.7	10.5	0.6	-10.7	10.5	-10.7	10.5	-23.7	-23.7	56.3	20.9				
118.0	325.2	0.1	-0.8	75.3	-24.8	-0.5	0.7	-2.3	-0.1	-7.1	4.9	-0.1	-7.1	4.9	-7.1	4.9	-0.1	-7.1	4.9	-7.1	4.9	-26.0	-26.0	75.5	36.1				
124.0	412.5	-0.1	0.0	64.0	-31.0	-0.1	1.7	0.0	-1.2	0.4	-2.7	0.4	-2.7	0.4	-2.7	0.4	-1.2	0.4	-2.7	0.4	-2.7	0.4	-31.2	-31.2	64.1	51.0			
130.0	521.9	-0.1	0.0	26.7	-29.2	-0.1	0.2	0.1	-0.7	0.9	-1.9	0.1	-1.9	0.9	-1.9	0.9	-0.7	0.9	-1.9	0.9	-1.9	0.9	-29.3	-29.3	26.7	46.5			

Tabla 3.12: Incertidumbres en la razón de mezcla de CO₂ invertida (en %) debidas a la incertidumbre en la tasa colisional indicada para latitudes medias (ACS=60°).

z [km]	CO ₂ [ppmv]	k ₁		k ₂ ó [O]		k ₃ y k ₄		k ₉		k ₁₁		k ₁₄		TOTAL		Ruido [%]
		-20%	+25%	-50%	+50%	-20%	+20%	-15%	+20%	-30%	+50%	-30%	50%	neg	pos	
70.0	357.3	0.0	-0.0	-0.1	1.8	1.3	1.2	-1.9	-4.0	-4.0	-1.5	1.9	0.3	-5.6	2.9	0.9
72.0	357.3	0.0	-0.0	-0.1	1.8	1.3	1.0	-1.9	-4.3	-4.3	-1.5	1.9	0.3	-6.1	2.9	0.9
74.0	357.3	0.0	-0.0	-0.1	1.8	1.3	0.8	-1.9	-4.5	-4.5	-1.5	1.9	0.3	-6.4	3.0	0.9
76.0	357.3	0.0	-0.0	-0.1	1.9	1.3	0.6	-1.9	-4.8	-4.8	-1.5	2.0	0.4	-6.7	3.0	0.9
78.0	357.5	0.0	-0.0	-0.1	1.8	1.3	0.4	-1.9	-5.0	-5.0	-1.5	1.9	0.3	-7.1	2.9	0.9
80.0	357.8	0.0	-0.1	-0.1	1.7	1.3	0.3	-2.0	-5.4	-5.4	-1.5	1.6	0.3	-7.6	2.7	0.8
82.0	357.7	0.0	-0.0	-0.1	1.5	1.1	0.3	-1.8	-5.8	-5.8	-1.6	1.3	0.3	-8.2	2.3	0.7
84.0	356.5	0.0	0.0	-0.1	1.2	0.9	0.3	-1.6	-6.0	-6.1	-1.8	1.0	0.4	-8.5	1.8	0.7
86.0	353.2	-0.0	-0.0	0.0	1.0	0.6	0.3	-1.1	-5.9	-6.1	-2.0	0.7	0.4	-8.5	1.3	0.8
88.0	346.5	-0.0	0.0	0.2	0.9	0.5	0.3	-0.5	-5.3	-5.6	-2.0	0.5	0.5	-7.7	1.1	1.0
90.0	335.6	-0.0	0.0	0.5	0.9	0.6	0.3	0.2	-4.3	-4.4	-2.0	0.7	0.6	-6.1	1.3	1.3
92.0	320.0	-0.0	0.0	0.8	1.0	0.8	0.4	1.0	-2.9	-2.5	-2.0	0.9	0.8	-3.8	1.9	1.5
94.0	299.8	-0.1	0.0	1.1	1.0	1.1	0.4	1.7	-1.5	-0.2	-2.4	1.1	1.1	-2.9	2.6	1.7
96.0	275.4	-0.1	0.0	1.5	1.1	1.4	0.5	2.1	-0.5	2.3	-3.4	1.0	1.5	-3.4	4.0	1.7
98.0	247.9	-0.1	0.0	1.5	1.0	1.4	0.5	2.3	-0.2	4.8	-5.4	0.6	2.2	-5.4	6.1	1.7
100.0	218.5	-0.1	0.0	1.2	0.9	1.2	0.6	2.3	-0.6	7.1	-8.4	-0.3	3.1	-8.4	8.3	1.8
102.0	188.8	-0.2	0.1	0.2	0.7	0.8	0.6	2.2	-1.7	9.4	-12.3	-1.7	4.2	-12.6	10.6	2.0
104.0	159.9	-0.1	0.1	-1.8	0.9	0.4	0.7	2.2	-3.2	11.8	-16.5	-3.4	5.8	-17.3	13.4	2.3
106.0	133.1	-0.2	0.2	-4.4	1.2	-0.1	0.7	2.3	-4.6	14.2	-20.0	-5.2	7.2	-21.6	16.2	2.7
110.0	88.6	-0.8	0.1	-8.8	2.3	-0.5	0.1	2.7	-5.8	16.1	-21.4	-7.3	8.9	-25.0	18.7	3.0
114.0	58.7	-2.3	-0.1	-5.7	2.2	-0.9	-1.7	1.9	-4.6	11.3	-15.5	-6.6	6.5	-18.6	13.4	2.9
118.0	42.3	-3.1	-0.2	-0.4	0.4	-2.5	-2.5	1.1	-3.3	6.5	-10.9	-5.9	2.6	-13.4	7.1	8.9
124.0	33.3	-0.9	0.1	-10.6	1.7	-2.7	-0.1	1.7	-2.9	8.0	-11.7	-5.5	3.0	-17.2	8.9	10.3
130.0	28.5	0.3	0.2	-22.1	10.5	0.1	1.0	1.7	-2.3	7.6	-10.0	-2.0	4.1	-24.4	13.8	9.4
140.0	18.7	-0.1	0.2	-17.9	10.3	-0.1	0.4	1.2	-1.5	5.3	-6.9	-1.3	2.6	-19.3	12.0	8.0

Tabla 3.13: Incertidumbres en la temperatura cinética invertida (en K) debidas a la incertidumbre en la tasa colisional indicada para verano polar (ACS=60°).

z [km]	T _k [K]	k ₁		k ₂ ó [O]		k ₃ y k ₄		k ₉		k ₁₁		k ₁₄		TOTAL		Ruido [K]
		-20 %	+25 %	-50 %	+50 %	-20 %	+20 %	-15 %	+20 %	-30 %	+50 %	-30 %	50 %	neg	pos	
70.0	226.7	-0.2	0.2	0.1	0.1	0.1	0.0	5.4	0.0	0.0	0.1	0.0	0.0	-0.2	5.4	0.3
72.0	216.3	-0.4	0.5	0.1	0.1	0.2	0.0	4.2	0.1	0.0	0.1	0.1	0.0	-0.4	4.2	0.3
74.0	204.6	-0.7	0.6	0.1	-0.1	0.1	-0.1	2.7	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	-0.7	2.8	0.4
76.0	191.6	-1.0	0.9	0.0	-0.3	0.0	-0.1	1.4	-0.1	0.0	-0.1	-0.1	0.0	-1.1	1.7	0.6
78.0	178.0	-1.1	1.1	-0.1	-0.2	0.0	-0.1	0.3	0.0	0.1	-0.2	0.0	0.0	-1.1	1.1	0.9
80.0	165.0	-1.3	1.2	-0.5	0.0	-0.1	-0.2	-0.6	-0.1	0.0	-0.3	0.0	0.0	-1.6	1.2	1.3
82.0	153.6	-1.3	1.2	-1.2	0.6	-0.3	-0.2	-1.2	-0.1	0.0	-0.4	0.0	-0.1	-2.2	1.3	1.8
84.0	144.6	-1.2	1.1	-2.2	1.5	-0.3	-0.3	-1.6	-0.2	-0.1	-0.3	0.0	-0.1	-3.0	1.9	2.6
86.0	138.6	-1.0	1.0	-3.2	2.6	-0.1	-0.2	-1.5	-0.1	-0.1	-0.1	0.1	-0.1	-3.7	2.8	3.6
88.0	136.3	-0.8	0.8	-3.9	3.4	0.0	-0.3	-1.5	-0.2	-0.3	0.1	0.1	-0.2	-4.3	3.5	4.5
90.0	138.2	-0.7	0.6	-3.8	3.6	0.1	-0.3	-1.4	-0.2	-0.5	0.4	0.1	-0.4	-4.2	3.7	4.9
92.0	144.7	-0.6	0.4	-2.3	3.1	0.2	-0.2	-1.3	-0.2	-0.7	0.6	0.1	-0.5	-2.8	3.2	5.1
94.0	156.0	-0.4	0.3	0.8	1.8	0.2	-0.2	-1.1	-0.1	-1.0	0.9	0.0	-0.5	-1.6	2.0	5.3
96.0	171.6	-0.3	0.2	5.6	-0.3	0.3	-0.2	-0.8	0.1	-1.2	1.5	0.2	-0.6	-1.6	5.8	5.9
98.0	190.7	-0.2	0.1	11.6	-3.1	0.3	-0.2	-0.7	0.3	-1.7	2.5	0.4	-0.7	-3.7	11.9	6.6
100.0	211.9	-0.1	0.2	19.0	-6.0	0.4	-0.2	-0.7	0.7	-2.5	4.2	1.2	-1.1	-6.6	19.5	6.7
102.0	234.1	-0.2	0.3	28.2	-9.1	0.4	-0.4	-1.4	1.4	-4.1	6.5	2.4	-2.2	-10.3	29.1	6.4
104.0	256.0	-0.3	0.6	40.2	-11.9	0.5	-0.4	-2.8	2.4	-6.1	9.0	4.1	-3.6	-14.1	41.5	7.4
106.0	276.8	-0.4	0.7	56.0	-15.2	0.7	-0.6	-5.0	3.5	-8.2	11.1	5.8	-5.4	-18.8	57.5	10.9
108.0	295.4	-0.7	0.7	74.9	-19.6	0.8	-0.6	-7.2	4.5	-9.7	12.1	7.1	-6.8	-24.0	76.3	15.6
110.0	310.8	-0.8	0.5	94.6	-25.4	0.9	-0.6	-8.4	5.0	-9.8	11.4	7.5	-7.4	-29.5	95.7	19.5
114.0	333.0	-0.3	-0.7	118.4	-39.7	1.0	-0.2	-3.9	3.9	-5.3	5.4	4.9	-4.6	-40.5	118.7	28.3
118.0	362.8	2.3	-2.1	98.8	-44.3	0.4	0.2	4.9	1.0	1.1	-2.2	0.2	0.2	-44.4	99.0	55.1
124.0	473.9	8.9	-2.6	19.4	-10.3	-0.1	0.3	1.9	-0.9	3.5	-5.0	-2.3	2.4	-12.0	21.8	91.4
130.0	611.4	11.9	-2.2	-25.6	27.7	0.0	0.1	-4.1	-0.6	1.7	-2.9	-1.4	1.1	-26.2	30.2	83.2

Tabla 3.14: Incertidumbres en la razón de mezcla de CO₂ invertida (en %) debidas a la incertidumbre en la tasa colisional indicada para verano polar (ACS=60°).

z [km]	CO ₂ [ppmv]	k ₁		k ₂ ó [O]		k ₃ y k ₄		k ₉		k ₁₁		k ₁₄		TOTAL		Ruido [%]
		-20%	+25%	-50%	+50%	-20%	+20%	-15%	+20%	-30%	+50%	-30%	50%	neg	pos	
70.0	352.0	0.1	2.8	-0.0	3.0	2.7	0.1	-1.5	0.2	0.1	2.5	0.0	0.1	-1.5	5.5	1.0
72.0	352.0	0.1	2.8	-0.0	3.0	2.7	0.1	-1.5	0.2	0.1	2.5	0.0	0.1	-1.5	5.5	1.0
74.0	351.9	0.1	2.8	-0.0	3.0	2.7	0.1	-1.5	0.2	0.1	2.5	0.0	0.1	-1.5	5.6	1.0
76.0	352.0	0.1	2.9	-0.0	3.0	2.7	0.1	-1.5	0.2	0.1	2.5	0.0	0.1	-1.5	5.6	1.0
78.0	352.2	0.0	2.9	-0.0	3.1	2.8	0.1	-1.4	0.1	0.1	2.5	0.0	0.1	-1.4	5.7	1.0
80.0	352.5	0.0	2.9	-0.0	3.1	2.8	0.1	-1.4	0.2	0.1	2.5	0.0	0.1	-1.4	5.6	1.0
82.0	352.4	0.1	2.6	-0.1	2.8	2.7	0.2	-1.5	0.3	0.2	2.4	0.0	0.2	-1.5	5.3	0.9
84.0	351.0	0.4	1.9	-0.1	2.2	2.4	0.3	-1.7	0.5	0.3	2.1	0.0	0.3	-1.7	4.3	0.8
86.0	347.1	0.8	0.8	-0.1	1.2	1.8	0.5	-2.0	0.8	0.5	1.5	0.0	0.4	-2.0	2.9	0.9
88.0	339.5	1.3	-0.4	-0.1	-0.1	1.0	0.6	-2.4	1.1	0.7	0.7	0.0	0.5	-2.4	2.2	1.2
90.0	327.6	1.8	-1.5	0.1	-1.6	0.2	0.7	-2.6	1.2	1.0	-0.3	-0.1	0.5	-3.4	2.5	1.8
92.0	311.5	2.2	-2.3	0.4	-3.2	-0.4	0.7	-2.5	1.0	1.5	-1.7	-0.4	0.7	-5.0	3.0	2.6
94.0	291.4	2.6	-2.8	0.8	-4.8	-0.9	0.8	-1.9	0.4	2.8	-3.5	-0.8	1.1	-7.0	4.2	3.7
96.0	268.0	3.0	-3.1	1.4	-6.5	-1.0	1.0	-0.9	-0.4	5.1	-6.0	-1.7	2.0	-9.6	6.5	5.0
98.0	242.0	3.3	-3.4	1.9	-8.1	-1.2	1.2	0.3	-1.4	8.6	-9.3	-2.9	3.3	-13.2	10.0	6.4
100.0	214.0	3.7	-3.6	2.0	-9.7	-1.4	1.5	1.6	-2.6	12.8	-13.1	-4.5	5.2	-17.5	14.6	8.0
102.0	184.8	4.1	-4.0	1.4	-10.8	-1.5	1.7	2.7	-3.7	17.1	-16.9	-6.3	7.4	-21.8	19.4	9.6
104.0	155.6	4.4	-4.2	-0.1	-11.4	-1.5	2.0	3.5	-4.6	20.4	-19.8	-8.0	9.6	-25.0	23.3	11.1
106.0	128.1	4.7	-4.4	-2.7	-11.3	-1.5	2.1	3.7	-5.2	21.6	-21.0	-9.2	11.5	-26.5	25.3	12.1
110.0	83.1	4.6	-4.3	-10.0	-10.7	-1.0	1.9	3.3	-4.9	17.7	-17.2	-9.3	12.1	-23.2	22.2	11.6
114.0	54.9	4.0	-3.8	-16.0	-12.2	-0.8	1.6	3.5	-3.6	10.9	-11.6	-7.3	8.5	-21.7	14.9	12.1
118.0	39.9	4.2	-3.8	-21.4	-10.9	-1.0	1.6	4.7	-3.4	9.3	-11.2	-6.3	6.4	-25.5	13.0	18.5
124.0	31.7	5.1	-3.4	-30.3	11.7	-1.2	1.5	3.6	-3.1	9.1	-9.6	-5.2	6.4	-32.5	17.3	18.4
130.0	32.0	3.7	-2.2	-20.9	21.7	-0.9	0.9	-1.8	0.9	4.7	-5.7	-3.0	6.3	-22.1	23.4	19.4
140.0	24.8	3.0	-1.9	-16.2	17.0	-0.8	0.7	-1.2	1.0	3.8	-4.8	-2.5	5.5	-17.3	18.6	14.6

Tabla 3.15: Incertidumbres en la temperatura cinética invertida (en K) debidas a la incertidumbre en la tasa colisional indicada para invierno polar (ACS=80°).

z [km]	T _k [K]	k ₁		k ₂ ó [O]		k ₃ y k ₄		k ₉		k ₁₁		k ₁₄		TOTAL		Ruido [K]
		-20%	+25%	-50%	+50%	-20%	+20%	-15%	+20%	-30%	+50%	-30%	50%	neg	pos	
70.0	238.3	0.7	-0.7	0.0	0.0	0.0	-0.1	0.1	0.0	0.0	0.0	0.1	0.0	-0.7	0.7	0.5
72.0	235.4	0.8	-0.7	0.0	0.1	0.1	0.0	0.1	0.1	0.1	0.0	0.1	0.0	-0.7	0.8	0.5
74.0	233.4	0.9	-0.8	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	-0.8	0.9	0.4
76.0	232.1	1.1	-0.9	0.1	0.0	0.0	0.1	0.1	0.0	0.1	0.0	0.0	0.1	-0.9	1.1	0.4
78.0	231.5	1.1	-1.0	0.3	-0.2	0.0	0.0	0.0	-0.4	0.0	-0.1	0.0	0.1	-1.1	1.1	0.5
80.0	231.1	1.1	-0.9	0.8	-0.4	0.0	0.0	0.0	-0.6	0.0	-0.1	0.1	0.2	-1.2	1.4	0.6
82.0	230.7	0.9	-0.8	1.3	-0.8	0.0	-0.1	0.0	-0.8	-0.1	-0.1	0.0	0.1	-1.4	1.6	0.7
84.0	229.6	0.6	-0.7	2.1	-1.3	-0.1	-0.1	0.0	-1.0	-0.1	-0.2	0.1	0.1	-1.8	2.2	0.7
86.0	227.3	0.3	-0.5	2.8	-1.6	0.0	-0.1	0.0	-0.9	-0.1	-0.2	0.0	0.0	-1.9	2.8	0.9
88.0	223.6	0.1	-0.2	3.3	-1.7	0.0	-0.1	0.0	-0.8	-0.1	-0.2	0.1	0.0	-1.9	3.3	1.0
90.0	218.7	-0.1	0.1	3.6	-1.6	0.0	0.0	0.0	-0.4	-0.1	-0.1	0.0	0.1	-1.7	3.6	1.2
92.0	213.4	-0.1	0.3	3.6	-1.3	0.0	0.0	0.0	-0.1	0.0	0.1	0.0	0.1	-1.3	3.6	1.4
94.0	208.7	0.0	0.4	3.5	-1.1	0.0	0.1	0.0	0.2	0.1	0.1	0.0	0.1	-1.1	3.5	1.6
96.0	205.5	0.1	0.3	3.4	-1.0	0.0	0.2	0.0	0.3	0.2	0.0	0.2	0.0	-1.0	3.4	1.8
98.0	204.3	0.3	0.3	3.7	-1.1	0.0	0.2	0.0	0.5	0.3	0.0	0.3	0.1	-1.1	3.8	2.4
100.0	205.3	0.3	0.3	4.5	-1.4	0.0	0.3	0.0	0.4	0.3	0.0	0.4	0.1	-1.4	4.6	3.0
102.0	208.3	0.3	0.2	5.7	-2.0	0.1	0.2	0.3	0.3	0.3	-0.2	0.6	0.0	-2.0	5.8	3.2
104.0	213.0	0.1	0.0	7.8	-2.9	0.1	0.0	0.0	0.0	0.3	-0.7	1.1	0.3	-3.0	7.9	3.3
106.0	219.2	0.0	-0.1	11.3	-4.1	0.1	0.0	0.0	-0.3	0.4	-1.4	2.1	0.8	-4.4	11.5	4.0
108.0	227.2	0.0	-0.2	16.5	-5.9	0.0	-0.2	0.0	-0.8	0.7	-2.3	3.2	1.4	-6.6	16.9	5.7
110.0	237.2	0.1	-0.2	24.1	-8.3	0.1	-0.2	0.1	-1.1	1.1	-3.1	4.4	2.1	-9.2	24.6	8.2
114.0	265.9	0.6	-0.1	45.4	-15.8	0.2	-0.3	0.2	-1.5	1.7	-4.0	5.2	2.8	-16.6	45.8	14.5
118.0	310.5	0.5	0.5	67.1	-25.8	0.2	-0.2	0.2	-0.9	1.4	-2.8	3.8	2.0	-26.1	67.3	23.8
124.0	412.7	-3.3	1.0	70.3	-35.0	0.1	0.0	0.1	0.3	0.2	0.1	0.2	0.0	-35.2	70.3	40.8
130.0	511.6	-7.4	0.4	35.0	-23.7	0.0	0.0	0.0	0.2	-0.2	0.5	-0.8	-0.4	-24.8	35.0	73.2

Tabla 3.16: Incertidumbres en la razón de mezcla de CO₂ invertida (en %) debidas a la incertidumbre en la tasa colisional indicada para invierno polar (ACS=80°).

z [km]	CO ₂ [ppmv]	k ₁		k ₂ ó [O]		k ₃ y k ₄		k ₉		k ₁₁		k ₁₄		TOTAL		Ruido [%]
		-20%	+25%	-50%	+50%	-20%	+20%	-15%	+20%	-30%	+50%	-30%	50%	neg	pos	
70.0	350.9	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	2.9	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	-0.0	2.9	0.0
72.0	350.9	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	2.9	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	-0.0	2.9	0.0
74.0	350.9	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	2.9	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	-0.0	2.9	0.0
76.0	350.9	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	2.9	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	-0.0	2.9	0.0
78.0	351.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	2.9	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	-0.0	2.9	0.0
80.0	351.1	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	3.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	-0.0	3.0	0.0
82.0	351.1	0.1	0.0	0.1	0.0	0.0	0.0	3.0	0.0	0.0	0.1	0.0	0.0	-0.0	3.0	0.0
84.0	350.8	0.1	-0.0	0.0	-0.0	0.0	0.0	2.9	0.0	-0.0	0.1	0.0	-0.0	-0.1	2.9	0.0
86.0	349.3	0.1	-0.1	0.0	-0.1	0.0	-0.0	2.7	0.0	-0.1	0.1	0.0	-0.0	-0.1	2.7	0.0
88.0	345.6	0.0	-0.1	0.0	-0.0	0.0	0.0	2.4	0.0	-0.1	0.0	0.0	-0.0	-0.1	2.4	0.0
90.0	338.5	-0.2	-0.0	-0.1	-0.0	0.0	0.0	2.0	0.0	-0.1	-0.1	0.0	-0.0	-0.3	2.0	0.1
92.0	326.6	-0.5	0.1	-0.3	0.1	-0.1	0.0	1.6	0.0	0.1	-0.5	-0.0	0.0	-0.7	1.6	0.2
94.0	308.9	-0.8	0.4	-0.6	0.2	-0.1	0.0	1.2	0.0	0.3	-0.9	-0.2	0.1	-1.4	1.3	0.3
96.0	285.3	-1.2	0.7	-0.9	0.5	-0.2	0.1	1.0	-0.0	0.7	-1.5	-0.3	0.2	-2.1	1.5	0.5
98.0	257.0	-1.4	1.1	-1.3	0.7	-0.3	0.2	0.8	-0.2	1.2	-2.2	-0.6	0.5	-3.0	2.0	0.7
100.0	226.1	-1.5	1.3	-2.0	1.0	-0.3	0.2	0.8	-0.4	1.9	-3.3	-1.0	0.9	-4.3	2.8	1.0
102.0	195.0	-1.6	1.4	-3.3	1.4	-0.3	0.3	1.1	-0.9	3.1	-4.9	-1.6	1.6	-6.4	4.2	1.2
104.0	165.6	-1.7	1.4	-5.5	2.1	-0.4	0.2	1.6	-1.6	4.6	-6.9	-2.6	2.6	-9.5	6.1	1.4
106.0	138.6	-1.7	1.3	-8.4	3.2	-0.4	0.3	2.3	-2.2	6.3	-8.9	-3.7	3.9	-13.1	8.5	1.6
110.0	93.1	-1.9	1.3	-13.5	5.9	-0.5	0.3	3.1	-3.4	8.3	-11.0	-5.4	5.6	-18.6	12.0	2.2
114.0	60.9	-1.7	1.2	-11.7	5.9	-0.3	0.2	2.7	-2.9	6.3	-8.3	-4.5	4.4	-15.4	10.1	2.2
118.0	43.6	-1.4	1.1	-5.6	2.5	-0.2	0.1	1.6	-1.6	3.2	-4.8	-2.4	2.2	-8.1	5.0	4.4
124.0	34.4	-2.2	1.1	-11.2	3.5	-0.3	0.2	1.7	-1.6	3.2	-4.5	-2.0	2.1	-12.5	5.6	8.7
130.0	27.9	-2.7	0.9	-22.8	11.5	-0.3	0.2	1.7	-1.8	3.2	-4.6	-1.9	2.0	-23.5	12.3	14.2
140.0	22.0	-1.7	0.5	-18.8	10.3	-0.2	0.2	1.1	-1.3	2.0	-3.0	-1.2	1.3	-19.2	10.7	13.6

Capítulo 4

Validación de la temperatura cinética de SABER

Síntesis

SABER mide de manera ininterrumpida las emisiones del dióxido de carbono alrededor de $15 \mu\text{m}$ de las que se deriva la temperatura cinética desde la tropopausa hasta la baja termosfera. La inversión de la temperatura se realiza suponiendo condiciones de Equilibrio Termodinámico Local (ETL) por debajo de 60 km y, por encima de dicha altura, se hace uso de un modelo de inversión que considera efectos de no-ETL. Las comparaciones de los perfiles invertidos a partir de las medidas de SABER con aquellos obtenidos por otros instrumentos forman parte de la importante tarea de validación de la temperatura del primero. En este capítulo se llevan a cabo comparaciones de la temperatura cinética de SABER con las proporcionadas por seis lídares situados en distintas latitudes. Se analizan los resultados en función de la época del año y de la latitud. Asimismo se estudian los efectos sobre las comparaciones de la tasa de relajación de los estados ν_2 del CO_2 por el oxígeno atómico y la concentración de CO_2 utilizados al invertir la temperatura en no-ETL.

4.1. Introducción

La temperatura cinética juega un papel muy importante en el comportamiento de la atmósfera terrestre. Es de gran interés disponer de medidas realizadas por instrumentos a bordo de satélites ya que tienen una cobertura espacial y temporal no igualada por ningún otro tipo de instrumento.

El instrumento SABER (a bordo del satélite TIMED), tras la inversión de sus medidas de la emisión del CO_2 alrededor de $15 \mu\text{m}$, proporciona perfiles de presión y temperatura atmosféricas ($p\text{-}T_k$) desde 20 km hasta 105 km de manera ininterrumpida desde su lanzamiento a finales del año 2001. SABER orbita la Tierra unas 15 veces al día produciendo más de 1500 perfiles de $p\text{-}T_k$ tanto de día como de noche con una cobertura latitudinal casi global. Estos perfiles son necesarios no sólo para conocer con precisión la estructura

térmica de la atmósfera terrestre, sino para derivar el resto de productos de SABER y para estudiar el balance energético, la respuesta a la radiación solar y la dinámica de la mesosfera y baja termosfera (región MBT).

Una de las tareas más relevantes previas a estos estudios consiste en la validación de las medidas de temperatura mediante comparaciones con otros instrumentos. Teniendo en cuenta que las emisiones en $15 \mu\text{m}$ están afectadas por procesos de no-Equilibrio Termodinámico Local (no-ETL) en la región MBT, los perfiles de temperatura se generan haciendo uso de un modelo de inversión que considera este tipo de procesos. Por tanto, es necesario verificar que las temperaturas cinéticas derivadas de SABER, haciendo uso de dicho algoritmo, son precisas.

En este contexto, ciertos lídares constituyen un apoyo indispensable ya que miden la temperatura atmosférica de manera precisa, durante largos periodos de tiempo y con cobertura en la media y alta atmósfera. Estos instrumentos activos¹ realizan medidas en la vertical del sitio donde están instalados. Para comparar la temperatura de SABER y la de un lidar de forma correcta, ambos perfiles deben corresponder a medidas realizadas simultáneamente y en el mismo lugar. Teniendo en cuenta que los lídares están situados en una latitud y longitud fijas, hay que determinar cuándo SABER mide sobre la localización del lidar. En definitiva, utilizando el criterio de coincidencia temporal y espacial que se considere adecuado, se identifican las medidas coincidentes de ambos instrumentos tanto en latitud y longitud como en el tiempo.

Uno de los inconvenientes de los lídares es que sus medidas se realizan generalmente bajo condiciones nocturnas por lo que las comparaciones, en la mayor parte de los casos, están limitadas a este periodo del día y sólo si el cielo está despejado. Debido a que las emisiones alrededor de $4.3 \mu\text{m}$ en la región MBT durante la noche no se entienden del todo en la actualidad (ver Capítulo 5), el modelo de inversión de abundancia de dióxido de carbono bajo condiciones nocturnas no ha sido aún aplicado de forma operacional. La inversión de los perfiles de temperatura nocturna en no-ETL de SABER se realiza actualmente haciendo uso de las medidas únicamente en $15 \mu\text{m}$ y no se invierte simultáneamente el CO_2 sino que se utilizan perfiles de modelos climatológicos.

En este trabajo se han comparado los perfiles de temperatura cinética de SABER con los perfiles obtenidos por seis lídares diferentes. En la Sección 4.2 se describen las medidas de temperatura y las características de la estructura térmica de la atmósfera detectadas por el instrumento SABER. En la Sección 4.3 se detallan las características de los lídares con los que se han realizado las comparaciones. En la Sección 4.4 se muestran los resultados obtenidos. Se finaliza el capítulo con un resumen y una discusión.

¹Un instrumento de sondeo remoto activo es aquel que realiza sus medidas utilizando fuentes artificiales que emiten radiación dirigida hacia el punto de interés y recogen la señal de retorno (más información en el Capítulo 1).

4.2. Medidas de T_k de SABER

Con el objetivo de derivar la temperatura cinética de la atmósfera, tres de los diez canales de SABER fueron diseñados para medir las emisiones del CO_2 alrededor de $15 \mu\text{m}$. Dos de ellos son los denominados canales anchos ($\text{CO}_2\text{-W}$ o canales 2 y 3), que miden en los intervalos espectrales $568\text{-}811 \text{ cm}^{-1}$ y $567\text{-}807 \text{ cm}^{-1}$ respectivamente y son canales redundantes. El tercero es el denominado canal estrecho ($\text{CO}_2\text{-N}$ o canal 1) y mide en el intervalo $606\text{-}714 \text{ cm}^{-1}$. Todos ellos son sensibles a las emisiones de los estados vibracionales ν_2 del CO_2 (o estados en $15 \mu\text{m}$) aunque el canal estrecho es sobre todo sensible a las emisiones de la banda fundamental del isótopo 626 del CO_2 . Estas emisiones son función de la población de dichos niveles vibracionales.

Mediante la técnica ‘dos colores’ descrita en la Sección 2.4.2, se utilizan las medidas en los canales 1 y 3 para registrar la presión y la temperatura cinética en una altura origen y para producir los perfiles invertidos suponiendo que los estados $\text{CO}_2(\nu_2)$ se pueblan bajo condiciones de ETL. Por encima de $65\text{-}70 \text{ km}$ algunos de estos niveles vibracionales empiezan a apartarse del ETL haciéndose necesaria la utilización del código de inversión en no-ETL descrito en la Sección 2.4.2.

Este código consta de dos bucles principales. En el bucle externo se calculan las temperaturas vibracionales de los estados vibracionales del CO_2 . El perfil de temperatura en ETL se utiliza como entrada inicial (*initial guess*) del código para realizar el cálculo en la primera iteración. En cada nueva iteración se reconstruye la atmósfera hidrostáticamente y se calculan las T_v utilizando la T_k obtenida en la iteración anterior. En el bucle interno se calcula la temperatura para cada altura tangente utilizando el método iterativo de Levenverg-Marquardt mediante la técnica de deshojado de cebolla (*onion peeling*). La temperatura invertida en ETL se utiliza como *a priori* a lo largo de todo el proceso de inversión de T_k en no-ETL. Se finaliza el bucle interno cuando se reproducen las radiancias en el limbo medidas por SABER en cada altura tangente dentro de un criterio de convergencia función de la relación señal-ruido, en concreto, cuando la diferencia entre la radiancia medida y la simulada es menor que el error estimado en la solución. El bucle principal o bucle externo se detiene cuando la diferencia entre las temperaturas del último perfil invertido y el inmediatamente anterior es menor que los errores esperados de la solución a lo largo de todo el perfil.

Teniendo en cuenta que los niveles vibracionales $\text{CO}_2(\nu_2)$ están siempre en ETL por debajo de 60 km , el perfil de temperatura cinética se genera enlazando la temperatura invertida en ETL por debajo de esa altura con la temperatura invertida en no-ETL para alturas superiores.

Utilizando este método, SABER produce aproximadamente 1500 perfiles de temperatura cinética atmosférica al día desde 20 hasta 105 km de altura. Por encima de esta altura, las emisiones en $15 \mu\text{m}$ apenas contienen información de la T_k local ya que los

niveles vibracionales están muy separados del ETL (ver Figura 3.8). Los perfiles de temperatura invertidos corresponden a condiciones tanto diurnas como nocturnas, aunque para derivar los primeros se invierte la abundancia de dióxido de carbono simultáneamente de las medidas en $4.3 \mu\text{m}$ mientras que para derivar los segundos se utilizan perfiles de CO_2 obtenidos de modelos climatológicos. La cobertura latitudinal se alterna cada 2 meses entre 83°N - 52°S y 52°N - 83°S por lo que el instrumento no observa las dos regiones polares simultáneamente. En definitiva, SABER proporciona un conjunto sin precedentes de la distribución atmosférica de presión y temperatura.

En la Figura 4.1 se muestra un mapa de la temperatura cinética en función de la latitud y la altura para perfiles correspondientes a la mitad de dos órbitas de SABER en equinoccio y solsticio (días 3 de Marzo y 2 de Julio de 2002, respectivamente). Se observa la estructura térmica típica de la media-alta atmósfera terrestre con la estratopausa situada alrededor de 50 km y la mesopausa entre 80 y 100 km (en función de la latitud y la época del año). En general las condiciones de solsticio presentan las temperaturas más extremas con valores máximos y mínimos generalmente localizados en las regiones polares. Mientras que en el equinoccio la temperatura de la estratopausa está entre 250 y 270 K, en el solsticio varía entre 240 K y los 290 K alcanzados en el verano polar. Las temperaturas mínimas de esta región, aunque no mostradas en las figuras², corresponden a condiciones de invierno polar y pueden ser de 240 K. La temperatura de la mesopausa varía entre 150 y 205 K durante el equinoccio mientras que en solsticio está entre 110 K, correspondiente a la fría mesopausa del verano polar, y 190 K. Hay que hacer notar que en invierno polar la temperatura de la mesopausa puede alcanzar los 220 K.

Estos gráficos reflejan cómo la altura de la mesopausa varía en función de la época del año y de la latitud. En el equinoccio se localiza entre 90 y 100 km y en el solsticio entre 80 y 105 km encontrándose a alturas más bajas durante el verano polar. Otros rasgos que se aprecian son las capas de inversión en la mesosfera en las que la temperatura aumenta a medida que se asciende en altura volviendo a disminuir unos pocos kilómetros por encima. Ejemplos de este tipo se observan en las figuras en la alta mesosfera entre 0° y 5°S en el caso de equinoccio y para latitudes superiores a 40°S en el de solsticio.

²Durante el 2 de Julio de 2002 la cobertura latitudinal de SABER era 83°N - 52°S por lo que el instrumento no realizó medidas en altas latitudes del hemisferio sur (hemisferio de invierno).

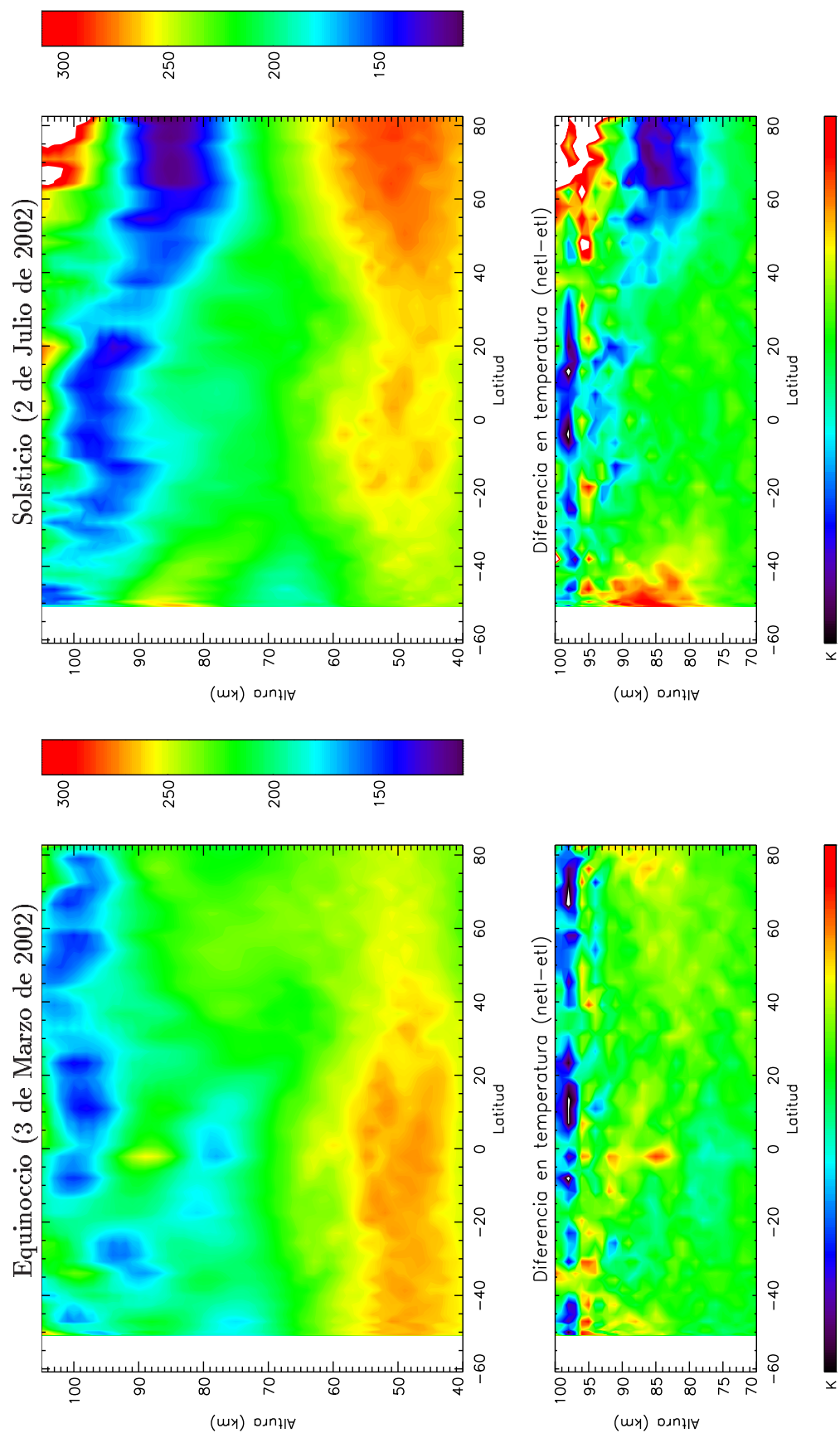


Figura 4.1: Paneles superiores: Mapas de temperatura cinética de SABER en condiciones de equinoccio (mitad de la órbita 1264 del 3 de Marzo de 2002; izda.) y de solsticio (mitad de la órbita 3046 del 2 de Julio de 2002; dcha.). Paneles inferiores: Diferencias entre la temperatura invertidas suponiendo no-ETL y ETL correspondientes a los paneles superiores para alturas comprendidas entre 70 y 100 km.

Aunque el origen de estas capas de inversión no es del todo conocido, se piensa que se generan mediante procesos dinámicos, como la disipación de ondas de gravedad y su interacción con las mareas (*Liu y Hagan, 1998*), y al calentamiento químico, probablemente debido a la reacción exotérmica entre el ozono y el hidrógeno atómico (*Meriwether y Mlynczak, 1995*).

En los paneles inferiores de la Figura 4.1 se representa la diferencia entre la temperatura obtenida considerando no-ETL y la que se obtendría considerando ETL desde 70 hasta 100 km. Los errores cometidos en la alta mesosfera si la temperatura cinética se invierte suponiendo ETL pueden ser de hasta 25 K en condiciones de equinoccio. En el caso de solsticio se llega a sobreestimar la T_k en más de 60 K en el verano polar. En la baja termosfera los errores pueden ser mayores de 50 K. Se muestra con esto la gran importancia de considerar efectos de no-ETL a la hora de invertir la temperatura cinética de la mesosfera y baja termosfera terrestres.

En la Figura 4.2 se muestra el perfil número 53 de la órbita 1264 del 3 de Marzo de 2002 (latitud=2.6°S; ACS=71.1°) de la temperatura invertida en condiciones de no-ETL junto a las temperaturas vibracionales de los estados del CO₂ responsables de las emisiones en

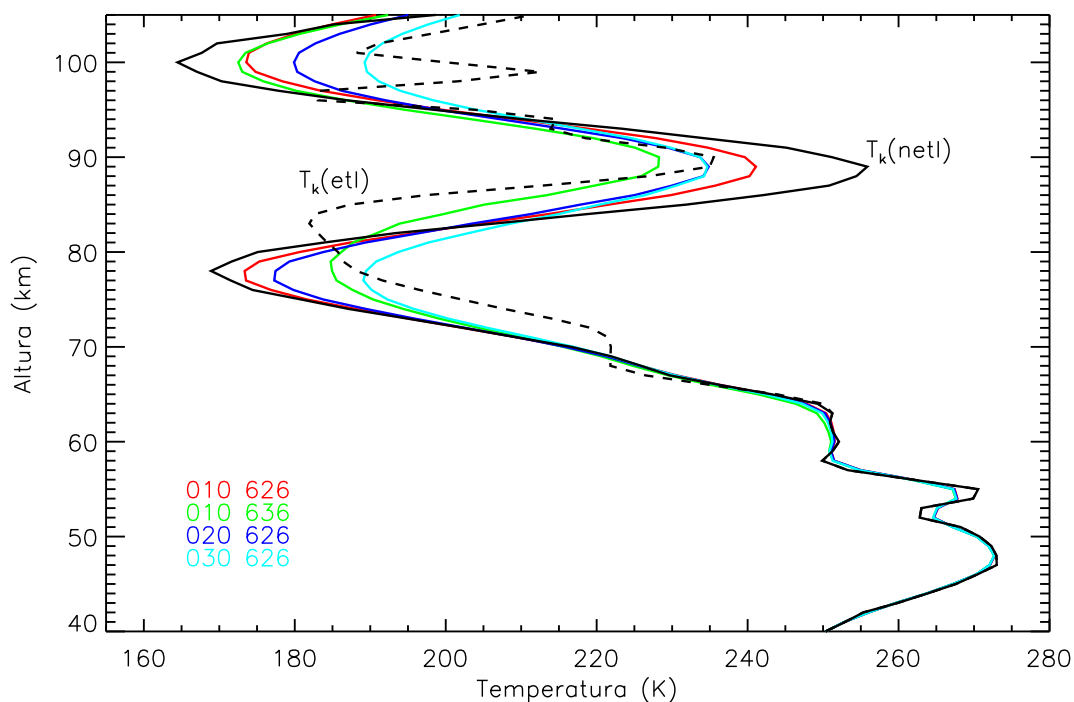


Figura 4.2: Temperatura cinética invertida para el perfil 53 de la órbita 1264 del 3 de Marzo de 2002 (latitud=2.6°S; ACS=71.1°) considerando no-ETL (línea continua), ETL (línea discontinua) y temperaturas vibracionales de los principales niveles CO₂(ν_2) de los isótopos 626 (rojo: 01¹0; azul: grupo 020; celeste: grupo 030) y 636 (verde: 01¹0) responsables de las emisiones en 15 μm .

15 μm (niveles ν_2) y a la temperatura invertida considerando ETL. Se ha seleccionado un caso en el que hay presencia de una capa de inversión alrededor de 90 km. Por debajo de 70 km, todos los estados $\text{CO}_2(\nu_2)$ están en ETL. A partir de esta altura, el grupo 020 (niveles 02⁰0, 02²0 y 10⁰0) y el nivel 01¹0 del isótopo 636 empiezan a alejarse de dichas condiciones. Por encima de 75 km también el estado 01¹0 del isótopo principal está en no-ETL.

Si fuera un único nivel vibracional el responsable de las emisiones, la radiancia medida dependería de la población de ese nivel y un cierto perfil de temperatura vibracional sería capaz de reproducir dicha radiancia (supuesto un ruido instrumental muy pequeño). En el proceso de inversión de T_k se busca el perfil de temperatura cinética que genere esa población. En el caso de ETL, dicho perfil coincide con la T_v del nivel. Por tanto el perfil de T_k derivado en no-ETL tendría que generar una T_v del nivel igual a la T_k invertida en ETL. En definitiva, la inversión en no-ETL consiste en buscar la temperatura cinética a partir de la cual se generan temperaturas vibracionales de los estados responsables de las emisiones iguales a la T_k invertida en ETL.

En el caso de la radiancia de SABER en 15 μm son varios los niveles involucrados por lo que la temperatura cinética invertida dependerá de la T_v de los niveles responsables de las emisiones a cada altura. En la Figura 3.4 de la página 66, se mostró que la banda fundamental (01¹0-00⁰0) del isótopo 626 del CO_2 es la que principalmente contribuye a la radiancia total en 15 μm en todo el intervalo de alturas excepto entre 65 y 90 km. En esa región, más de un 50 % de la contribución proviene de la primera banda caliente de dicho isótopo y las bandas fundamentales de los isótopos minoritarios. En la Figura 4.2 se puede observar que el comportamiento de las temperaturas vibracionales en no-ETL de los niveles responsables de la emisión en cada altura es similar a la temperatura cinética invertida en ETL.

En esta misma figura se ilustra cómo, aún en latitudes medias, no es conveniente hacer la inversión de T_k en ETL en la mesosfera porque, si existen capas de inversión en esta región, se pueden cometer errores muy elevados.

En resumen, la temperatura cinética de la región MBT invertida de las medidas de SABER en 15 μm no se puede derivar de manera precisa si no es utilizando un código capaz de soportar efectos de no-ETL. Aunque, en general, esto es aplicable a medidas de la baja termosfera para cualquier latitud y a las de la mesosfera para altas latitudes, también a bajas latitudes es necesario utilizar dicho código ya que pueden existir capas de inversión, donde los efectos de no-ETL son importantes. Por estas razones, la temperatura cinética de SABER se invierte en no-ETL a todas las latitudes y en cualquier época del año por encima de 60 km.

Es necesario considerar en este punto los errores sistemáticos que acompañan a las medidas de temperatura de SABER. El error en la T_k invertida debido a errores en los parámetros espectroscópicos es menor de 0.5 K. El error radiométrico (debido a la

calibración del instrumento) es de aproximadamente 1.5%. Esto induce errores en la temperatura menores de 0.4 K. Los errores debidos al ruido del instrumento son menores de 1 K por debajo de 80 km y de 3.5 K a 100 km. Por otra parte, el error debido a los cálculos directos (con el modelo BANDPAK) son fundamentalmente debidos al tratamiento del solapamiento entre líneas espectrales. Esto afecta sobre todo por debajo de la estratopausa. El error en la radiancia simulada a 40 km es de $\sim 1\%$ lo cual produce un error en la temperatura de menos de 1 K. También hay que tener en cuenta los errores debidos al esquema de inversión en sí. Con todo, la temperatura de SABER se obtiene con una precisión $1-\sigma$ estimada de 1.5 K por debajo de 70 km, 3.5 K a 80 km y 5 K a 100 km, y con una resolución vertical de unos 2 km.

4.3. Medidas de T_k desde tierra: LÍDARES

Un LIDAR (LIght Detection And Ranging) es un instrumento que utiliza el mismo principio que un rádar. El lidar emite un haz colimado de luz (radiación electromagnética en el visible) hacia lo que se denomina ‘blanco’ de modo que ésta interacciona con el medio cambiando sus propiedades. Parte de esta luz se refleja o dispersa hacia el lidar y puede ser medida. Mediante el análisis de dicha luz se determinan algunas propiedades del ‘blanco’ y/o del camino que ha recorrido la luz para alcanzar el ‘blanco’. La posición del ‘blanco’ se determina midiendo el tiempo que transcurre desde que se emitió la luz hasta que se vuelve a detectar una vez conocida con precisión la dirección de apuntado.

Para que un instrumento de este tipo tenga una resolución espacial y temporal y una señal suficientes como para realizar medidas de la media atmósfera, es necesario que esté equipado con láseres capaces de producir elevadas frecuencias de repetición, energía y colimación del haz de luz. También la transmitancia atmosférica en la longitud de onda de la radiación emitida debe ser elevada y el haz debe tener la propiedad de dispersarse. Por otra parte, el receptor debe ser un telescopio de gran apertura con un campo de visión muy reducido y un paso de banda estrecho.

Las comparaciones de temperatura cinética llevadas a cabo en este trabajo se han realizado con dos clases de lidars: 1) de Rayleigh; y 2) de sodio.

Un lidar de Rayleigh generalmente produce perfiles de T_k desde 30 hasta 60 km de altura. Si se utiliza un láser de alta potencia y un gran telescopio, la altura máxima de observación puede llegar a 90 km. Para obtener la temperatura se calcula en primer lugar la densidad atmosférica relativa a la altura z_i . Esto se hace considerando las propiedades de la dispersión de Rayleigh y de la relación entre el número de fotones emitidos N_0 y recibidos $N(z_i)$ por el lidar utilizando la ecuación del lidar:

$$\frac{N(z_i)}{N_0} = \frac{AK\mathcal{T}^2(z_0, z_i)}{4\pi(z_i - z_0)^2} |n_r(z_i)\beta_R|, \quad (4.1)$$

donde n_r es el número de moléculas por unidad de volumen, A es el área del telescopio, K es la eficiencia óptica del lidar, \mathcal{T} es la transmitancia atmosférica, β_R es la sección transversal de la retrodispersión de Rayleigh (constante para la mezcla de gases existente por debajo de ~ 100 km) y z_0 es la altura a la que el lidar está situado. Esta ecuación es válida en ausencia de aerosoles. La temperatura cinética en la media atmósfera se puede derivar de forma precisa a partir de estas medidas de densidad ρ suponiendo equilibrio hidrostático y aplicando la ley de los gases ideales (*Hauchecorne y Chanin, 1980*) de modo que en una capa a altura z_i y de espesor Δz :

$$T(z_i) = Mg(z_i)\Delta z \left[R \log \left(1 + \frac{\rho(z_i)g(z_i)\Delta z}{\sum_{j=i-1}^n \rho(z_j)g(z_j)\Delta z + P(z_n + \Delta z/2)} \right) \right]^{-1}, \quad (4.2)$$

donde M es el peso molecular medio del aire, g es la aceleración de la gravedad, R es la constante de los gases y $P(z_n + \Delta z/2)$ es la presión en la capa límite superior proporcionada bien por modelos o bien por medidas de otros instrumentos.

Este método no funciona a alturas muy bajas o muy altas, debido a la interferencia de aerosoles o a la atenuación de la señal, respectivamente, por lo que las medidas suelen estar confinadas entre 35 y 90 km. Para determinar la temperatura por encima de 90 km se utilizan los denominados lidares de sodio. Cuando los meteoritos atraviesan la atmósfera, depositan sodio formando una capa centrada alrededor de 90-95 km con densidades de Na de alrededor de $1.5 \times 10^3 \text{cm}^{-3}$. Los lidares de sodio utilizan un método basado en el proceso de fluorescencia láser inducida. Además, teniendo en cuenta que la dispersión resonante de los átomos de sodio es unas catorce veces más eficiente que la dispersión tipo Rayleigh, la señal proveniente de la región alrededor de la mesopausa es lo suficientemente elevada como para ser registrada por un lidar.

El espectro del sodio alrededor de 589 nm es muy sensible a la temperatura. Ésta se deriva a partir de la relación entre las señales retrodispersadas $S(\lambda_1, T)$ y $S(\lambda_2, T)$ medidas en longitudes de onda λ_1 y λ_2 correspondientes a dos líneas de la estructura hiperfina del sodio en esta región espectral (*Fricke y von Zahn, 1985*) haciendo uso de:

$$\frac{S(\lambda_1, T)}{S(\lambda_2, T)} = \frac{\sum_{n=1}^6 A_n \exp[-D(\lambda_1 - \lambda_n)^2/T]}{\sum_{n=1}^6 A_n \exp[-D(\lambda_2 - \lambda_n)^2/T]}, \quad (4.3)$$

donde D es una constante, el subíndice n corresponde a cada una de las seis líneas del multiplete, A_n son sus intensidades relativas en la estructura hiperfina y λ_n sus longitudes de onda. Estos dos últimos parámetros son conocidos.



Figura 4.3: Situación geográfica de los seis lidars de la Tabla 4.1.

En este trabajo se han comparado las temperaturas de SABER con las proporcionadas por cuatro lidars de Rayleigh y dos de sodio. Las situaciones de estos seis instrumentos se muestran en la Figura 4.3. En la Tabla 4.1 se resumen las características de los mismos incluyendo la latitud, la longitud y los intervalos de altura de observación. A continuación se describen brevemente las características de cada uno de ellos.

El lidar de Mauna Loa

Situado en el observatorio de Mauna Loa, Hawaii (EE.UU.) a 19.5°N - 156.6°W y 3400 m de altura, este lidar de Rayleigh mide perfiles de ozono, temperatura y aerosoles desde

Tabla 4.1: Características de los lidars cuyas temperaturas se han utilizado para compararlas con las de SABER.

Lugar	Latitud	Longitud	Tipo de lidar	Altura de observación	Error	
					a 60 km	a 90 km
Mauna Loa	20°N	156°W	Rayleigh	20-93 km	2 K	12 K
Table Mountain	34°N	118°W	Rayleigh	20-93 km	2 K	12 K
Maui	21°N	156°W	Sodio	80-105 km	–	5 K
Sondrestrom	67°N	51°W	Rayleigh	30-85 km	2 K	10 K
Davis	67°S	78°E	Rayleigh	20-80 km	12 K ^a	–
Fort Collins	41°N	105°W	Sodio	80-105 km	–	1 K ^b

^a3 K a 40 km y 30 K a 80 km.

^b6 K a 80 km y 105 km.

1993. Su objetivo principal es proporcionar medidas a largo plazo para la base de datos NDSC (Network for the Detection of Stratospheric Change) y a corto plazo, para inter-comparación con medidas de satélites. Está financiado por el 'Jet Propulsion Laboratory' (NASA).

El transmisor emite pulsos en una longitud de onda de 308 nm cada 5 ms con una energía de 500 mJ. El receptor es un telescopio de Cassegrain de 1 m de diámetro y con campo de visión variable aunque típicamente de 1 mrad. El paso de banda es menor de 2 nm. Este lidar proporciona perfiles de temperatura cinética entre 20 y 95 km con una resolución vertical mínima de 300 m. El error en la temperatura es de 2 K a 60 km y 12 K a 90 km (*McDermid y col.*, 1994).

El lidar de Table Mountain

El complejo de Table Mountain se encuentra en Wrightwood, California (EE.UU.), a 34.4°N-117.7°W y 2300 m de altitud. En él hay un lidar de Rayleigh, operativo desde 1988, diseñado con el fin de medir perfiles de ozono, de aerosoles y de temperatura. Al igual que el lidar anterior, está financiado por el 'Jet Propulsion Laboratory' (NASA).

El transmisor emite pulsos de longitud de onda 308 nm cada 7 ms con una energía de 500 mJ. El receptor es un telescopio de Cassegrain de 90 cm de diámetro con un campo de visión de 2 mrad con cuatro canales de ancho de banda menor que 2 nm. Este lidar proporciona perfiles de temperatura nocturnos desde 20 hasta 95 km con una resolución vertical mínima de 300 m y con un error de unos 2 K a 60 km y 12 K a 90 km. En *McDermid y col.* [1991] se encuentra una descripción detallada de este instrumento.

El lidar de Maui

Este lidar está situado desde el año 2002 en la cima de la montaña Haleakala en Maui, Hawaïi (EE.UU.), a 3050 m de altitud y a 20.7°N y 156.3°W. Fue diseñado por el laboratorio de electro-óptica de la Universidad de Illinois para derivar la temperatura, el viento y la densidad de sodio. Está dedicado a realizar medidas exclusivamente alrededor de la mesopausa.

El transmisor emite pulsos alternos cada 20 ms en las dos longitudes de onda de interés alrededor de 589 nm con una potencia de entre 1 y 2 W. La divergencia del haz es de 0.4 mrad lo cual produce un diámetro del haz de 40 m a 100 km. Este lidar está acoplado al telescopio astronómico AEOS de 3.7 m de diámetro, 1 mrad de campo de visión y canales con paso de banda de 120 MHz. Realiza medidas de temperatura entre 80 y 105 km con una elevada resolución temporal (1.5 min) y vertical (100 m) con errores menores de 5 K. Este instrumento se describe de manera más detallada en *Franke y col.* [2004].

El lidar de Sondre Stromfjörd

El sistema situado a latitud 67.0°N y longitud 50.9°W en el complejo de Sondre Stromfjörd en Kangerlussuaq (Groenlandia, Dinamarca) se llama ARCLITE (ARctic Li-dar TEchnology) y está compuesto por dos lidars. Uno de ellos, operativo desde el año 1992, es un lidar de Rayleigh/Mie diseñado para realizar estudios sobre nubes estratosféricas polares (PSC), nubes noctilucetas (NCL), temperatura, densidad y ondas de gravedad en la media atmósfera. Este instrumento está financiado por el Dpto. de Investigación Atmosférica de la 'National Science Foundation'.

El transmisor emite pulsos de 7 ns a 532 nm repetidos cada 33 ms. La divergencia del haz de luz es de 0.1 mrad. El receptor es un telescopio newtoniano de 92 cm de diámetro con dos canales con paso de banda de 0.8 Å. El campo de visión es de tan sólo 0.5 mrad. La señal recibida se procesa integrando las medidas realizadas durante un minuto. Este lidar muestrea la señal retro-dispersada elásticamente por moléculas (Rayleigh) desde 30 a 85 km. La resolución vertical es de unos 400 m y el error en la temperatura cinética varía entre unos 2 K a 60 km hasta algo menos de 10 K a 85 km (para integraciones de 1 minuto). En *Thayer y col.* [1997] se encuentra una descripción más detallada de este instrumento.

El lidar de Davis

La División Australiana de la Antártida opera el lidar situado en Davis, Antártida a 68.6°S y 78.0°E desde 1996. Fue instalado con la finalidad de proporcionar perfiles de densidad, temperatura y velocidad del viento desde la troposfera hasta la alta mesosfera para llevar a cabo estudios de dinámica, composición y clima con especial atención a procesos relacionados con ondas atmosféricas incluyendo ondas planetarias y ondas de gravedad, mareas y turbulencia, y variaciones climáticas interanuales.

Este lidar de alta resolución espectral tiene un transmisor que emite pulsos a 532 nm con una potencia de 30 W. Está acoplado a un telescopio de Cassegrain que sirve como receptor con espejo principal de 1 m de diámetro. El sistema de detección es un espectrómetro de Fabry Perot y el paso de banda puede variarse dentro del intervalo máximo que permite el instrumento. Los perfiles de temperatura se producen entre 20 y 80 km con una resolución vertical de unos 2 km. El error es de unos 3 K a 40 km y unos 30 K a 80 km. Más información sobre este lidar se encuentra en *Klekociuk y col.* [1994].

El lidar de Fort Collins

En Fort Collins, Colorado (EE.UU.), a 1570 m de altura y a 40.59°N y 105.14°W , la 'Colorado State University' (CSU) opera un lidar de sodio de banda estrecha bajo el apoyo del programa CEDAR ('Coupling, Energetics and Dynamics of Atmospheric Regions') desde 1990. El objetivo de este instrumento es medir la densidad de la capa de

sodio, la temperatura y la velocidad del viento en la región donde esta capa está situada (alrededor de 90-95 km).

El láser de este lidar emite 300 pulsos por minuto alternando en cada una de las longitudes de onda alrededor de la de la transición D_2 del sodio (589.158 nm). La potencia media de los pulsos es de 0.6 W. El receptor es un telescopio Celestron de 35 cm de diámetro. El tiempo mínimo de integración es de 2 minutos aunque usualmente se integran las medidas tomadas durante 1 hora. Este instrumento proporciona perfiles de temperatura entre 80 y 105 km con resolución vertical de de 1 km. El error varía entre 6 K en los límites inferior y superior de las medidas y menos de 1 K alrededor del pico de sodio. *She y col.* [1992] hacen una descripción más detallada de las capacidades de este lidar.

4.4. Comparaciones de la T_k en no-ETL de SABER con medidas de los lídares

Como se ha mencionado anteriormente, las medidas de los seis lídares descritos arriba, con las que se han comparado las temperaturas de SABER, se realizan durante la noche salvo contadas excepciones. Las poco frecuentes medidas diurnas corresponden a ángulos cenitales solares próximos a 90° . Por tanto, en este trabajo, se ha invertido la T_k de SABER sin realizar una inversión simultánea de la abundancia de dióxido de carbono y, en su lugar, se han utilizado perfiles de razón de mezcla tomadas de modelos climatológicos.

La temperatura cinética se ha derivado utilizando el código desarrollado conjuntamente por el 'Langley Research Center' de la NASA y el Instituto de Astrofísica de Andalucía (*Mertens y col.*, 2001) descrito en la Sección 2.4. Se han mantenido los parámetros del código del mismo modo que en el código operacional de SABER. Así, los límites inferior y superior de la atmósfera se han situado a 40 y 140 km respectivamente invirtiendo la temperatura cada 2 km aproximadamente pues, aunque SABER realiza medidas de radiancia en el limbo separadas unos 300 m en altura, su campo de visión es de unos 2 km.

Para realizar la inversión de temperatura se han utilizado los perfiles de razón de mezcla del N_2 , O_2 , O , O_3 y CO_2 del modelo climatológico TIME-GCM descrito en *Roble y Ridley* [1994] y *Roble* [2000] correspondientes a la latitud de las medidas y a la época del año en que fueron realizadas. Los perfiles de temperatura y presión de entrada del código de inversión en no-ETL (es decir, el *a priori* y el perfil inicial o *initial guess*) son los obtenidos previamente en la inversión en ETL. La versión de medidas de radiancia (es decir, los datos del nivel 1B) utilizada es la v1.02. Se ha tomado como desviación estándar del perfil *a priori* 10 K por debajo de 80 km, 40 K desde 80 hasta 100 km y 100 K por encima de 100 km. La desviación estándar de la radiancia se ha tomado igual al ruido del instrumento. Los perfiles de temperatura cinética que se han invertido (nivel 2A) corresponden a la versión v1.03.

La información *a priori*, en este caso los perfiles de temperatura cinética en ETL, representan una estimación independiente de la temperatura obtenida a partir de fuentes diferentes, es decir, es una medida 'virtual'. Un perfil de temperatura invertido \mathbf{T} se relaciona con el perfil *a priori* \mathbf{T}_a y el real \mathbf{T}_r mediante (*Rodgers*, 2000)

$$\mathbf{T} - \mathbf{T}_a = \mathbf{A}(\mathbf{T}_r - \mathbf{T}_a) + \epsilon, \quad (4.4)$$

donde \mathbf{A} es la matriz de *averaging kernels* y ϵ es el error cometido en la medida y en la inversión. La matriz de *averaging kernels* se puede entender como la función de suavizado correspondiente a cada altura del perfil real. Idealmente, coincide con la matriz unidad aunque eso no sucede usualmente. Cada fila f de esta matriz describe la resolución vertical

del parámetro invertido para la altura z_f , es decir, el intervalo de alturas del perfil real al que dicho parámetro es sensible, y la sensibilidad del resultado al *a priori*.

Para llevar a cabo una comparación adecuada de las medidas de dos instrumentos es necesario tener en cuenta sus resoluciones verticales y la información *a priori* utilizada en sus inversiones. Según *Rodgers y Connor* [2003], cuando se comparan medidas de un instrumento con otras de mayor resolución vertical se puede ignorar la influencia de las *averaging kernels* sobre estas últimas considerándolas así medidas ideales. Entonces, el perfil de temperatura real \mathbf{T}_r se puede sustituir en la Ecuación 4.4 por el perfil medido por el instrumento de mayor resolución vertical \mathbf{T}_L de modo que:

$$\mathbf{T}_s - \mathbf{T}_a = \mathbf{A}(\mathbf{T}_L - \mathbf{T}_a), \quad (4.5)$$

donde \mathbf{T}_s es en definitiva un ‘suavizado’ de \mathbf{T}_L y representa el perfil que se derivaría con el modelo inverso del instrumento de menor resolución vertical si el perfil real atmosférico coincidiera con el perfil de mayor resolución vertical. Este perfil ‘suavizado’ \mathbf{T}_s es el que se debe comparar con el perfil \mathbf{T} del instrumento de menor resolución en altura para eliminar los efectos de las diferentes resoluciones verticales.

Este método es aplicable a las comparaciones entre las medidas de temperatura en no-ETL de SABER, con resolución vertical de 2 km, y las de los lídares, con resoluciones verticales de 300-400 m. Las diferencias se han calculado mediante

$$\Delta\mathbf{T} = \mathbf{T} - \mathbf{T}_s = \mathbf{T} - \mathbf{A}(\mathbf{T}_L - \mathbf{T}_a) - \mathbf{T}_a, \quad (4.6)$$

donde \mathbf{T} , \mathbf{T}_L y \mathbf{T}_a corresponden a los perfiles de temperatura de SABER (en no-ETL), de lidar y *a priori* (en ETL) respectivamente.

Como se ha mencionado, la matriz \mathbf{A} se puede interpretar como una función de ‘suavizado’ del perfil de temperatura. Para simplificar los cálculos, en este trabajo se ha calculado \mathbf{T}_s convolucionando las medidas del lidar con un filtro paso baja gaussiano de anchura total a mitad del máximo de 2 km, es decir,

$$\mathbf{T}_s(z) = F(z) * [\mathbf{T}_L(z) - \mathbf{T}_a(z)] + \mathbf{T}_a(z), \quad (4.7)$$

donde $F(z)$ es el filtro paso baja. Hay que hacer notar que el ‘suavizado’ vertical de los perfiles de temperatura no elimina completamente los efectos de la resolución vertical pero es adecuado para campos de visión no muy anchos (*Russell y Smit*, 1998).

A continuación se muestran los resultados de las comparaciones de la temperatura cinética de SABER invertida en ETL y no-ETL para las coincidencias del año 2002 con las medidas de los seis lídares seleccionados. Por ser 100 km el límite superior de la inversión en ETL, no se realizan comparaciones con la T_k derivada en ETL por encima de esa altura. Las comparaciones con la T_k en no-ETL se realizan hasta los 105 km. Si bien se puede invertir la T_k en no-ETL hasta alturas superiores, los errores son elevados

debido al ruido del instrumento, y a las incertidumbres en los parámetros del modelo de no-ETL y en las abundancias de oxígeno atómico.

Uno de los puntos más importantes en las comparaciones es el criterio de coincidencia, es decir, la diferencia máxima en posición y tiempo entre las medidas de ambos instrumentos. El criterio debe ser elegido teniendo en cuenta la variabilidad natural del parámetro a comparar, en este caso la temperatura. La separación temporal máxima entre las medidas de los lídars y las de SABER considerada en este trabajo ha sido de 2 horas. Esto reduce significativamente los efectos de las mareas semi-diurnas tanto solares como lunares, cuyas amplitudes máximas son de 6 y 4 K respectivamente alrededor de 95 km en latitudes medias (*Forbes y Vial, 1989*).

Considerando que las temperaturas de la mesopausa terrestre varían de polo a polo en el caso más extremo (en solsticio) entre unos 130 y 240 K, se ha adoptado una separación espacial máxima entre medidas de 5° en latitud. En este sentido, se ha tomado una caja cuadrada alrededor de la localización del lídar de $5^\circ \times 5^\circ$. Esto justificaría diferencias de temperatura de hasta 3 K.

4.4.1. Mauna Loa

Se han encontrado 41 coincidencias del año 2002 entre las medidas de SABER y las del lídar situado en Mauna Loa. En la Figura 4.4 se muestran seis ejemplos típicos de comparaciones de perfiles individuales de temperatura de ambos instrumentos junto a las diferencias para distintas épocas del año. En cada gráfico se indican las diferencias en latitud, longitud y tiempo entre las medidas de SABER y del lídar así como el ángulo cenital solar (ACS), la fecha y el número de órbita y perfil de SABER. Las zonas sombreadas representan el error del lídar.

Los perfiles de temperatura de SABER por debajo de 60 km (invertida en ETL) son similares a los del lídar tanto en la forma como en la magnitud, incluso cuando la temperatura en la estratopausa es inusualmente elevada (como sucede en el caso del perfil número 7 la órbita 3520 del 2 de Agosto).

En general, los perfiles de SABER invertidos tanto en condiciones de ETL como en no-ETL reproducen adecuadamente las estructuras especialmente aquellas situadas en la alta mesosfera, como se puede observar en el perfil 9 de la órbita 1963 del 19 de Abril. Sin embargo, SABER tiende a subestimar la temperatura de los picos de estas capas de inversión (ver, por ejemplo, perfil 43 de la órbita 2792 del 14 de Junio o perfil 2 de la órbita 5149 del 20 de Noviembre). Además, en alguno de estos casos el registro de altura en la alta mesosfera de ambos instrumentos parece estar desplazado, siendo la altura de SABER mayor. Esto se puede confirmar viendo el carácter oscilatorio de las diferencias a alturas alrededor de los picos de las capas de inversión.

Este lídar está situado en latitudes medias por lo que la temperatura invertida en

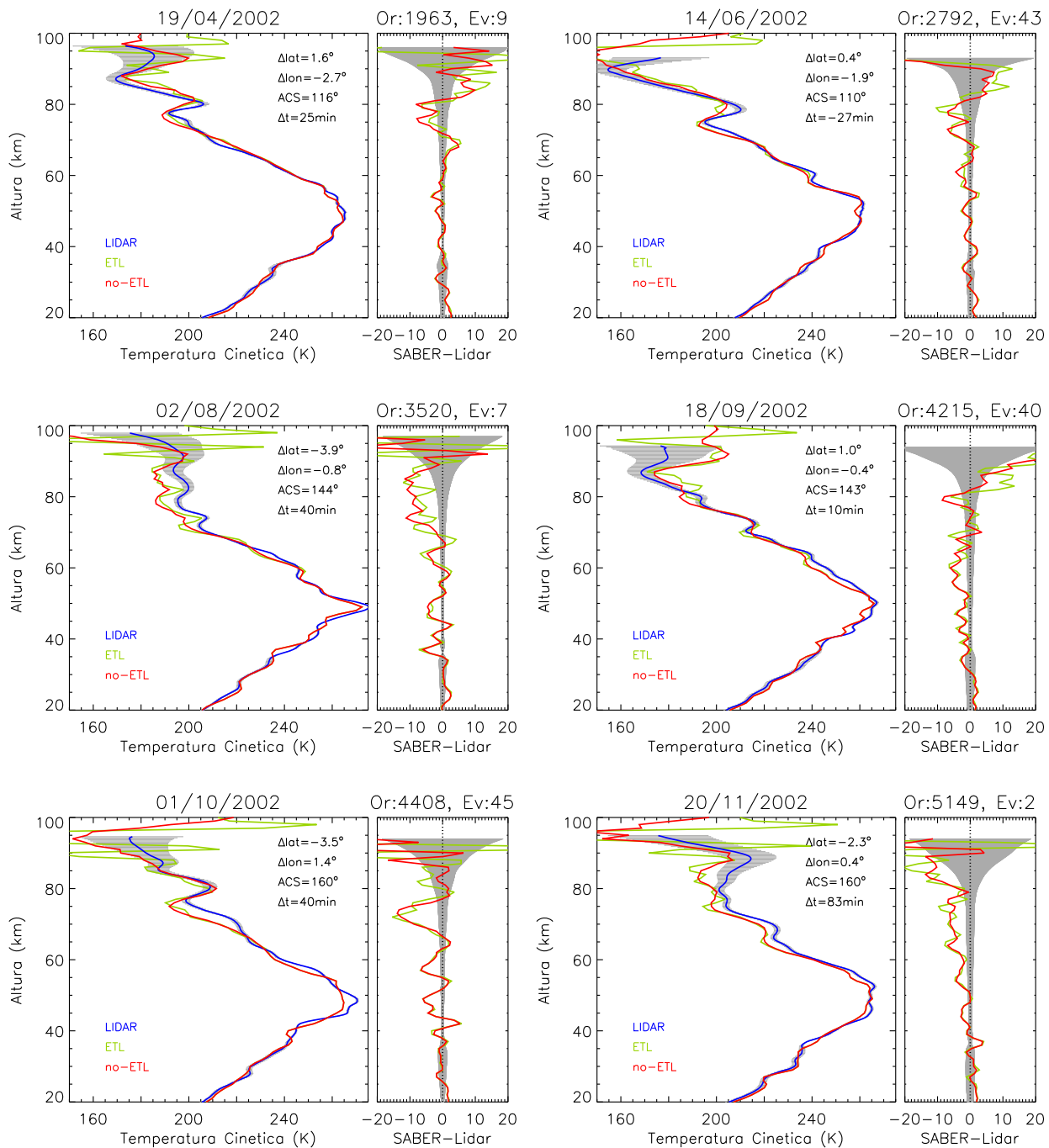
MAUNA LOA

Figura 4.4: Paneles izdos.: Temperatura cinética invertida en no-ETL (rojo) y ETL (verde) de seis perfiles de SABER coincidentes (ver criterio en texto) con medidas del lidar de MAUNA LOA (azul) para seis días del año 2002. En cada figura se indica la fecha, el n° de órbita y de perfil, el ACS de SABER y las diferencias en latitud, longitud y tiempo. Paneles dchos.: Diferencias correspondientes entre las medidas de SABER en no-ETL y ETL con las del lidar. Las zonas sombreadas representan el error en la temperatura del lidar.

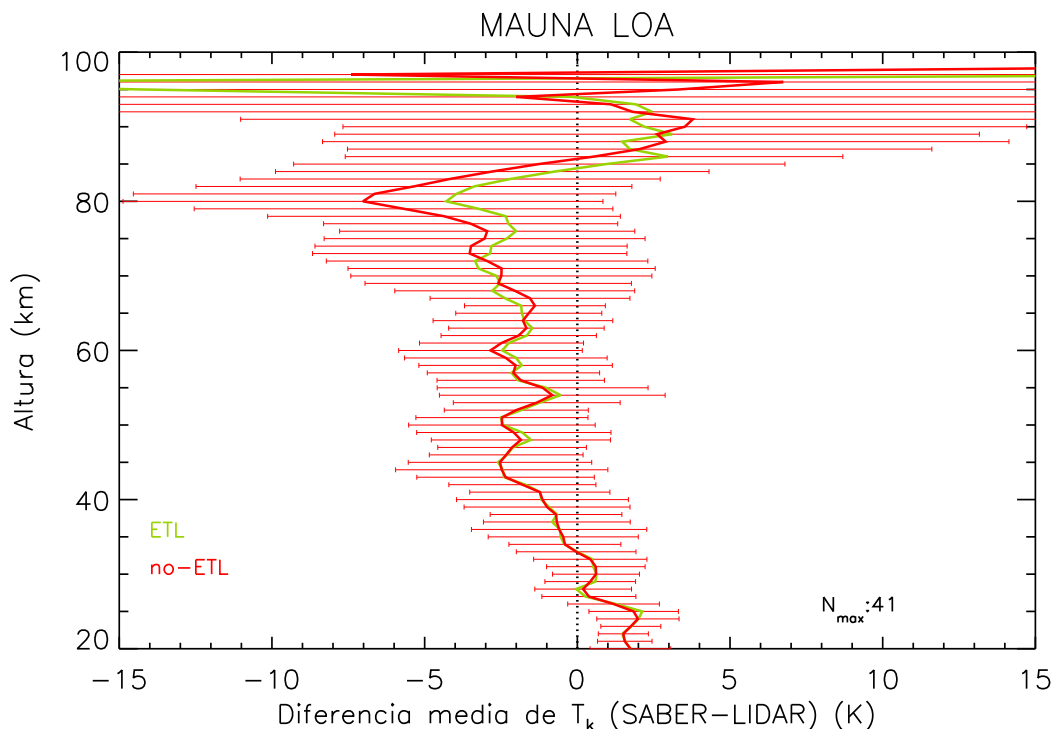


Figura 4.5: Diferencia media anual entre las temperaturas de SABER invertida en no-ETL (rojo) y ETL (verde) y las del lidar en MAUNA LOA para el año 2002 junto a la desviación estándar (barras horizontales). Se indica el n° de coincidencias.

condiciones de no-ETL no difiere mucho de la invertida en ETL por debajo de 95 km ya que los estados vibracionales en $15 \mu\text{m}$ del CO_2 se encuentran poco alejados del ETL. Luego, salvo excepciones, la temperatura en no-ETL no mejora las comparaciones aunque los perfiles parecen más realistas por presentar oscilaciones de menor amplitud (la temperatura de algunos perfiles de SABER en ETL varían en más de 100 K en 5 km alrededor de 95 km). Un ejemplo de este tipo de excepciones en la alta mesosfera se observa en el gráfico correspondiente al perfil del 2 de Agosto. En este caso, la tendencia de la temperatura del lidar a disminuir con la altura se reproduce mejor con la temperatura de SABER en no-ETL.

En la Figura 4.5 se representan las diferencias medias anuales junto a la desviación estándar de las mismas. La temperatura de SABER es entre 1–2 K mayor que la de los lidares por debajo de 35 km. Por encima de esta altura y hasta 75 km, las temperaturas de SABER son alrededor de 2.5 K más frías que las del lidar de Mauna Loa. Las diferencias aumentan hasta 7 K y 4 K a 80 km para las T_k invertidas en no-ETL y ETL respectivamente. Por encima de 85 km, si bien los errores en las medidas del lidar son elevados, SABER muestra una tendencia a sobreestimar la temperatura del lidar. La diferencia media es menor que la desviación estándar en casi todo el intervalo de alturas considerado.

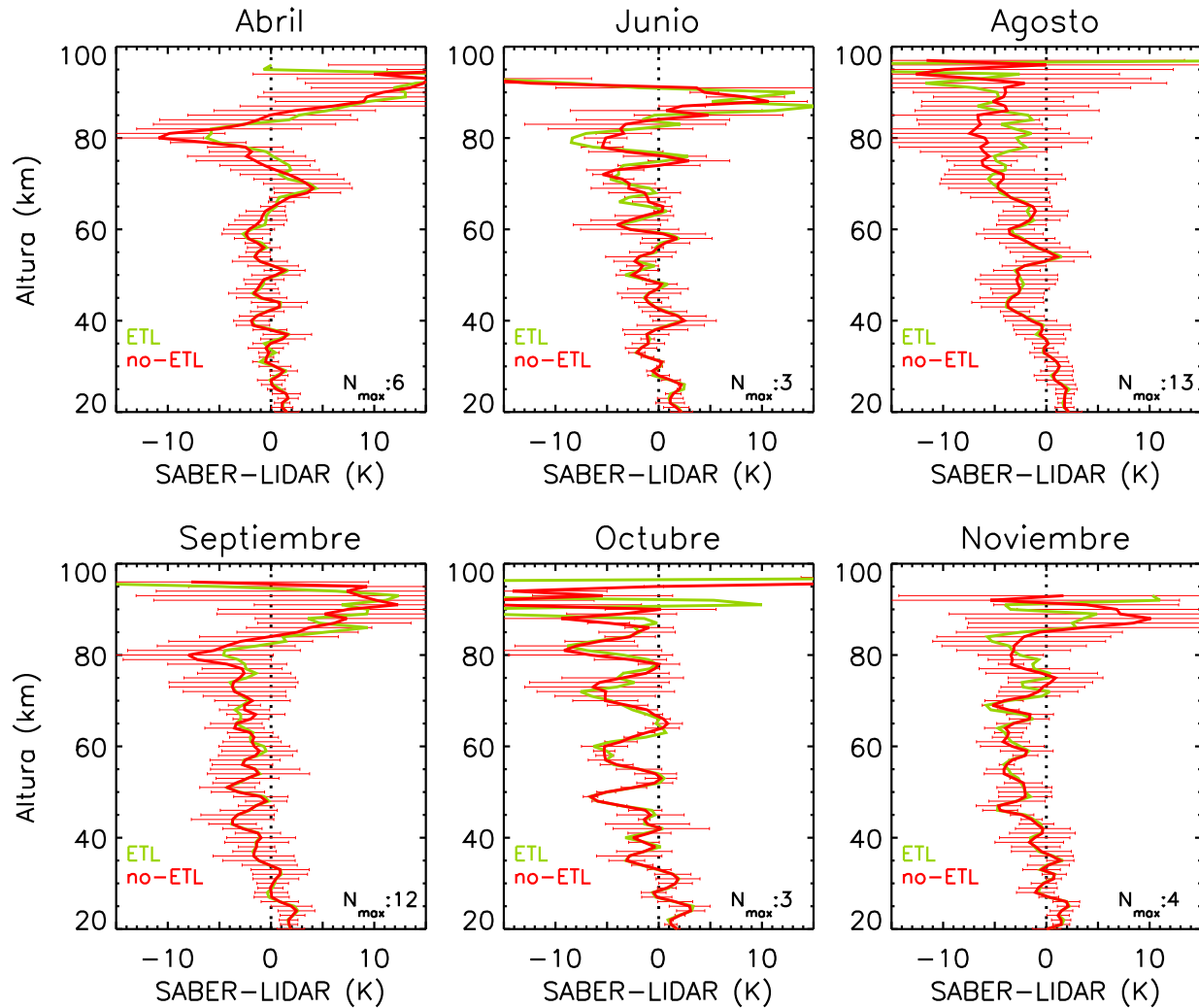


Figura 4.6: Diferencias medias entre las temperaturas de SABER derivadas en no-ETL (rojo) y ETL (verde) y las del l idar en MAUNA LOA para los meses del a o 2002 junto a la desviaci n est ndar (barras horizontales). Se indica el n  de coincidencias en cada mes.

La dependencia de las medias con la  poca del a o se representa en la Figura 4.6 en la que se muestran las diferencias medias para cada uno de los meses en los que se han encontrado coincidencias. El comportamiento de las diferencias es similar a lo largo del a o, presentando, en general, las mismas caracter sticas que las mencionadas para la media anual.

4.4.2. Table Mountain

La Figura 4.7 muestra seis coincidencias t picas de las 47 encontradas entre las medidas de temperatura de SABER y del l idar situado en Table Mountain sucedidas en el a o 2002. Tambi n se indican la fecha, las separaciones espaciales y temporales de las medidas de

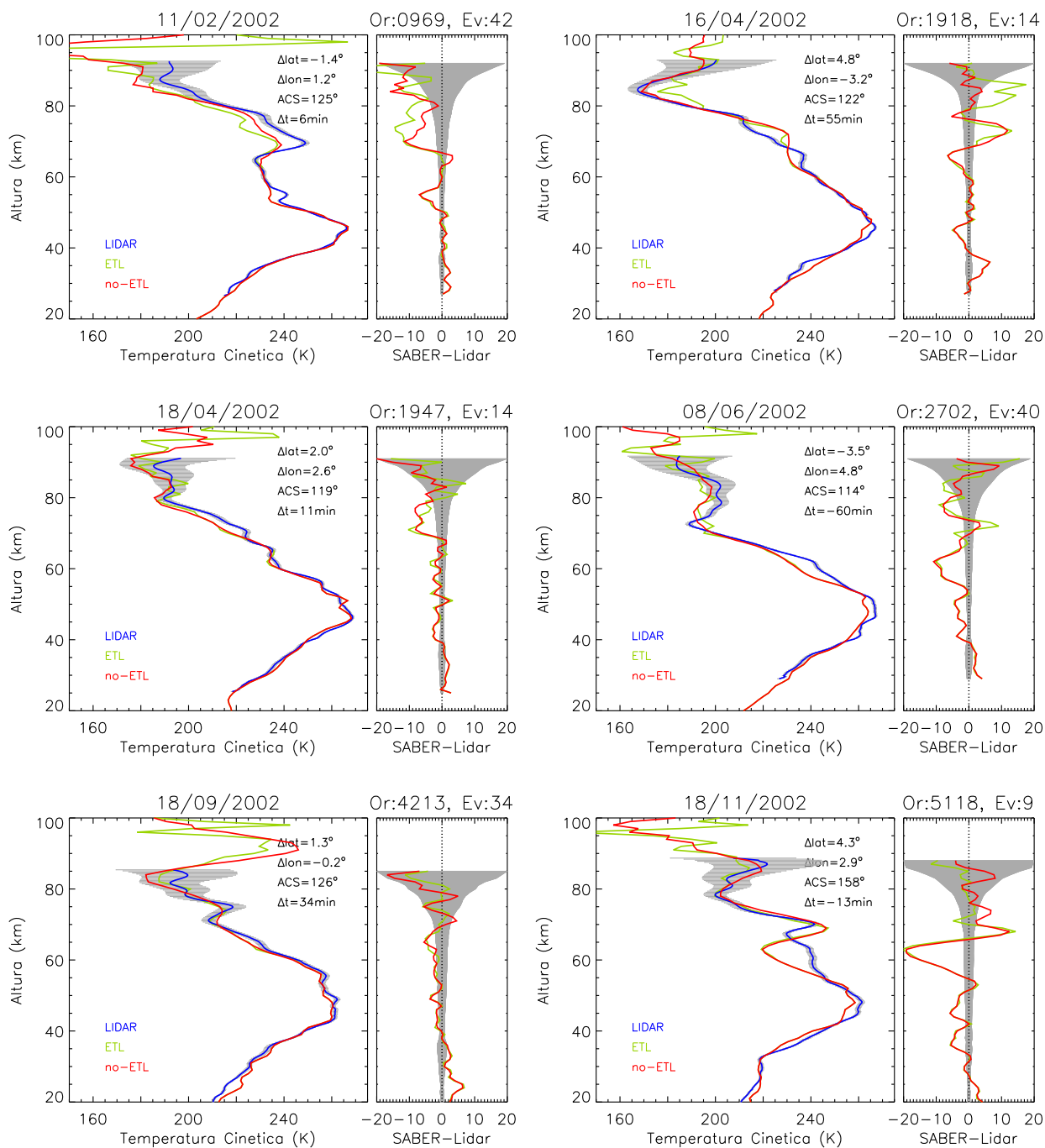
TABLE MOUNTAIN

Figura 4.7: Paneles izdos.: Temperatura cinética derivada en no-ETL (rojo) y ETL (verde) de seis perfiles de SABER coincidentes (ver criterio en texto) con medidas del lidar de TABLE MOUNTAIN (azul) para seis días del año 2002. En cada figura se indica la fecha, el n° de órbita y de perfil y el ACS de SABER, y las diferencias en latitud, longitud y tiempo. Paneles dchos.: Diferencias correspondientes entre las medidas de SABER en no-ETL y ETL con las del lidar.

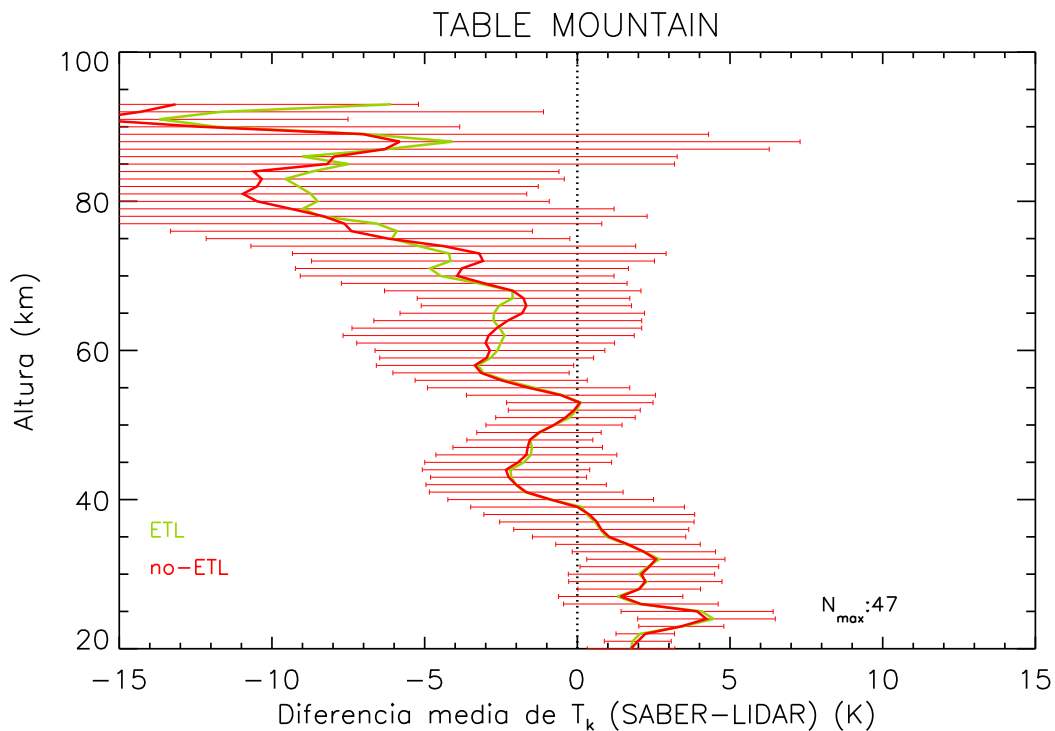


Figura 4.8: Diferencia media anual entre las temperaturas de SABER en no-ETL (rojo) y ETL (verde) y las del lidar en TABLE MOUNTAIN para el año 2002 junto a la desviación estándar (barras horizontales). Se indica el n° de coincidencias.

ambos instrumentos, el ACS y el número de perfil y órbita de SABER.

SABER reproduce la estructura térmica mostrada por las medidas del lidar de forma adecuada. La estratopausa y la mesopausa en ambos instrumentos están localizadas a alturas similares, como se puede ver en el perfil del 16 de Abril. En ese mismo gráfico se observa cómo la inversión en no-ETL corrige la temperatura de la mesopausa. Ésta es menor que la correspondiente a la inversión en ETL. Esto se debe a que, en perfiles como este, la temperatura vibracional de los estados responsables de la emisión en $15 \mu\text{m}$ es mayor que la temperatura cinética de modo que, si se considera ETL se sobreestima la temperatura.

La temperatura derivada incluyendo el no-ETL suele reproducir las temperaturas máximas de las capas de inversión de la alta mesosfera mejor que la invertida en ETL como ocurre alrededor de 85 km en el caso mostrado del 18 de Noviembre. Aquí las temperaturas vibracionales son menores que la cinética porque las colisiones no son capaces de mantener los niveles vibracionales poblados a la elevada temperatura cinética. Por esto, si se invierte considerando ETL, se generan temperaturas menores que la real. Esta característica también se observa en caso del 18 de Septiembre alrededor de 90 km, aunque no hay medidas del lidar hasta esa altura.

En la Figura 4.8 se representa la media anual de las diferencias de las temperaturas

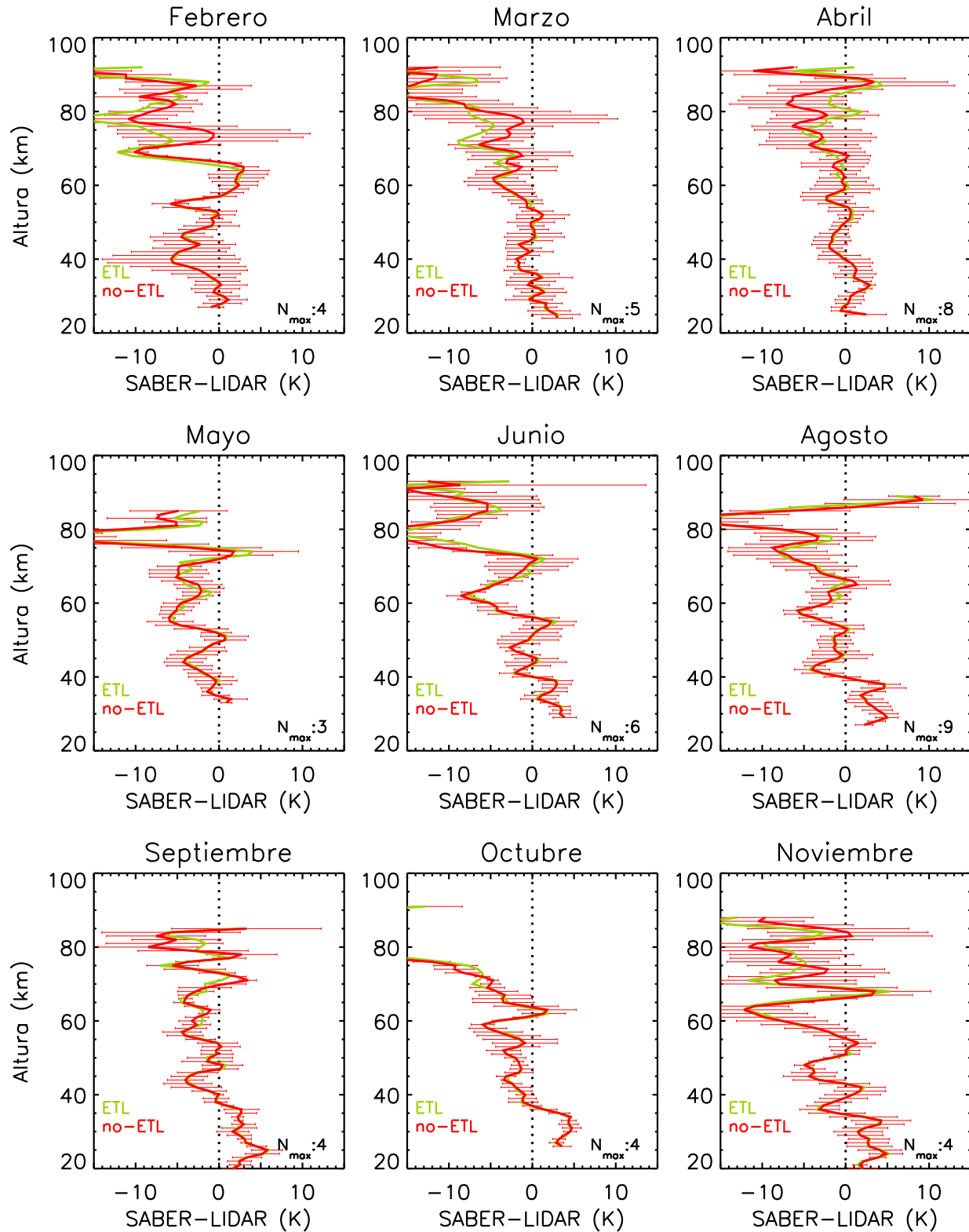


Figura 4.9: Diferencias medias entre las temperaturas de SABER derivadas en no-ETL (rojo) y ETL (verde) y las del lidar en TABLE MOUNTAIN para los meses del año 2002 junto a la desviación estándar (barras horizontales). Se indica el n° de coincidencias para cada mes.

de SABER tanto en ETL como en no-ETL con respecto a las medidas del lidar de Table Mountain así como su desviación estándar. Por debajo de 35 km, las diferencias son de 2 a 3 K, siendo la temperatura de SABER más elevada que la del lidar. Entre 40 y 70 km, las diferencias no superan los 3 K siendo SABER menor. Entre 75 y 90 km, aún teniendo en cuenta que la desviación estándar alcanza 10 K, la temperatura de SABER es alrededor de 10 K menor que la del lidar. Por encima de esa altura, los errores del lidar son de más de 12 K.

Las diferencias medias para cada uno de los meses con coincidencias entre SABER y este lidar en el año 2002 se representan en la Figura 4.9. El comportamiento de las diferencias no varía significativamente a lo largo del año siendo similar al anual aunque las comparaciones en la alta mesosfera son algo mejores en los meses de equinoccio, excepto en el mes de Octubre.

4.4.3. Maui

El lidar de Maui es un lidar de sodio. Por esto, y como se ha explicado en secciones anteriores, mide la temperatura entre 80 y 105 km y es en esa región donde se centran las comparaciones. Los datos del lidar corresponden tan sólo a los meses de Abril y Julio del año 2002. Por esto, el número de coincidencias en este caso es reducido. En la Figura 4.10 se representan perfiles de temperatura de SABER derivadas en no-ETL y ETL junto a los correspondientes a cuatro de las 27 coincidencias encontradas con el lidar situado en Maui. Como en los casos anteriores, también aquí se muestran las características temporales y espaciales de los perfiles.

En general, la temperatura invertida de las medidas de SABER en la alta mesosfera y la baja termosfera muestra las mismas características que la de este lidar en cuanto a estructura se refiere. Un ejemplo es el perfil del 11 de Abril, donde se aprecia una región por encima de 85 km en la que la temperatura sufre un aumento de 30 K en tan sólo 5 km seguido de un descenso de 70 K en 10 km de altura. Ambos instrumentos reproducen este comportamiento. Otro ejemplo de este tipo se observa en el perfil del 9 de Abril en el que aparece una doble capa de inversión.

Aunque, como en los casos anteriores, este lidar está situado en latitudes medias, la temperatura derivada en no-ETL se acerca más que la derivada en ETL a la temperatura del lidar a alturas elevadas, como, por ejemplo, en el perfil del 7 de Julio alrededor de 100 km.

En parte de las coincidencias del mes de Julio, las diferencias entre la temperatura de SABER y la del lidar son grandes. En el gráfico correspondiente al perfil del 14 de Julio se observa que la temperatura medida por el lidar es sustancialmente mayor que la de SABER. Además, los perfiles tienen una forma parecida. Esto sucede con otras tantas coincidencias durante este mes aunque no se muestran aquí.

La diferencia media anual de temperatura en no-ETL entre SABER y este lidar es menor (en valor absoluto) que -10 K entre 82 y 90 km (ver Figura 4.11) reduciéndose a $+2$ K a 85 km. Entre 90 y 100 km, varía entre -10 y -17 K. La diferencia de la temperatura es menor al invertir en no-ETL alrededor de 95 km aunque ambas son menores que la desviación estándar. Por debajo de 82 km la temperatura media anual del lidar supera la de SABER en más de 20 K. Sin embargo, los errores del lidar a estas alturas son elevados (15 K) por ser el límite inferior de las medidas.

En la Figura 4.12 se representan las diferencias promediadas para los meses de Abril y Julio. La diferencia media es menor en Abril, donde no supera 12 K (T_k de SABER

MAUI

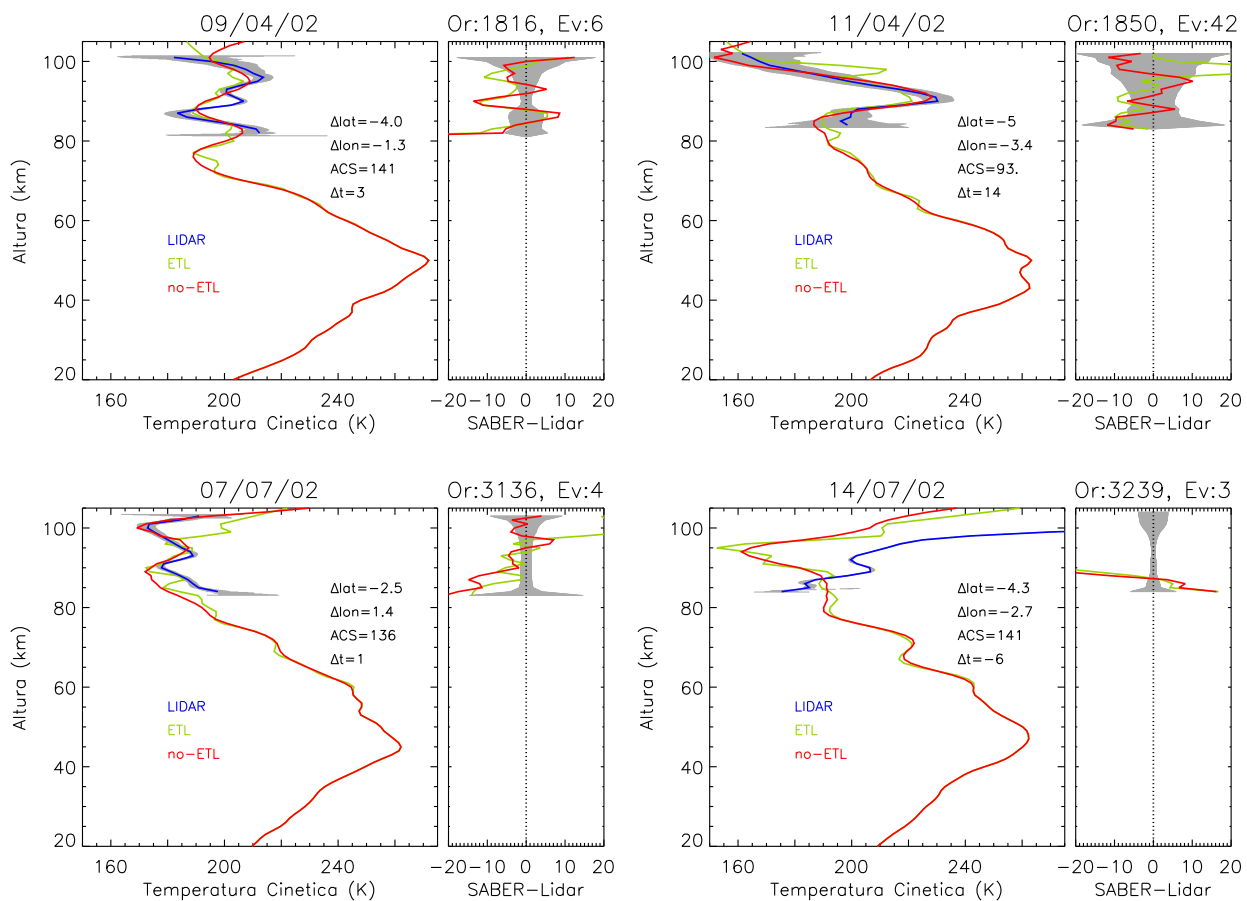


Figura 4.10: Paneles izdos.: Temperatura cinética invertida en no-ETL (rojo) y ETL (verde) de seis perfiles de SABER coincidentes (ver criterio en texto) con medidas del lidar de MAUI (azul) para cuatro días del año 2002. En cada figura se indica la fecha, el n° de órbita y de perfil y el ACS de SABER junto a las diferencias en latitud, longitud y tiempo. Paneles dchos.: Diferencias correspondientes entre las medidas de SABER en no-ETL y ETL y las del lidar.

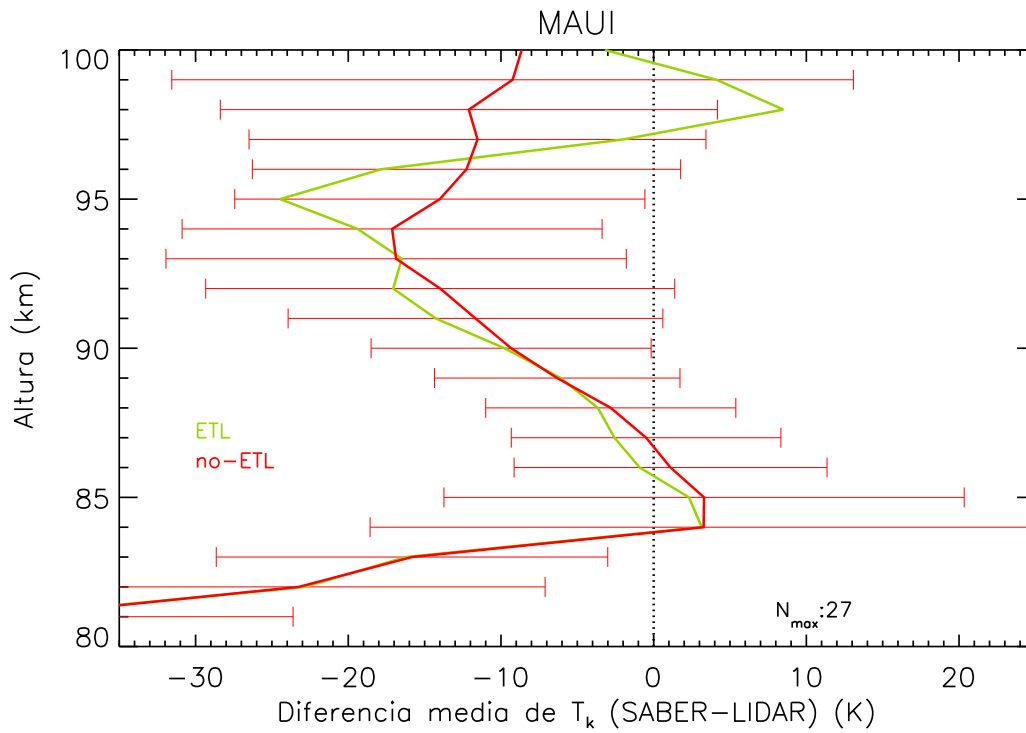


Figura 4.11: Diferencia media anual entre las temperaturas de SABER en no-ETL (rojo) y ETL (verde) y las del lidar en MAUI para el año 2002 junto a la desviación estándar (barras horizontales). Se indica el n° de coincidencias.

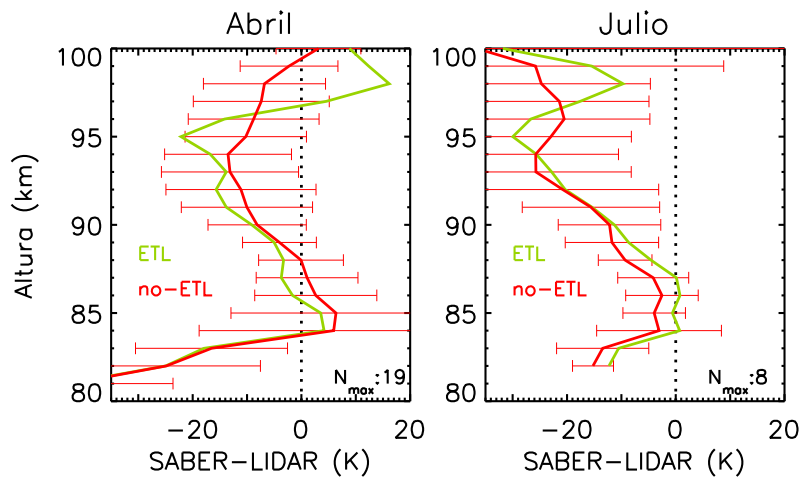


Figura 4.12: Diferencias medias entre las temperaturas de SABER derivadas en no-ETL (rojo) y ETL (verde) y las del lidar en MAUI para Abril y Julio del año 2002 junto a la desviación estándar (barras horizontales). Se indica el n° de coincidencias para cada mes.

menor) y está por debajo de la desviación estándar. En Julio la diferencia aumenta hasta 25 K aunque hay que recordar que los perfiles de temperatura del lidar en este mes no parecen muy realistas pues presentan gradientes inusualmente elevados. En ambos casos las diferencias son menores de 5 K alrededor de 85 km.

4.4.4. Sondre Stromfjörd

La Figura 4.13 muestra seis ejemplos de las comparaciones de perfiles individuales entre las temperaturas de SABER invertidas suponiendo condiciones de no-ETL y ETL y las del lidar de Rayleigh situado en Groenlandia extraídos de los 98 casos en los que se han encontrado coincidencias durante el año 2002.

A estas altas latitudes, las variaciones de temperatura y de las alturas de la estratopausa y la mesopausa a lo largo del año son muy significativas. En la mayor parte de los casos, la altura de la estratopausa medida por SABER coincide con la medida por el lidar. Ejemplos de este tipo son las comparaciones del perfil del 6 de Febrero y el perfil del 21 de Septiembre, donde la altura de la estratopausa está situada a 57 y 50 km respectivamente, aunque en ambos casos SABER subestima la temperatura. Un ejemplo de la concordancia en la temperatura de la estratopausa son los perfiles del día 24 de Febrero y del 8 de Julio, donde las temperaturas alrededor de 50 km son de 245 K y 265 K, respectivamente. Otra comparación interesante es la del perfil del 28 de Enero en la que la temperatura presenta un valor elevado, inusual durante condiciones de solsticio de invierno en el polo norte. En este caso ambos instrumentos miden esta elevada temperatura (para esa época del año) en la estratopausa, que alcanza 265 K.

El gráfico correspondiente al perfil del 8 de Julio muestra una comparación durante el verano polar. Aún no estando completamente bajo condiciones nocturnas, la iluminación solar es pequeña (ángulo cenital solar elevado), y el lidar es capaz de medir la temperatura aunque sólo hasta 70 km y con errores mayores de lo usual³. En este caso, la temperatura de SABER reproduce la del lidar con diferencias menores de 4 K por encima de 35 km. Aunque las medidas del lidar no alcancen la alta mesosfera y la comparación no sea posible, la figura muestra la importancia de considerar el no-ETL al invertir la T_k en condiciones polares de verano sin lo que la temperatura se sobreestimaría en más 20 K a 80 km.

El perfil del 24 de Febrero de 2002 corresponde a un caso típico de invierno polar en el que la temperatura varía suavemente con la altura. Los perfiles de ambos instrumentos son similares. Alrededor de 80 km la temperatura invertida en no-ETL es unos 10 K mayor que en ETL. Sin embargo, el perfil del lidar no presenta la estructura que aparece en las medidas de SABER. Aún así, la temperatura en no-ETL parece reproducir mejor la del

³Este lidar consigue realizar medidas diurnas con un error aceptable integrando la señal durante varias horas.

SONDRE STROMFJÖRD

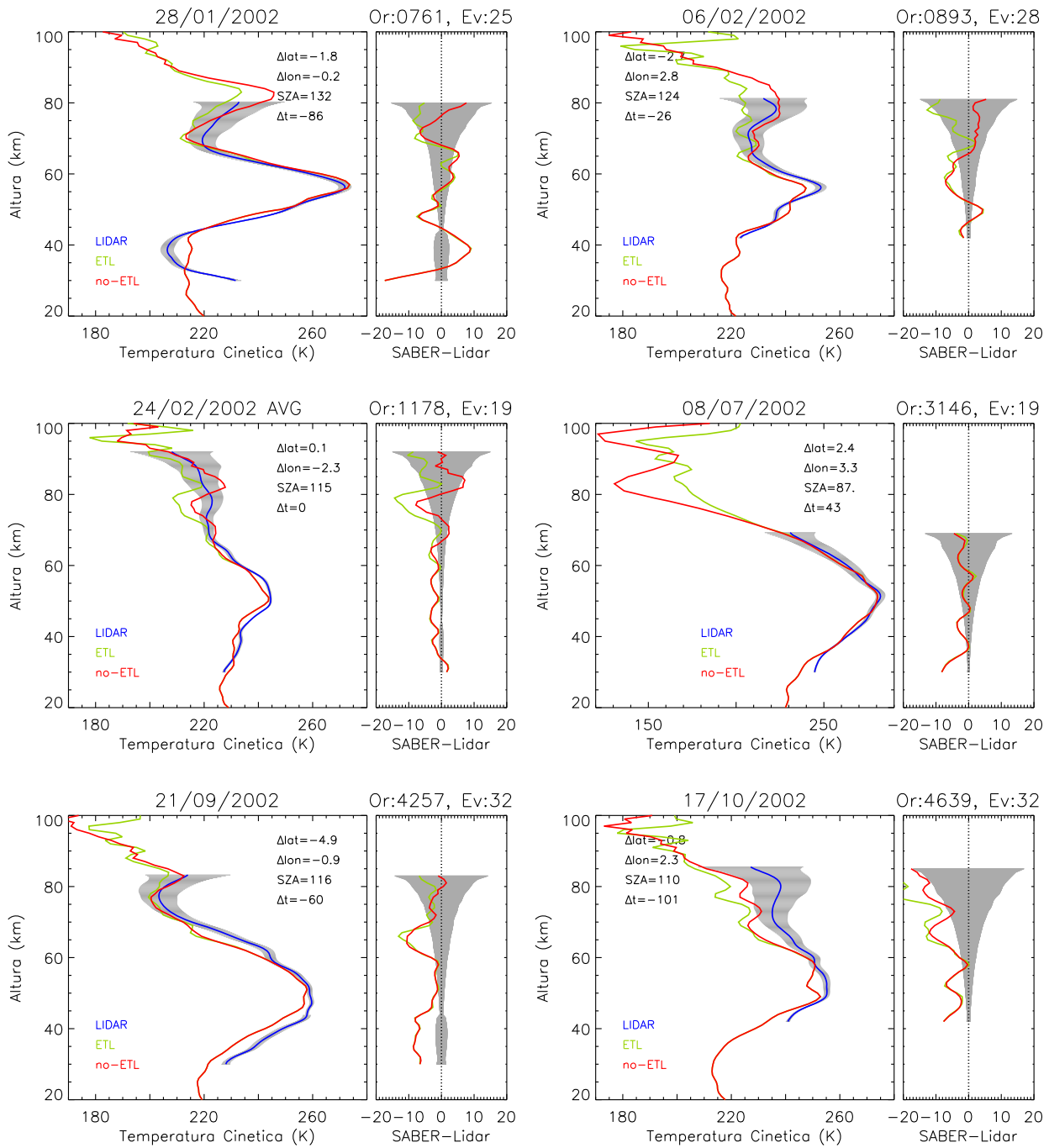


Figura 4.13: Paneles izdos.: Temperatura cinética invertida en no-ETL (rojo) y ETL (verde) de seis perfiles de SABER coincidentes (ver criterio en texto) con medidas del lidar de SONDRE STROMFJÖRD (azul) para seis días del año 2002. En cada figura se indica la fecha, el n° de órbita y de perfil y el ACS de SABER, y las diferencias en latitud, longitud y tiempo. Paneles dchos.: Diferencias correspondientes entre las medidas de SABER en no-ETL y ETL y las del lidar.

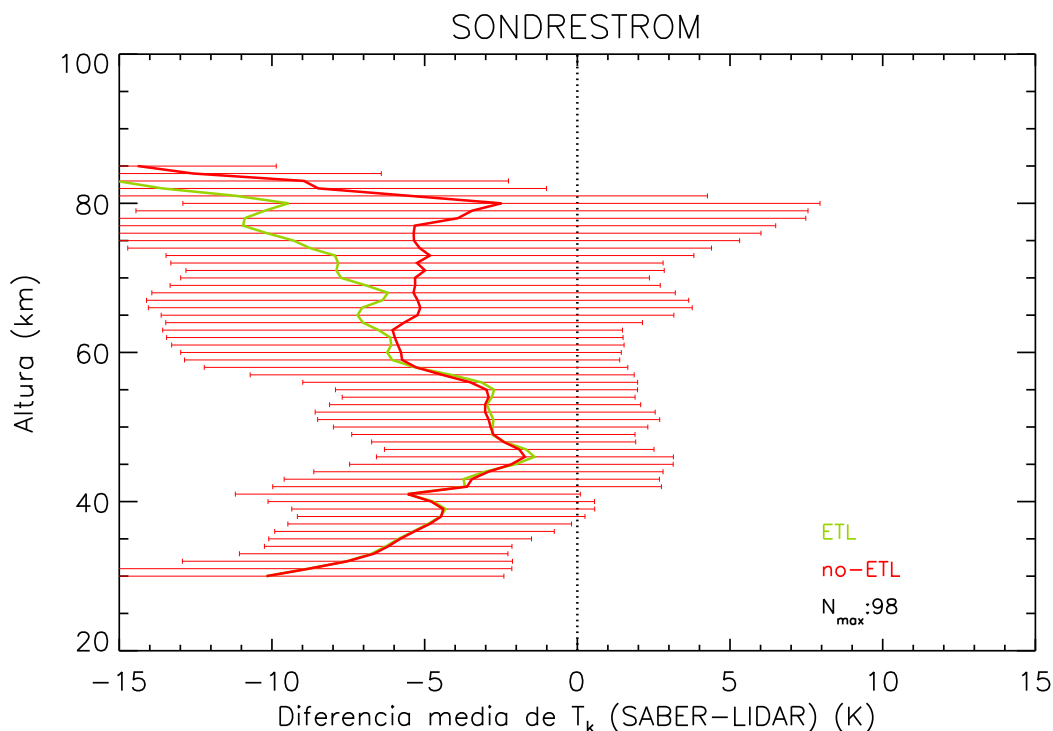


Figura 4.14: Diferencia media anual entre las temperaturas de SABER en no-ETL (rojo) y ETL (verde) y las del lidar en SONDRE STROMFJÖRD para el año 2002 junto a la desviación estándar (barras horizontales). Se indica el n° de coincidencias.

lidar en la alta mesosfera.

En la comparación del perfil del 6 de Febrero se muestra cómo la diferencia entre temperatura de SABER invertida en no-ETL y la del lidar es menor que aquella invertida suponiendo ETL. La mejora es de más de 10 K alrededor de 80 km.

La Figura 4.14 muestra la media anual de las diferencias entre las temperaturas derivadas en no-ETL y ETL con las de este lidar. A lo largo de todo el intervalo de alturas, la temperatura medida por SABER es menor que la del lidar. Por debajo de 40 km las diferencias varían entre 5 y 10 K aunque los errores del lidar suelen ser elevados por ser el límite inferior de las medidas. Entre 45 y 55 km la diferencia es de 3 K. Entre 60 y 80 km la diferencia media entre la temperatura invertida en no-ETL y la del lidar es de 5 K. En esta región la inversión en no-ETL mejora las comparaciones con respecto a la ETL hasta en 8 K. Hasta 80 km la media de las diferencias es menor que la desviación estándar. Por encima de esta altura las diferencias son mayores de 10 K si bien el error del lidar en esta región es mayor que ese valor. Esta tendencia o sesgo negativo en las medidas de SABER alrededor de la mesopausa está en consonancia con la comparación de las medidas de SABER con las medidas de temperatura *in situ* de cohetes de sondeo obtenidos mediante la técnica de ‘caída libre de esferas’ (falling spheres) (Mertens y col. [2004]).

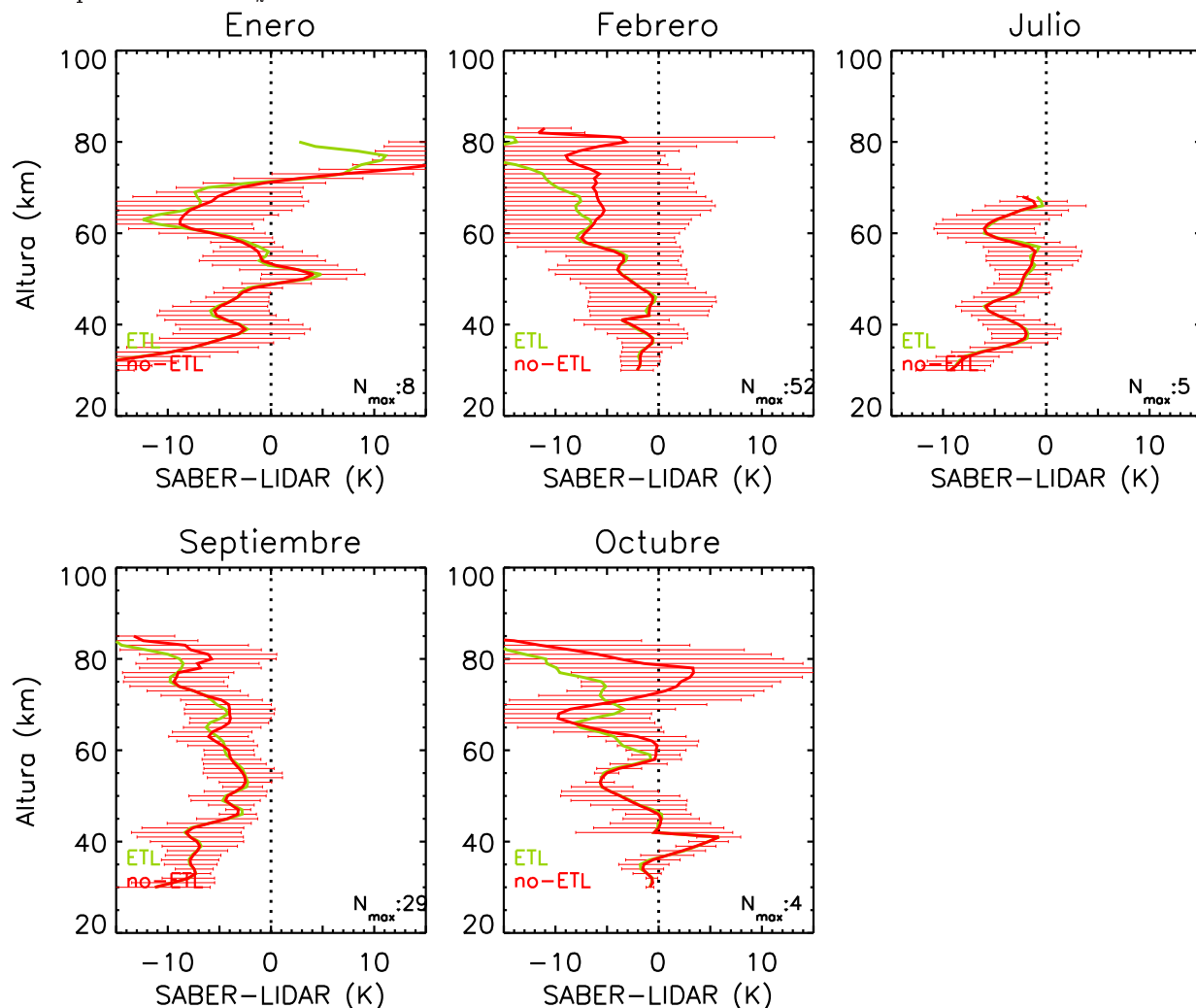


Figura 4.15: Diferencias medias entre las temperaturas de SABER derivadas en no-ETL (rojo) y ETL (verde) y las del lidar en SONDRE STRÖMFJORD para los meses del año 2002 junto a la desviación estándar (barras horizontales). Se indica el n° de coincidencias para cada mes.

En la Figura 4.15 se representa la variación de las medias a lo largo del año durante los meses en los que se han encontrado coincidencias. Por debajo de 70 km el comportamiento es similar para todos los meses. Por encima de esta altura SABER subestima la temperatura del lidar en los meses de Febrero y Septiembre y la sobreestima en Enero y Octubre. No obstante, el mayor número de coincidencias corresponde los meses de Febrero (52) y Septiembre (29) por lo que el resto de meses son menos significativos. La temperatura obtenida suponiendo no-ETL es hasta 10 K mayor que aquella suponiendo ETL en los meses de Febrero y Octubre y mejora en ambos casos las comparaciones con el lidar. En Septiembre la mejora es de unos 3 K y en Enero las empeora en algo más de 10 K, aunque esto sucede en las alturas más elevadas donde la T_k del lidar es menos fiable.

Cabe destacar el buen acuerdo entre las medidas de SABER y del lidar en el verano polar (Julio) con diferencias de menos de 5 K aunque las comparaciones se reducen a regiones donde domina el ETL.

4.4.5. Davis

La Figura 4.16 muestra comparaciones entre perfiles individuales de temperaturas para cuatro de las 15 coincidencias de SABER y el lidar situado en la Antártida. Se indican las separaciones temporal y espacial entre las medidas de SABER y las del lidar así como

DAVIS

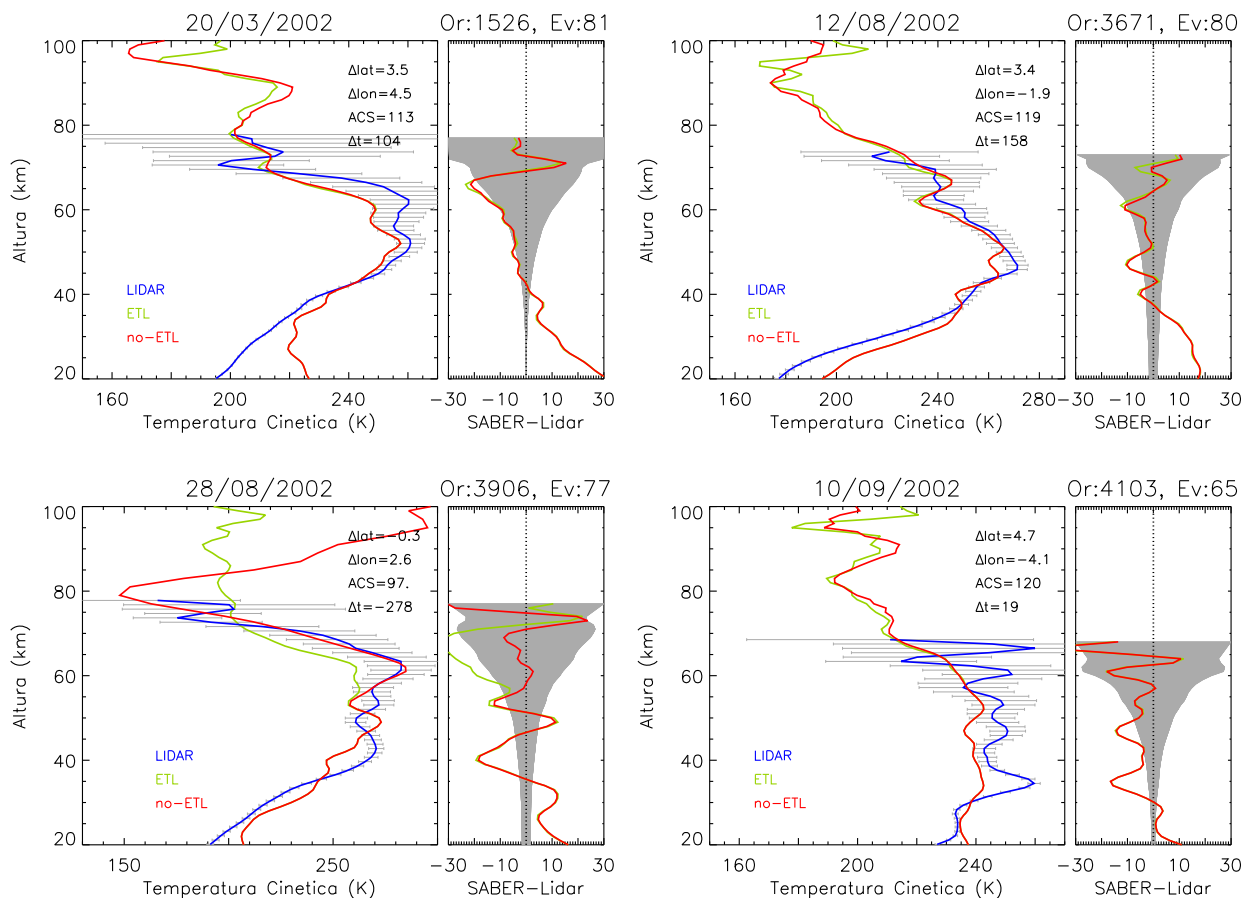


Figura 4.16: Paneles izdos.: Temperatura cinética invertida en no-ETL (rojo) y ETL (verde) de seis perfiles de SABER coincidentes (ver criterio en texto) con medidas del lidar de DAVIS (azul) para seis días del año 2002. En cada figura se indican la fecha, el n° de órbita y de perfil y el ACS de SABER, y las diferencias en latitud, longitud y tiempo. Paneles dchos.: Diferencias correspondientes entre las medidas de SABER en no-ETL y ETL con las del lidar. Las regiones sombreadas representan el error del lidar.

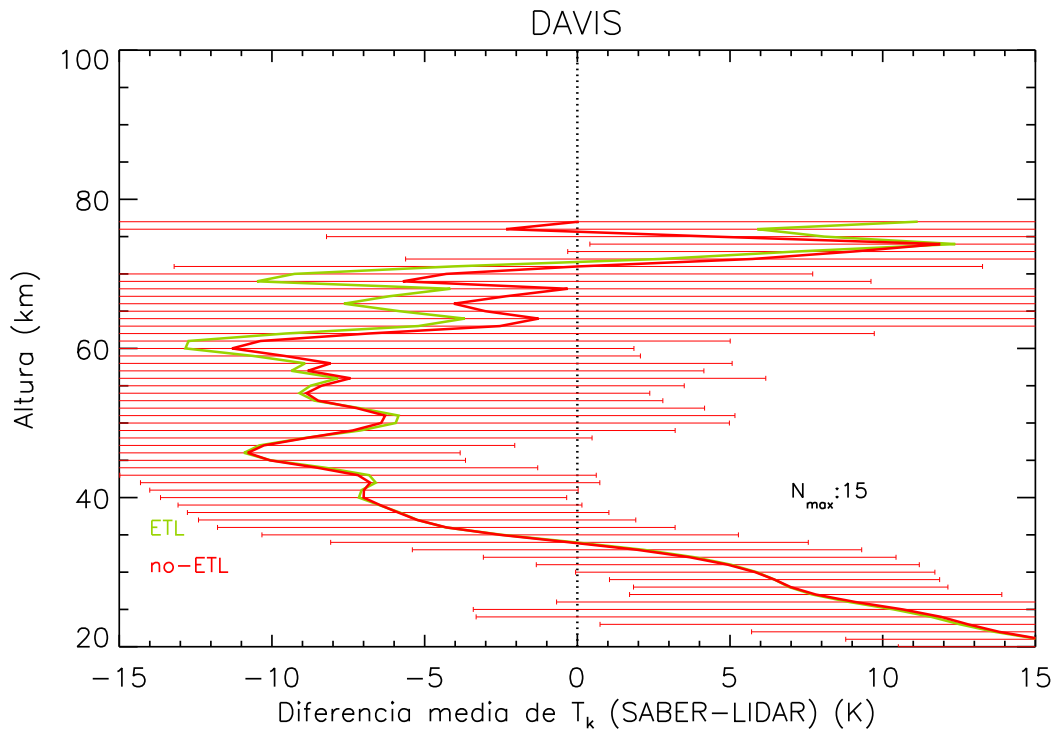


Figura 4.17: Diferencia media anual entre las temperaturas de SABER derivada considerando no-ETL (rojo) y ETL (verde) y las del lidar en DAVIS para el año 2002 junto a la desviación estándar (barras horizontales). Se indica el n° de coincidencias.

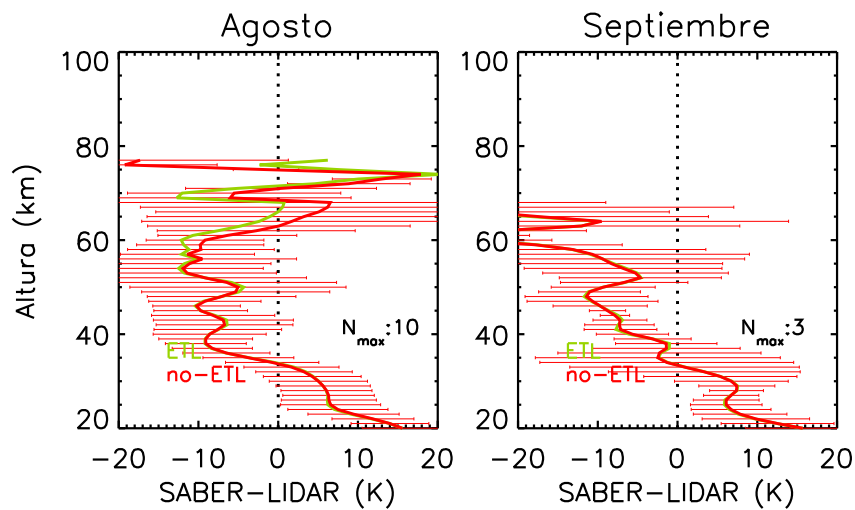


Figura 4.18: Diferencias medias entre las temperaturas de SABER derivadas en no-ETL (rojo) y en ETL (verde) y las del lidar en DAVIS para los meses del año 2002 donde se ha encontrado más de una coincidencia junto a la desviación estándar (barras horizontales). Se indica el n° de coincidencias para cada mes.

el ACS y el número de perfil y órbita de SABER.

Los perfiles de temperatura del lidar presentan un elevado número de oscilaciones. En general, SABER reproduce estas estructuras de peor forma que en los casos anteriores (ver por ejemplo el perfil del 20 de Marzo). Hay que hacer notar que las medidas del lidar van acompañadas de un error elevado ($\sim\pm 10$ K y $\sim\pm 30$ K a 60 y 70 km respectivamente). Sin embargo, los dos instrumentos sitúan la estratopausa a la misma altura. No se puede decir nada sobre la mesopausa ya que el lidar no mide por encima de 80 km.

El acuerdo entre medidas para las tres coincidencias encontradas en el mes de Septiembre de 2002 no es muy bueno aunque los perfiles de temperatura del lidar no parecen demasiado realistas (ver perfil del 10 de Septiembre).

En este caso se trabaja con medidas tomadas en latitudes altas por lo que los efectos de no-ETL aparecen desde la mesosfera media. Como se observa en la comparación del perfil del 28 de Agosto, la inversión de temperatura en no-ETL reduce las diferencias entre el lidar y SABER no sólo alrededor de las capas de inversión (a 63 km) sino en la alta mesosfera la cual, en este caso, presenta una temperatura de 150 K a 80 km, muy por debajo de los 200 K derivados al invertir en ETL.

Se observa también una leve mejora de las comparaciones por encima de 60 km si se considera no-ETL al invertir la temperatura de SABER (ver Figura 4.17). La diferencia media por debajo de 30 km está entre 5 y 15 K. Entre 35 y 60 km la media está entre 5 y 10 K siendo la temperatura de SABER menor que la del lidar. Por encima de esa altura y hasta 70 km la diferencia media de la temperatura del lidar y la de SABER en no-ETL es menor de 5 K (SABER menor) y desde los 70 km alcanza hasta 12 K (SABER mayor). A estas alturas la desviación estándar es muy elevada.

La media de las diferencias para los distintos meses del año se muestran en la Figura 4.18. Por haber una sola coincidencia durante el mes de Marzo no se ha representado la media para ese mes. El acuerdo entre SABER y el lidar es mejor en Agosto que en Septiembre aunque se han encontrado tan sólo 3 coincidencias para el último.

4.4.6. Fort Collins

El lidar de Fort Collins, por ser de sodio, mide la temperatura desde 80 hasta 105 km de altura. La Figura 4.19 muestra las comparaciones para seis de las 58 coincidencias encontradas entre este lidar y SABER para el año 2002. Se muestran los perfiles individuales de temperatura para ambos instrumentos (los de SABER derivados suponiendo tanto no-ETL como ETL) junto a las diferencias y el error del lidar en función de la altura. Como en los casos anteriores, se indican las separaciones espaciales y temporales y las características de los perfiles de SABER.

El acuerdo en general es bueno. La mesopausa se localiza en los dos instrumentos a alturas similares. Ejemplos se pueden ver en las comparaciones de los perfiles del 6 de

FORT COLLINS

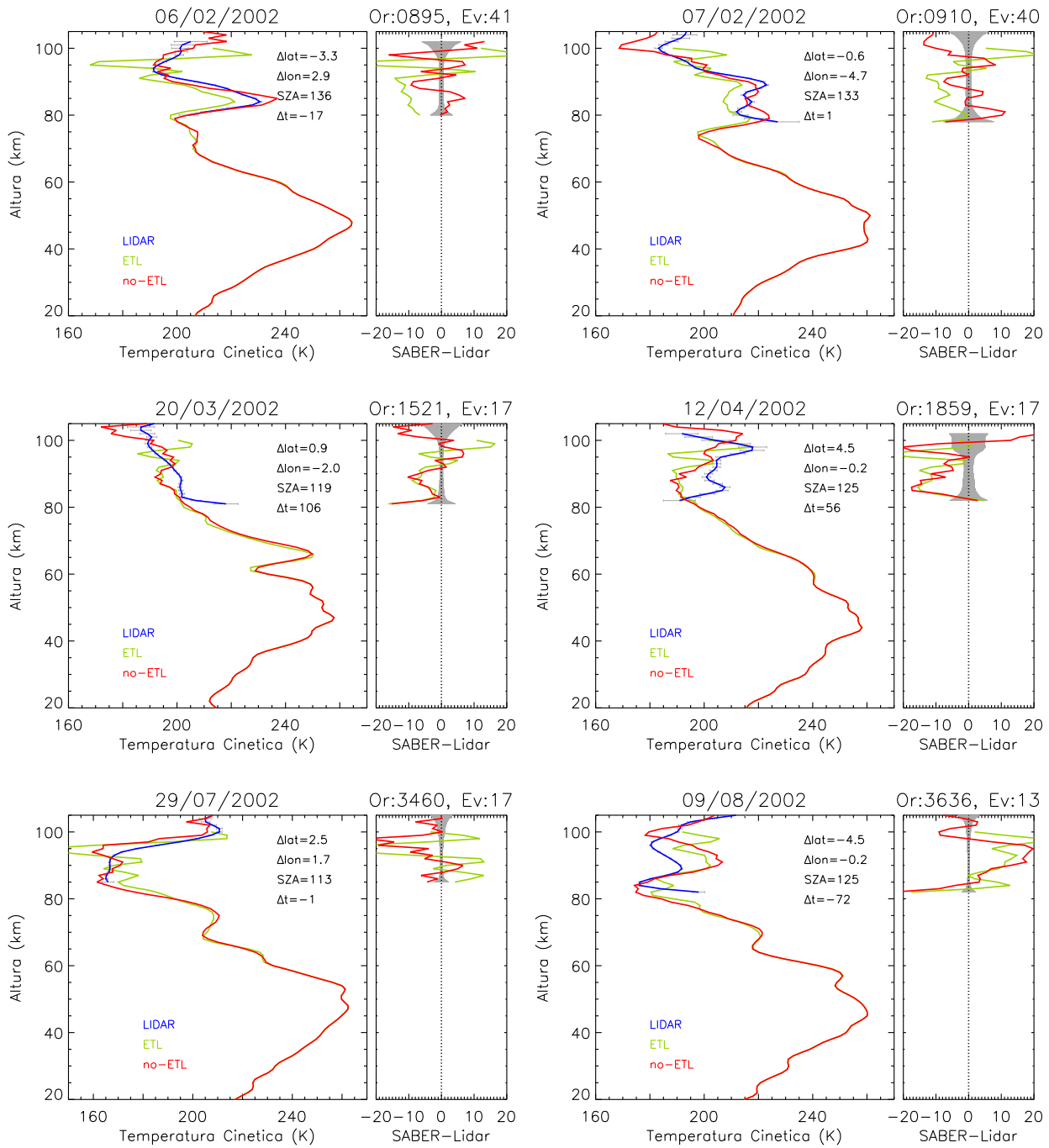


Figura 4.19: Paneles izdos.: Temperatura cinética invertida en no-ETL (rojo) y ETL (verde) de seis perfiles de SABER coincidentes (ver criterio en texto) con medidas del lidar de FORT COLLINS (azul) para seis días del año 2002. En cada figura se indica la fecha, el n° de órbita y de perfil, el ACS de SABER y las diferencias en latitud, longitud y tiempo. Paneles dchos.: Diferencias correspondientes entre las medidas de SABER en no-ETL y ETL con las del lidar.

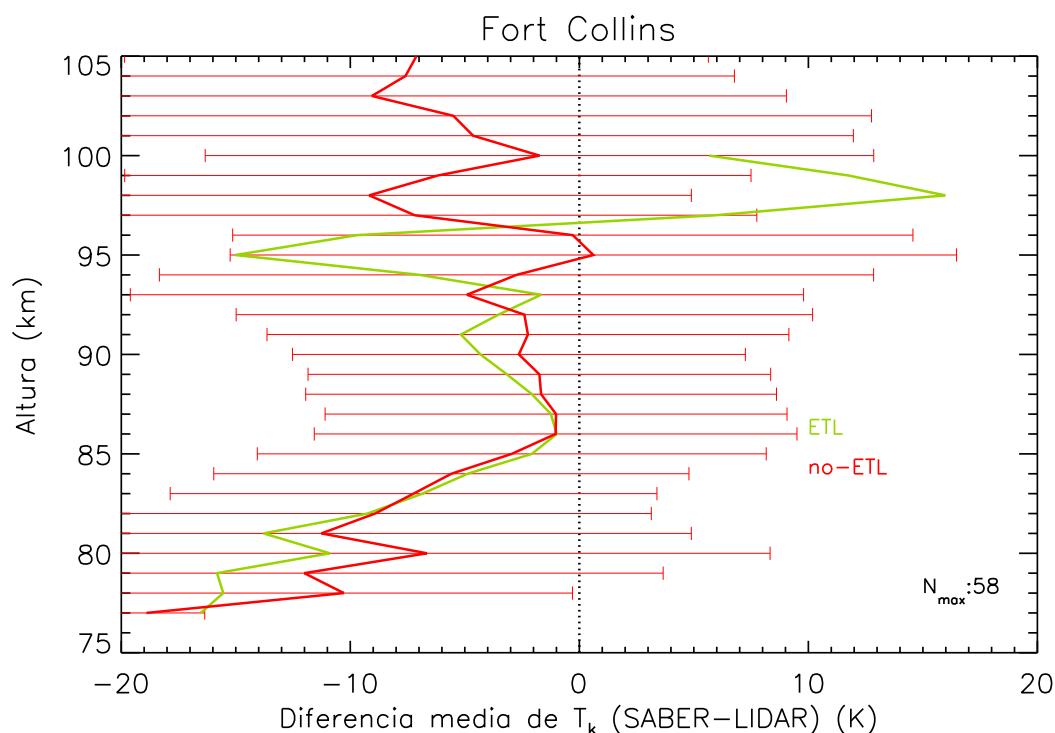


Figura 4.20: Diferencia media anual entre las temperaturas de SABER derivada considerando no-ETL (rojo) y ETL (verde) y las del lidar en FORT COLLINS para el año 2002 junto a la desviación estándar (barras horizontales). Se indica el n° de coincidencias.

Febrero o del 29 de Julio.

En la comparación del perfil mostrado del 12 de Abril de 2002 parece haber una diferencia en el registro de altura de las medidas de SABER en no-ETL y las del lidar. Los perfiles de ambos instrumentos presentan una estructura similar, alcanzando máximos y mínimos del mismo orden, aunque desplazados en altura. No se dispone de información precisa del error en la medida de altura del lidar aunque es menor que su resolución vertical.

En general la inversión en no-ETL es más realista y mejora los resultados en los máximos y mínimos de temperatura de las capas de inversión (ver perfil del 7 de Febrero).

En la Figura 4.20 se muestran las diferencias medias anuales de temperaturas del lidar y de SABER (en este último caso tanto en ETL como en no-ETL). La temperatura de SABER en no-ETL es algo menor que la del lidar en todo el intervalo de altura de las comparaciones aunque mejora la invertida en ETL. Aún así, la diferencia media es siempre bastante menor que la desviación estándar. Por debajo de 82 km, la diferencia media con SABER es mayor de 10 K, aunque el error del lidar es elevado, más de 5 K. Entre 85 y 95 km, región donde está centrado el máximo de sodio y en la que los errores del lidar son menores, la media es de 2 a 3 K. Por encima de esta altura, las diferencias están entre 3 y 9 K. La inversión en no-ETL mejora las comparaciones significativamente, en especial

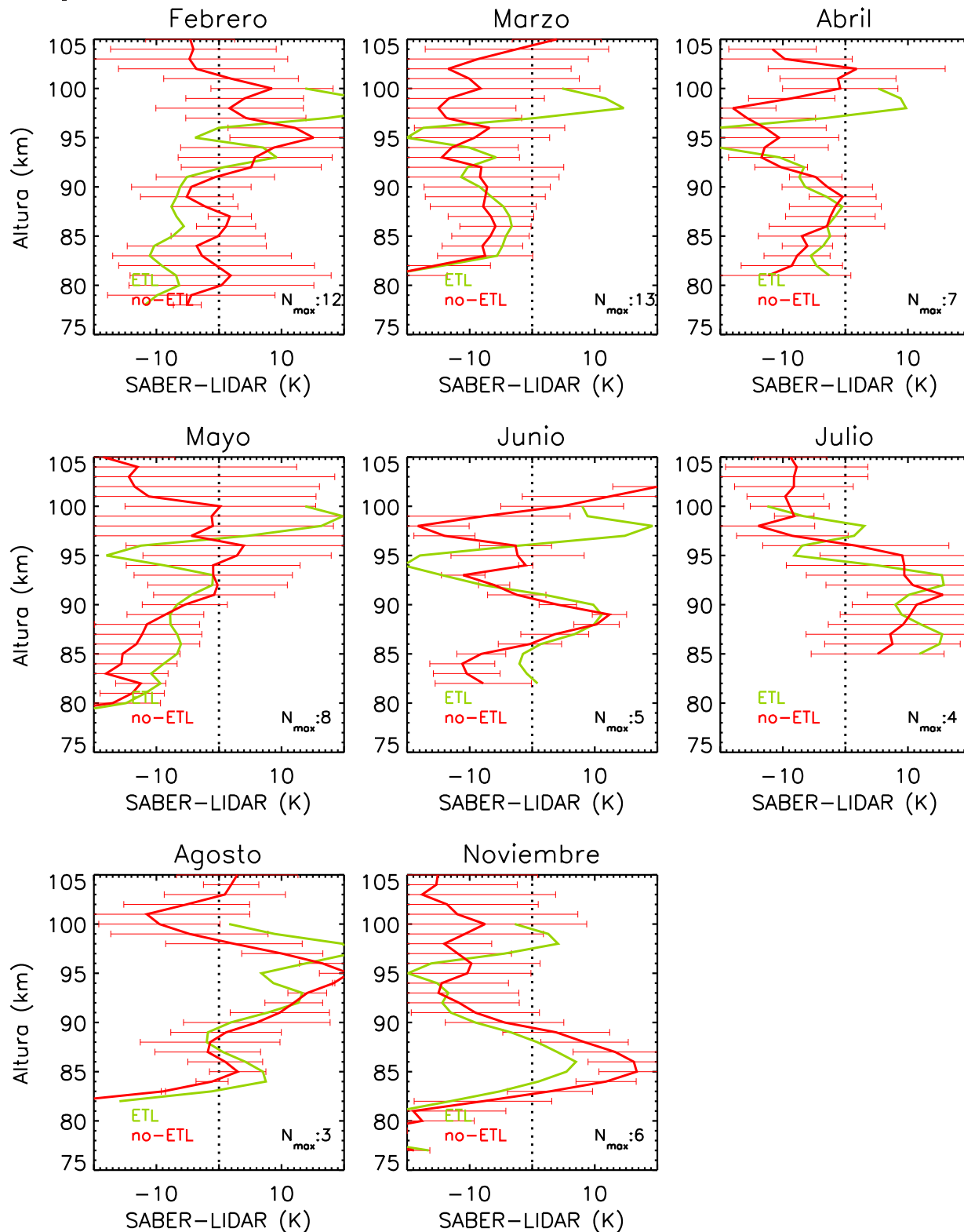


Figura 4.21: Diferencias medias entre las temperaturas de SABER derivadas en no-ETL (rojo) y ETL (verde) y las del lidar en FORT COLLINS para los meses del año 2002 junto a la desviación estándar (barras horizontales). Se indica el n° de coincidencias para cada mes.

por encima de 93 km.

Las medias de las diferencias en función de los meses se muestran en la Figura 4.21. El comportamiento de las mismas varía de mes a mes. Al deducirse la temperatura del lidar a partir de las medidas de las emisiones del sodio se podría buscar una relación de estos resultados con la evolución de la capa de sodio a lo largo del año. La altura de la misma no varía sustancialmente pero es más densa y extensa entre Octubre y Abril (*She y col.*, 2000). En este período el acuerdo es mejor que en el resto del año. En concreto, las diferencias son menores de 10 K entre 85 y 95 km para los meses de Febrero, Marzo y Abril aunque es más elevada para el mes de Noviembre.

Entre 85 y 90 km, la temperatura media de SABER en no-ETL es menos de 10 K menor que la del lidar durante los meses de Marzo y Mayo. El resto del año es mayor (hasta 10 K). Entre 90 y 95 km, la temperatura de SABER es menor que la del lidar en los meses de Marzo, Abril Junio y Noviembre y mayor en el resto. Por encima de 95 km las diferencias son menores de 15 K (SABER menor o igual que el lidar) excepto durante el mes de Junio que alcanzan más de 20 K. En todos los casos, excepto en los meses de Junio y Agosto (con 5 y 3 coincidencias respectivamente), las diferencias son menores o alrededor de la desviación estándar por encima de 85 km.

4.4.7. Efecto de $k_{\text{CO}_2-\text{O}}$ y de la concentración de oxígeno atómico

Para invertir la temperatura cinética se ha utilizado como nominal la concentración de oxígeno atómico correspondiente a cada época de año y a cada latitud proporcionada por el modelo climatológico TIME-GCM. Asimismo la tasa de relajación de los niveles ν_2 del CO_2 en colisiones con el oxígeno atómico ($k_{\text{CO}_2-\text{O}}$) adoptada aquí ha sido de $6 \times 10^{-12} \text{ cm}^3 \text{ s}^{-1}$ (a 300 K). Como se ha mostrado en el capítulo anterior tanto la razón de mezcla de este compuesto como el valor de esta constante colisional son muy importantes para la determinación correcta de la temperatura cinética a partir de 80-85 km, región donde el oxígeno atómico es más abundante.

Teniendo en cuenta que la concentración de oxígeno atómico utilizada en este estudio es más elevada que en otros trabajos (en *Manuilova y Shved* [1992] es dos veces menor) y que la tasa de relajación mencionada coincide con el límite superior de los valores aceptados hoy por hoy (ver Tabla 3.9 en la pág. 75), se ha estudiado el efecto de disminuir en un 50 % bien la razón de mezcla de O ó bien la tasa $k_{\text{CO}_2-\text{O}}$ sobre las comparaciones de temperatura. Un ejemplo del efecto típico sobre un perfil de temperatura invertido en no-ETL para medidas sobre Fort Collins se muestra en la Figura 4.22. También se muestra de manera ilustrativa la inversión en ETL. Los perfiles corresponden al 3 de Mayo de 2002 en el que aparece una capa de inversión en la alta mesosfera. El efecto de disminuir la concentración de oxígeno atómico (o la constante colisional) implica una menor transferencia de energía cinética a vibracional. Por esto, los estados vibracionales

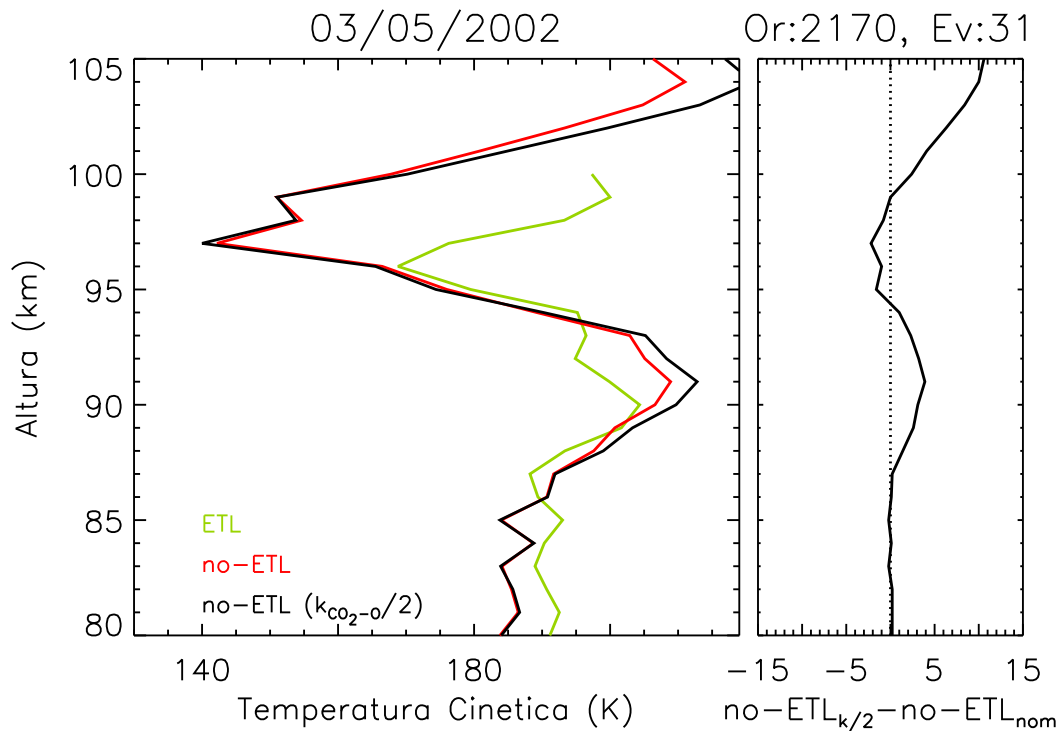


Figura 4.22: Ejemplo típico del efecto de la reducción de la tasa de relajación de los estados $\text{CO}_2(\nu_2)$ por colisiones con el oxígeno atómico (o la abundancia del último) en un factor 2 sobre la temperatura invertida en no-ETL de la alta mesosfera. Se muestran perfiles de la inversión en ETL (verde), inversión nominal en no-ETL (rojo) e inversión en no-ETL con $k_{\text{CO}_2-\text{O}}/2$ (negro).

se alejan en mayor medida de las condiciones de ETL.

En definitiva, la temperatura invertida en no-ETL con la constante reducida en un factor 2 se aleja más de la invertida en ETL que en el caso nominal. Esto es debido a que los efectos de no-ETL son mayores para la constante (o el oxígeno atómico) más reducidos. En el ejemplo mostrado el efecto se aprecia desde los 87 km donde, al disminuir la constante, la temperatura invertida aumenta 4 K. Entre 95 y 100 km disminuye en algo menos de 3 K. Por encima de esa altura es donde el efecto es mayor (el oxígeno atómico es más abundante) y aumenta hasta 10 K a 105 km.

El resultado sobre las diferencias medias anuales se muestra en la Figura 4.23 para el caso de las comparaciones con las temperaturas del lidar de Fort Collins. La elección de este grupo de comparaciones se basa en que este lidar mide la temperatura donde el efecto del oxígeno atómico sobre las temperaturas de SABER es mayor, es decir, por encima de 80 km. El efecto sobre estas medias por debajo de 85 km es inapreciable debido a las razones dichas anteriormente y en el Capítulo 3. Entre 85 y 95 km, aunque los estados vibracionales generalmente también están en condiciones de ETL en latitudes medias, se han detectado un gran número de capas de inversión en las medidas de temperatura.

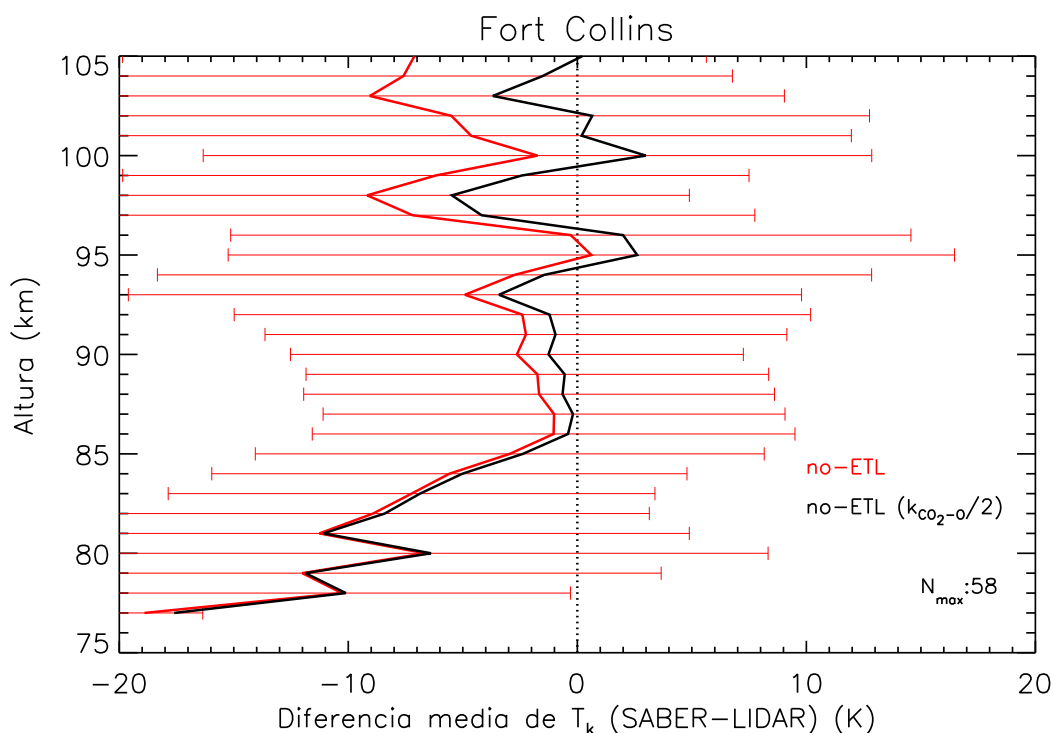


Figura 4.23: Efecto sobre la diferencia media anual entre las temperaturas de SABER invertidas en no-ETL y las del lidar en FORT COLLINS de disminuir la tasa de colisiones entre los estados $\text{CO}_2(\nu_2)$ y el oxígeno atómico o la abundancia de éste último en un 50 % (rojo: caso nominal; negro: $0.5 \times k_{\text{CO}_2-\text{O}}$).

En estas capas, el efecto de no-ETL es mayor que en regiones donde los cambios de temperatura son suaves. Por esto, se observa un cambio en la temperatura invertida al reducir la constante (o la abundancia de O) que en media no supera 1-2 K. Sin embargo, el efecto sobre los perfiles individuales, que varía en función de la amplitud y la estructura de la capa de inversión, puede alcanzar ± 6 K. Por encima de 100 km, salvo raras excepciones, la excitación de los niveles ν_2 es menor que en condiciones de ETL luego la temperatura invertida en ETL es generalmente menor que la invertida en no-ETL. Por tanto, disminuir el valor de la constante o la abundancia de O produce un aumento de la temperatura invertida. En esta región, las diferencias medias aumentan entre 6 y 7 K acercándose a las medidas del lidar.

La disminución de la tasa colisional o la abundancia de O en un factor 2 mejora las comparaciones entre 1 y 7 K en todo el intervalo de alturas analizado aunque las diferencias medias tanto en ese caso como en el caso nominal son menores que la desviación estándar.

Las medidas del lidar confirman que los efectos de no-ETL son importantes (para alturas mayores que 90 km) y se están modelando de forma correcta. Por otra parte, sugieren un valor de la constante $k_{\text{CO}_2-\text{O}}$ de 3×10^{-12} en lugar de $6 \times 10^{-12} \text{ cm}^3 \text{ s}^{-1}$. Esta sugerencia concuerda con las últimas medidas de laboratorio de esta constante en la que

se obtienen valores en torno a $3 \times 10^{-12} \text{ cm}^3\text{s}^{-1}$ (Castle y col., 2003).

4.4.8. Efecto de la concentración de dióxido de carbono

Para invertir la temperatura cinética en no-ETL en este trabajo se ha utilizado la concentración de dióxido de carbono suministrada por el modelo TIME-GCM correspondiente al mes y latitud de la medida de SABER. La variación de la abundancia de CO_2 apenas afecta a las temperaturas vibracionales de los estados $\text{CO}_2(\nu_2)$, responsables de las emisiones en $15 \mu\text{m}$. Sin embargo, sí afecta a la radiancia, especialmente en las regiones donde las bandas en $15 \mu\text{m}$ son ópticamente delgadas, es decir, por encima de 90 km. En estas regiones las radiancias son directamente proporcionales a la densidad de CO_2 (ver Ecuación 2.56). Por tanto, las temperaturas invertidas dependen de la concentración que se considere.

En la Figura 4.24 se muestra un perfil típico de la razón de mezcla del CO_2 del modelo TIME-GCM y el perfil medido por cohetes o *in situ* (López-Puertas y col., 2000) correspondientes a latitudes medias. La concentración de CO_2 del cohete difiere de la de TIME-GCM a partir de 90 km siendo de hasta un 20 % menor alrededor de 100 km. Por encima de 105 km la $[\text{CO}_2]$ del cohete empieza a superar la de TIME-GCM y a 120 km es un 20 % mayor.

El efecto de este cambio en la concentración de dióxido de carbono sobre la media anual de las diferencias de temperatura (SABER–Fort Collins) se muestra en la Figura 4.25.

Por debajo de 90 km, si bien no hay variación de CO_2 , las diferencias medias se ven ligeramente afectadas ($<1 \text{ K}$). Esto se debe a que, al disminuir la abundancia de CO_2 en las alturas situadas inmediatamente por encima, hay una menor absorción de la radiancia emergente. Por esto, la radiancia simulada en la inversión es mayor que en el caso nominal y se compensa con una leve disminución de la temperatura para así reproducir la medida de SABER en $15 \mu\text{m}$. En las regiones donde las bandas son ópticamente delgadas ($z > 90 \text{ km}$), las emisiones simuladas en $15 \mu\text{m}$ disminuyen proporcionalmente a la reducción de la concentración de CO_2 . Esto se compensa con un aumento de la temperatura cinética invertida de 1 a 4 K lo que hace que las diferencias medias anuales de temperatura entre SABER y el lidar de Fort Collins se reduzcan.

No obstante, el cambio en la temperatura invertida en no-ETL producida por esta variación en la abundancia de dióxido de carbono no es demasiado grande. Al igual que al utilizar el CO_2 de TIME-GCM, las diferencias medias son menores que la desviación estándar.

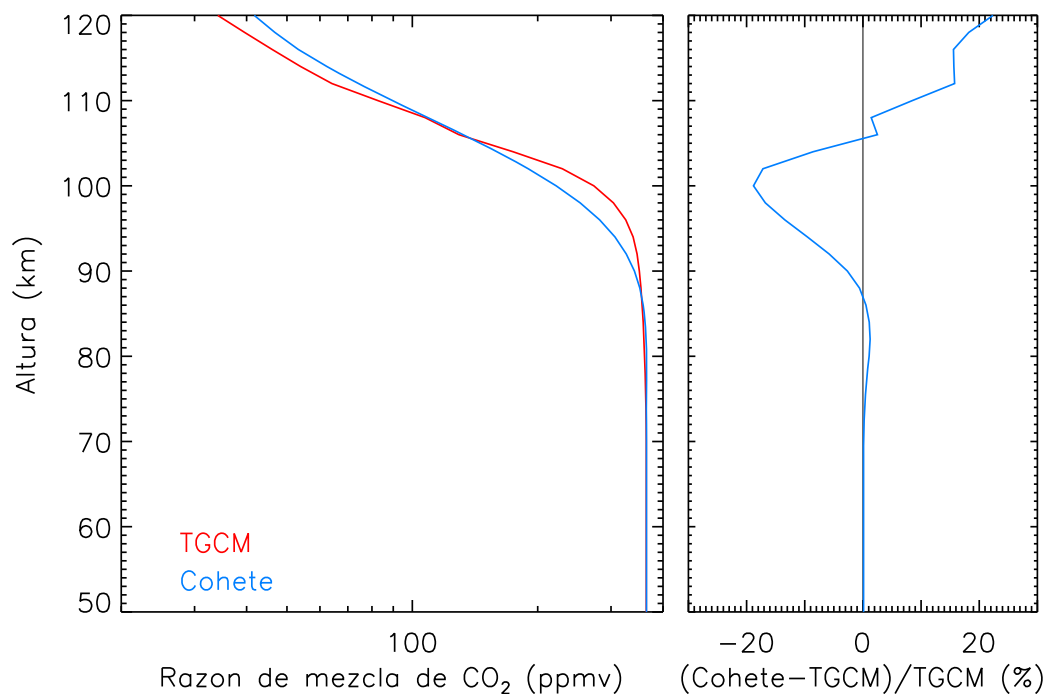


Figura 4.24: Comparación entre el perfil de razón de mezcla de CO₂ (en ppmv) del modelo TIME-GCM y el medido por un cohete en latitudes medias. El panel derecho muestra la diferencia relativa (cohete-TIMEGCM) en tanto por ciento.

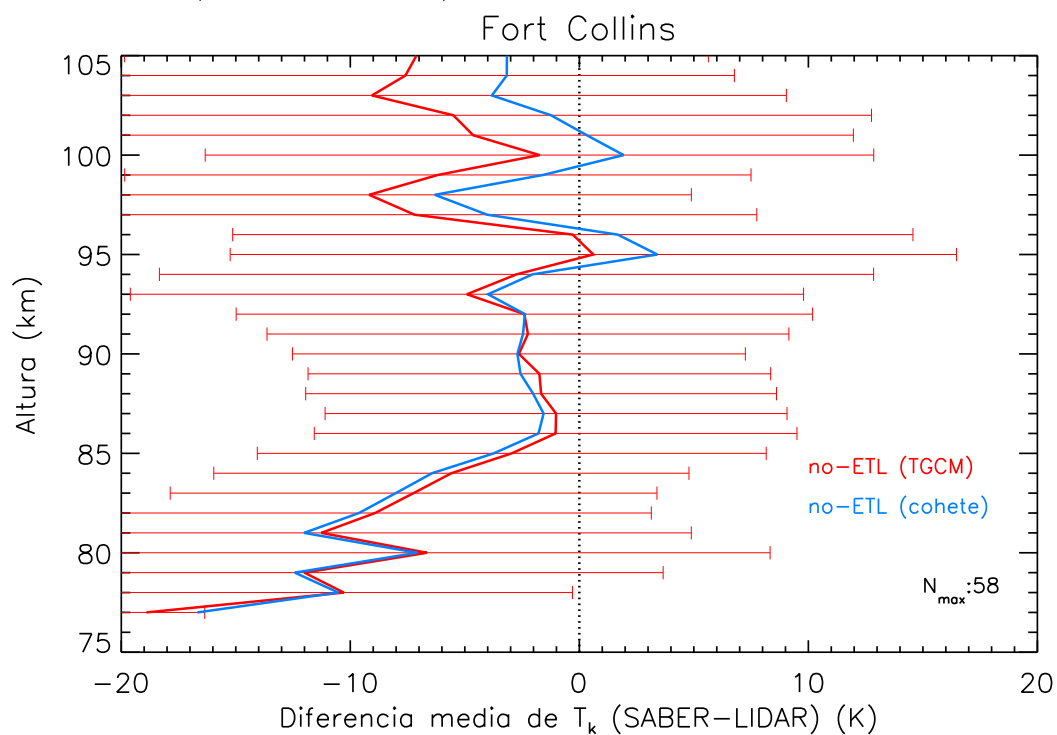


Figura 4.25: Efecto sobre la diferencia media anual entre las temperaturas de SABER invertidas en no-ETL y las del lidar en FORT COLLINS de utilizar las concentraciones de CO₂ de la Figura 4.24.

4.5. Resumen y discusión

En este capítulo se han presentado comparaciones de perfiles de temperatura cinética de SABER invertidos considerando tanto ETL (versión v1.02) como no-ETL (versión v1.03) con seis lidars localizados en diferentes latitudes y longitudes. A modo de resumen se han representado conjuntamente en la Figura 4.26 las diferencias medias anuales de temperatura entre SABER en no-ETL y los seis lidars. También se muestra el error medio anual de las medidas de los lidars que en general es elevado en el límite superior para los lidar de Rayleigh y en los límites superior e inferior para los lidar de sodio.

El acuerdo general entre las temperaturas de SABER en no-ETL y los lidars es bueno. Por debajo de 35 km, las temperaturas de SABER son entre 1-2 K mayores. Las diferencias con el lidar de Davis en esa región alcanzan los 15 K aunque hay que notar que las temperaturas de este lidar son más elevadas de lo usual en la baja estratosfera y además corresponden al límite inferior donde sus medidas tienen errores muy grandes. Entre 40 y 80 km las diferencias son de 2-3 K y algo mayores (5 K) en Sondre Stromfjörd, siendo la temperatura de SABER menor (sesgo negativo). Las temperaturas del lidar de Davis están entre 7 y 10 K entre 40 y 60 km y entre 3 y 10 K hasta 75 km (altura máxima de las medidas de este instrumento) aunque por encima de 50 km las diferencias

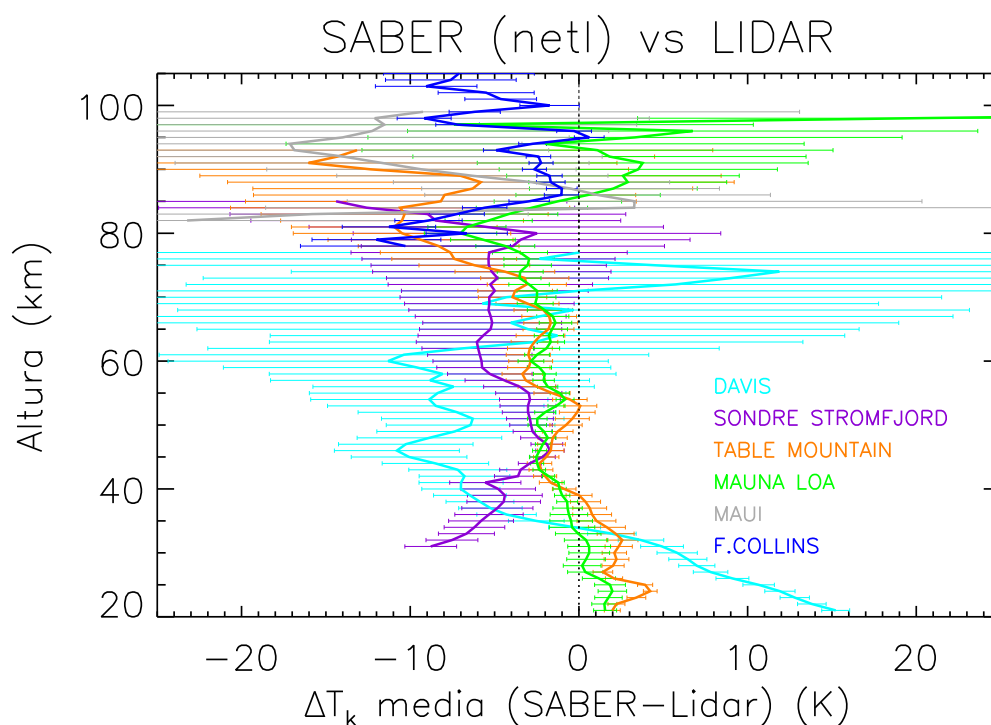


Figura 4.26: Diferencias medias anuales entre las temperaturas de SABER invertidas en no-ETL y las de los seis lidars indicados. Las barras horizontales son el error medio anual de cada lidar.

son menores que el error medio de este lidar. A partir de 80 km las diferencias con las medidas de los lidars de Table Mountain (con medidas hasta 90 km) y Sondre Stromfjörd (con medidas hasta 85 km) son de entre 10 y 15 K (SABER menor) aunque el error en la temperatura medida por estos lidars es elevado (>10 K) por ser el límite superior de las medidas. Las medidas de temperatura de SABER por encima de 80 km son similares a las de los lidars de Mauna Loa y Fort Collins. Las diferencias desde 80 km hasta 97 km están entre -5 y $+5$ K. Sin embargo, la temperatura media de SABER en esta región es hasta 15 K menor que la del lidar de Maui. A partir de 97 km las diferencias con los lidars de sodio (Maui y Fort Collins) son menores de 8 K siendo la temperatura de SABER menor. Aunque alrededor de 97 km las diferencias entre SABER y el lidar de Mauna Loa son demasiado elevadas (>15 K), el error medio de este lidar es mayor de 18 K.

En resumen, la temperatura de SABER invertida en no-ETL es:

- a) 2–3 K mayor que la de los lidars para $z < 35$ km (excepto en Davis);
- b) ~ 5 K menor que las de los lidars para $35 < z < 80$ km; y
- c) $\sim 5-8$ K menor que las de los lidars para $z > 80$ km.

Las diferencias a las que se refieren los puntos a) y b) son compatibles con un desplazamiento en el registro de la altura de referencia de SABER (la pareja (p_0, z_0) obtenida con la técnica de ‘dos colores’) de tan sólo 200 m. Es decir, elevando los perfiles de SABER en esta altura las diferencias serían compensadas. Esto concuerda con las comparaciones de temperatura de SABER con las medidas de la METO (‘Meteorological Office’ de Gran Bretaña) en las que se determina un desplazamiento de 160 m a 30 km (*Remsberg y col.*, 2003).

El disminuir la tasa de colisiones entre el mismo y moléculas de CO_2 en los estados ν_2 a un valor de $3 \times 10^{-12} \text{ cm}^3 \text{ s}^{-1}$ mejora las comparaciones entre las temperaturas en no-ETL y las del lidar de Fort Collins entre 3 y 7 K de 95 a 105 km. Por tanto, las diferencias a las que se refiere el punto c) pueden reducirse si se considera ese valor de la constante o bien una abundancia de oxígeno atómica más baja.

El comportamiento de la temperatura tras la inversión en no-ETL es el esperado siendo, en los casos estudiados, generalmente menor que la invertida en ETL alrededor de la mesopausa y mayor por encima de 95-100 km. En cuanto al efecto de realizar la inversión de la temperatura de SABER en no-ETL o en ETL cabe destacar que, la primera reduce las diferencias medias anuales con los lidars por encima de los 75 km. Además los perfiles individuales en no-ETL son más realistas que en ETL pues en el segundo caso presentan oscilaciones de amplitudes de hasta 100 K en 5 km.

Por otra parte, se han observado un elevado número de capas de inversión en la alta mesosfera. Este tipo de perfiles y aquellos en los que las temperaturas en la alta mesosfera son extremas (muy bajas o muy altas) se reproducen mejor si se utiliza una inversión

en no-ETL. En el caso de las capas de inversión hay ocasiones en las que el no-ETL sobreestima la temperatura máxima de la capa.

Los errores (variación) esperados en la concentración de dióxido de carbono por encima de 80-90 km tienen un efecto de 1 a 4 K en la temperatura invertida. Los lídares (Fort Collins) sugieren un CO₂ menor que el utilizado del modelo TIME-GCM. Esto está en consonancia con las últimas medidas de CO₂ realizadas por los instrumentos ISAMS/UARS (*López-Puertas y col., 2000*) y CRISTA (*Kaufmann y col., 2002*). Bien una disminución de la constante $k_{\text{CO}_2-\text{O}}$ (consistente con las últimas medidas de laboratorio) o del CO₂ (consistente con ISAMS y CRISTA), o incluso de ambos, dan un mejor acuerdo. Hay que hacer notar que SABER puede producir perfiles de razón de mezcla de CO₂ en condiciones diurnas a partir de la inversión de las medidas en 4.3 μm . La intención futura es utilizar estos perfiles invertidos para realizar la inversión de temperatura cinética en condiciones nocturnas.

Este trabajo muestra la amplia capacidad de SABER para producir perfiles de temperatura con buena precisión en los que se reproduce la estructura térmica de la atmósfera terrestre. Estas medidas son de un gran potencial para evaluar el comportamiento de la atmósfera en cuanto a dinámica, química y balance energético se refiere.

Capítulo 5

Análisis de las medidas de SABER en $4.3 \mu\text{m}$ en condiciones nocturnas

Síntesis

Cuando el hidroxilo excitado vibracionalmente se relaja mediante colisiones con el nitrógeno molecular, excita a este último. En un segundo estadio, esa energía es transferida al dióxido de carbono mediante colisiones de intercambio de energía vibracional. Este proceso mixto es el principal responsable de la excitación de los estados del CO_2 en $4.3 \mu\text{m}$ en condiciones nocturnas no-aurorales. Las medidas realizadas por el radiómetro SABER en $4.3 \mu\text{m}$ en condiciones nocturnas son subestimadas aun introduciendo el proceso anterior como hasta ahora se había considerado. Tan sólo se pueden reproducir dichas medidas si se considera una mayor excitación de los niveles ν_3 del dióxido de carbono. En este trabajo, varios mecanismos han sido considerados y descartados. Para explicar las medidas de SABER se propone una excitación de $\text{N}_2(1)$ que es tres veces más eficaz que la convencional.

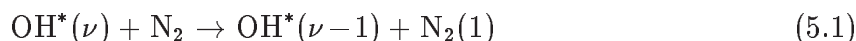
5.1. Introducción

El conocimiento preciso del comportamiento de las emisiones nocturnas en $4.3 \mu\text{m}$ del CO_2 en la mesosfera es necesario no sólo para entender mejor el balance energético en la alta atmósfera sino para invertir la concentración del CO_2 durante la noche. Los procesos de no-ETL que tienen lugar en condiciones nocturnas no son del todo conocidos. En concreto, los mecanismos de excitación vibracional del dióxido de carbono en la mesosfera están casi inexplorados.

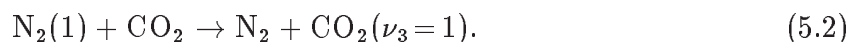
El dióxido de carbono excitado vibracionalmente en su modo de desplazamiento asimétrico ($\text{CO}_2(\nu_3)$) emite alrededor de $4.3 \mu\text{m}$. Esta emisión depende de las poblaciones de los estados vibracionales que, a su vez, están condicionadas por los procesos de excitación y desexcitación de dichos estados. Las medidas de radiancia realizadas en esta longitud de onda contienen por tanto información sobre estos procesos y se pueden utilizar para

determinar la importancia de los mismos. Por otra parte, la razón de mezcla del CO_2 se deriva a partir de estas emisiones y, para llevar a cabo esta inversión, es necesario modelar correctamente la radiancia. Luego el análisis de las emisiones nocturnas del dióxido de carbono se hace necesario no sólo para conocer los procesos de excitación y desexcitación del CO_2 en la atmósfera sino también para poder invertir la razón de mezcla del CO_2 .

Hasta 1978 se pensaba que los únicos mecanismos que actuaban por la noche en condiciones no aurorales para producir CO_2 excitado vibracionalmente en el modo ν_3 eran: 1) la excitación vibracional mediante colisiones térmicas, y 2) la absorción de radiación emitida en 4.3 μm por la tierra y por otras capas de la atmósfera. En ese año, *Kumer y col.* propusieron un mecanismo de excitación vibracional del dióxido de carbono a partir del hidroxilo vía nitrógeno molecular para explicar una medida en 4.3 μm realizada desde un cohete lanzado en Alaska. Dicho mecanismo consiste en la excitación vibracional del N_2 por parte del hidroxilo excitado vibracionalmente (OH^*) mediante el proceso



y una posterior transferencia de energía vibracional hacia el CO_2 mediante



Incluyendo este mecanismo como proceso fundamental de excitación de los niveles $\text{CO}_2(\nu_3)$ alrededor de 85 km de altura (región donde la concentración de OH es mayor), consiguieron reproducir de forma razonable los datos tomados por el cohete. Sin embargo, su estudio estaba basado en una única medida de radiancia en 4.3 μm y, además, no tenían conocimiento preciso ni de la temperatura, ni de la presión, ni de la emisión de OH^* (no se midieron simultáneamente).

Desde entonces, se han realizado algunas medidas de la emisión atmosférica nocturna en 4.3 μm (SPIRE, CIRRIS-1A, MSX), pero no se han alcanzado conclusiones firmes sobre este mecanismo. Por ejemplo, en el análisis realizado por *Wintersteiner y col.* [1990], aunque disponían de medidas de la distribución del OH^* en los estados vibracionales $\nu < 9$, se subestimaban las medidas nocturnas tomadas por SPIRE. En ese momento, incluyeron el mecanismo descrito utilizando las tasas colisionales convencionales.

El principal inconveniente del análisis de las emisiones nocturnas del CO_2 en 4.3 μm radica en que, para realizar un estudio exhaustivo y correcto, es necesario disponer de medidas simultáneas de la presión, la temperatura cinética (T_k), la distribución del OH en sus diferentes estados vibracionales y la radiancia en 4.3 μm . SABER, un radiómetro que mide las emisiones atmosféricas en el limbo, supone una oportunidad única para llevar a cabo este estudio ya que posee: 1) tres canales que miden en 15 μm , a partir de los cuales se obtienen perfiles de presión y temperatura cinética (perfiles p- T_k); 2) un canal que realiza medidas en 4.3 μm , sensible a las emisiones nocturnas hasta 120 km con una relación señal/ruido suficientemente elevada; y 3) dos canales que registran la emisión

proveniente del OH en 2 μm y en 1.6 μm , de las que se puede derivar la población de los niveles vibracionales OH(ν).

En este trabajo se ha llevado a cabo un estudio detallado del comportamiento de las emisiones del CO₂ en condiciones nocturnas mediante simulaciones de las medidas de SABER en 4.3 μm . Con esto, se pretende determinar los procesos que condicionan la excitación de los niveles vibracionales ν_3 del CO₂, principales responsables de las emisiones en esta región espectral en la atmósfera terrestre. En la Sección 5.2 se describe el comportamiento de las medidas realizadas por SABER en los canales del CO₂ en 4.3 μm y del OH. En la Sección 5.3 se presenta el método seguido para realizar las simulaciones. Finalmente, en la Sección 5.4 se discuten posibles mecanismos capaces de explicar las medidas en 4.3 μm .

5.2. Las medidas tomadas por SABER en 4.3 μm y 1.6/2.0 μm

Como ya se ha descrito en la Sección 1.4.1, SABER tiene canales que registran simultáneamente la emisión atmosférica en 4.3 (canal 7), 1.6 (canal 9) y 2.0 μm (canal 8) de forma continuada y con una elevada relación señal-ruido. En la Figura 5.1, se muestran perfiles típicos de la radiancia medida por SABER tanto en el canal 7 como en el canal 8 para tres eventos¹ del 3 de Marzo de 2002.

Los canales del OH en 1.6 y 2.0 μm miden en los intervalos espectrales de anchura 4435-5847 cm^{-1} y 5676-6476 cm^{-1} respectivamente (ver Figura 5.2). Están diseñados para medir la emisión resultante de la relajación radiativa de los niveles vibracionales del OH del tipo OH(ν) \rightarrow OH($\nu-2$), es decir, con $\Delta\nu=2$. En particular, el canal en 1.6 μm (canal 9) registra emisiones generadas por la desexcitación de los niveles OH($\nu=3-5$) y el canal en 2.0 μm (canal 8) de los niveles OH($\nu=7-9$). Por tanto, proporcionan información sobre la población de los niveles vibracionales OH(ν).

La concentración de hidroxilo es mayor durante la noche que durante el día. Esto se debe a que se forma a partir del ozono que es más abundante en condiciones nocturnas ya que, por ausencia de radiación solar, no se fotodisocia (ver Sección 1.2). Por otra parte, el OH se encuentra concentrado durante la noche en una capa situada aproximadamente a 85 km. A esto se debe la forma característica de los perfiles de radiancia en el limbo del OH. Debido a la casi total ausencia de este compuesto por encima de 95 km, la señal es muy débil a alturas elevadas. Entre los 85-90 km, región donde está concentrado el hidroxilo, aparece un máximo de radiancia. La señal registrada al observar la atmósfera por debajo de este pico proviene de la emisión de capas superiores, que, por la geometría

¹En esta memoria denominamos evento al conjunto de perfiles de radiancia medidos simultáneamente en los canales de SABER junto a los perfiles de los parámetros invertidos.

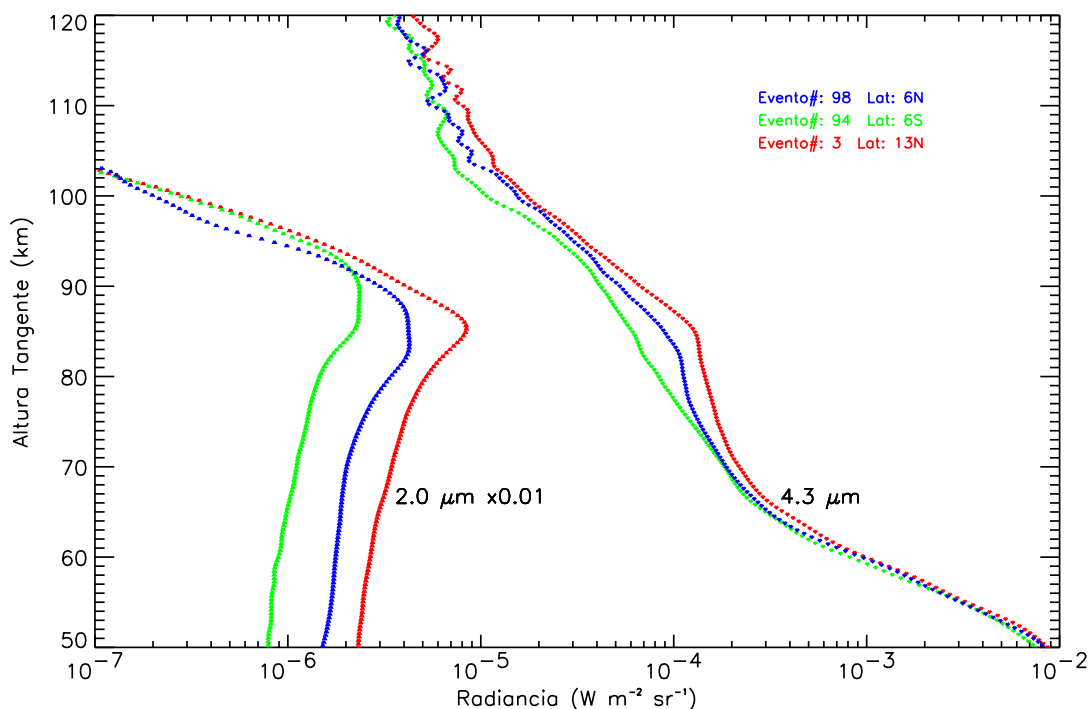


Figura 5.1: Perfiles típicos de radiancia medida por SABER en 2.0 μm (grupo de la derecha) y en 4.3 μm (grupo de la izquierda) en condiciones nocturnas. (Nota: Las radiancias en 2.0 μm están desplazadas un factor 10^{-2} para una mejor visualización de la figura.)

de las observaciones en el limbo, también contribuye a la señal medida.

El canal del CO_2 en 4.3 μm mide en la región espectral de anchura 2284-2409 cm^{-1} (ver Figura 1.9). Por tanto, proporciona información sobre la excitación de los niveles vibracionales $\text{CO}_2(\nu_3)$. Además, las emisiones producidas por el hidroxilo tras relajaciones radiativas del tipo $\text{OH}(\nu) \rightarrow \text{OH}(\nu-1)$ para $\nu=7-9$ son de una frecuencia incluida en el filtro

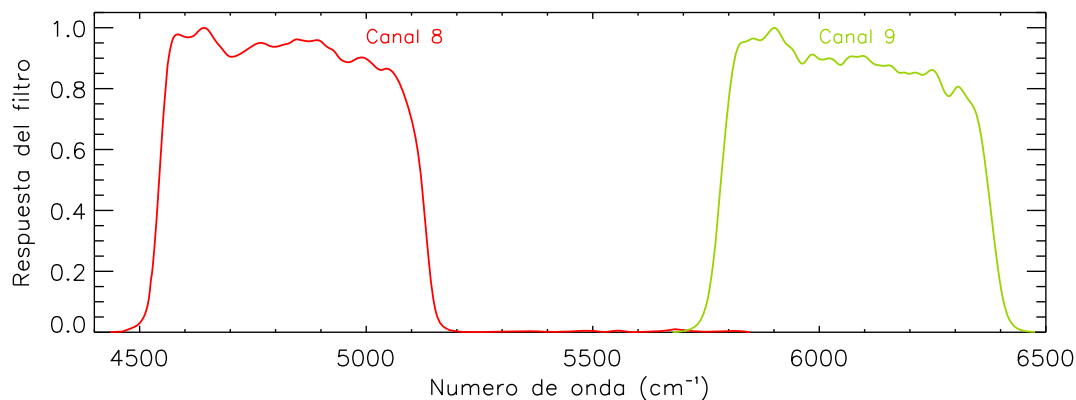


Figura 5.2: Respuesta en frecuencia de los canales del OH de SABER en 2.0 (canal 8; izda.) y 1.6 μm (canal 9; dcha.).

de dicho canal. Luego, no sólo las emisiones del CO_2 en 4.3 μm contribuyen a las radiancias medidas por SABER en el canal 7 sino que también lo hacen las emisiones del OH.

En la Figura 5.1, se observa una fuerte correlación entre la señal registrada en 2.0 μm y la registrada en 4.3 μm en torno al pico de radiancia del canal de OH. Esto sugiere que la emisión en 4.3 μm está relacionada con la distribución de las moléculas de OH en sus distintos estados vibracionales y, por ende, con la concentración del OH. Por otra parte, se observa que, cuando la radiancia en 4.3 μm es mayor alrededor de 85 km, también lo es a alturas superiores.

Las radiancias del CO_2 en 4.3 μm también están relacionadas con la temperatura cinética. En la Figura 5.3 se muestran perfiles de las radiancias alrededor de 2.0, 4.3 y 15 μm . Estas últimas dan cuenta de la T_k . En la baja mesosfera (alrededor de 60 km), las emisiones en 4.3 μm están directamente relacionadas con la T_k . Esto se debe a que los niveles ν_3 del CO_2 están en equilibrio termodinámico local (ETL) a estas alturas por lo que sus poblaciones son función de la T_k local y, por tanto, la emisión es mayor cuando la T_k es mayor. Sin embargo, en la alta mesosfera (alrededor de 85 km), la influencia de la T_k local sobre las emisiones en 4.3 μm es pequeña. Se observa que, siendo la señal en 15 μm (T_k) menor para el perfil 30 alrededor de 80 km, la radiancia en 4.3 μm es mayor.

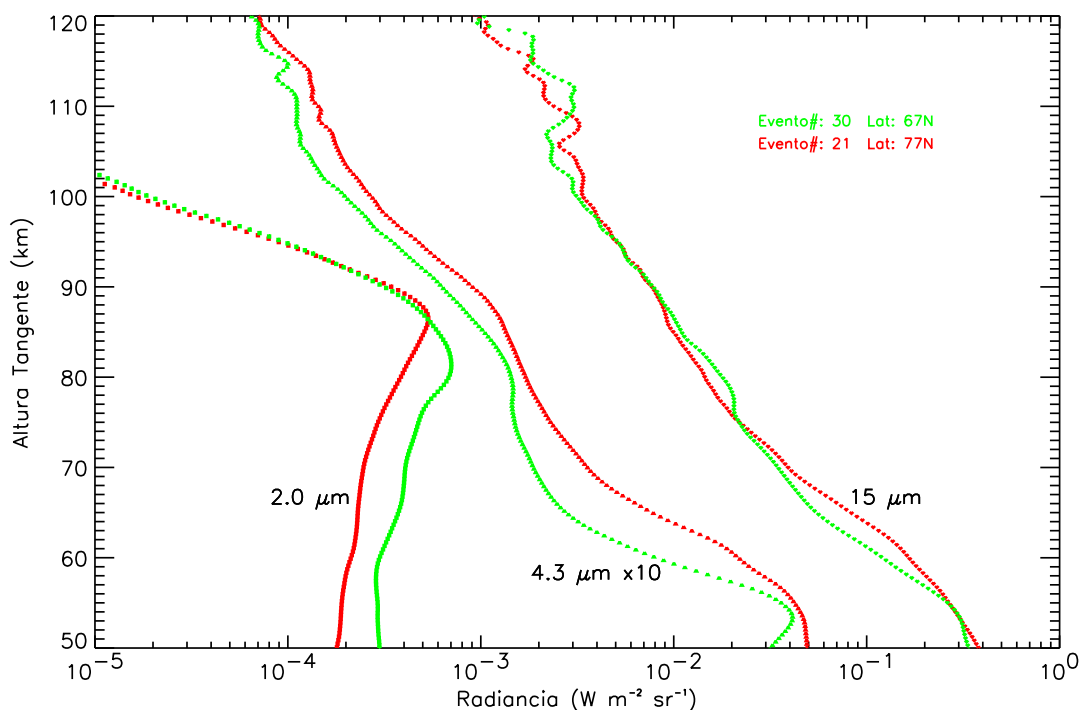


Figura 5.3: Perfiles de radiancia medida por SABER en 2.0 μm (grupo de la derecha), en 4.3 μm (grupo del centro) y en 15 μm (grupo de la izquierda) en condiciones nocturnas. (Nota: Las radiancias en 4.3 μm están desplazadas un factor 10.)

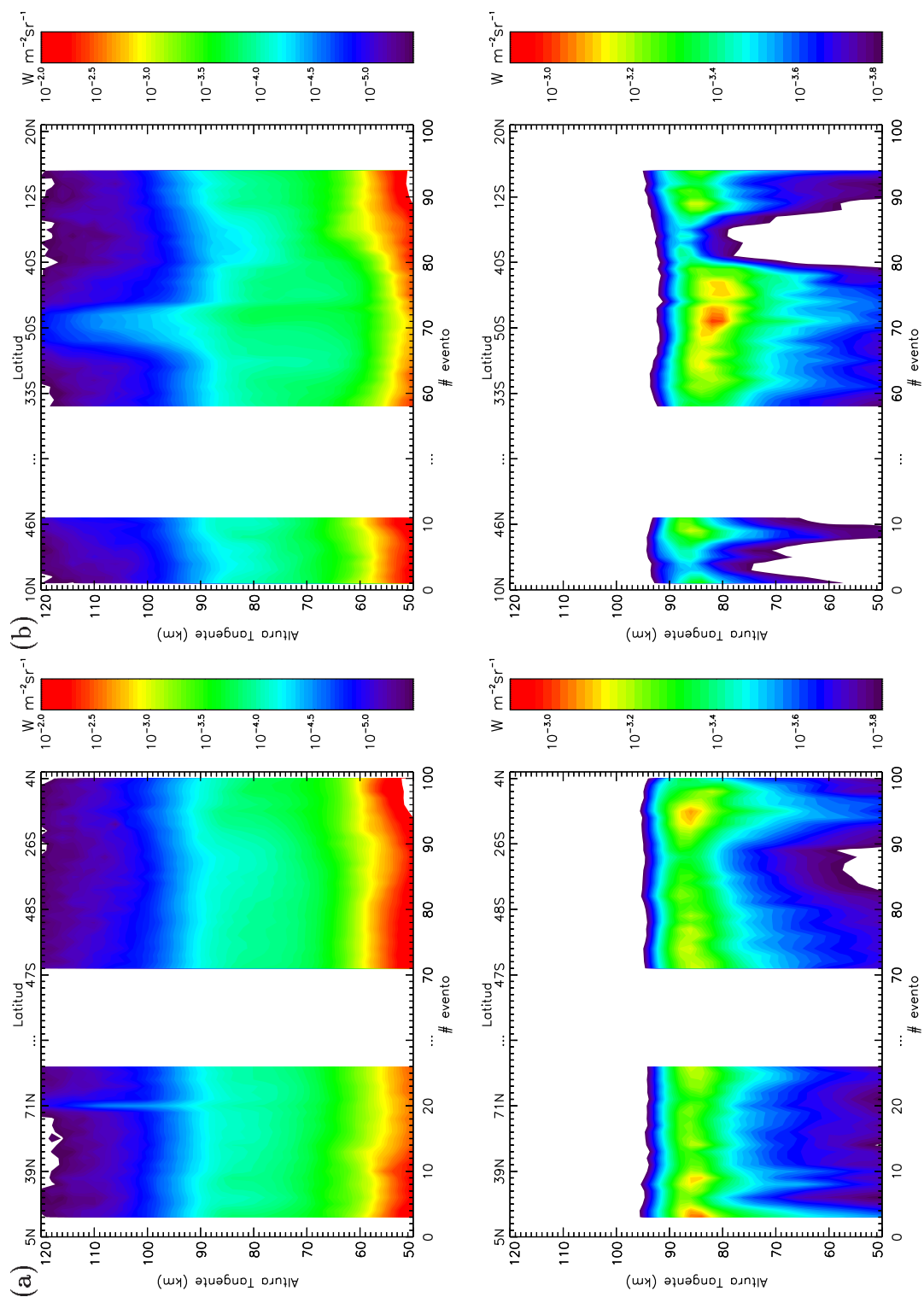


Figura 5.4: Radiancias en los canales de CO_2 en $4.3 \mu\text{m}$ (paneles superiores) y de OH en $2.0 \mu\text{m}$ (paneles inferiores) de SABER para los eventos nocturnos de las órbitas: (a) 1264 de 3 de Marzo; y (b) 3046 de 1 de Julio.

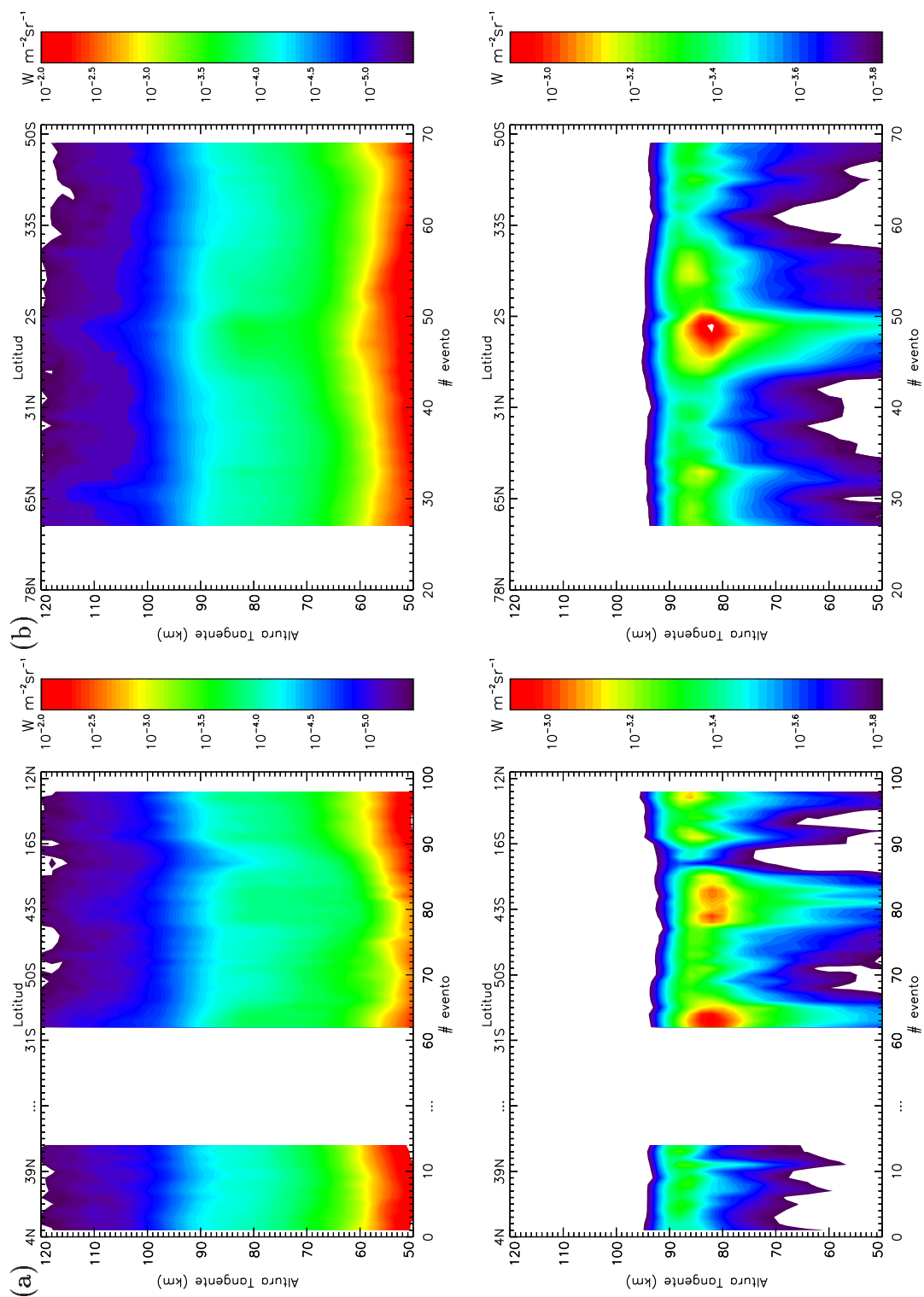


Figura 5.5: Radiancias en los canales de CO_2 en $4.3 \mu\text{m}$ (paneles superiores) y de OH en $2.0 \mu\text{m}$ (paneles inferiores) de SABER para los eventos nocturnos de las órbitas: (a) 3098 de 4 de Julio; y (b) 4272 de 22 de Septiembre.

Tabla 5.1: Días y órbitas seleccionadas para el estudio realizado.

Día	Órbita	Núm. de Eventos
3 Marzo 2002	1264	52
1 Julio 2002	3046	46(10) ^a
4 Julio 2002	3098	49
22 Sept. 2002	4272	82

^aEntre paréntesis se indica el núm. de eventos bajo condiciones aurorales.

En condiciones nocturnas, parte de la excitación del $\text{CO}_2(\nu_3)$ en esta región atmosférica se debe a absorción de radiación emitida en la baja mesosfera. En el caso del perfil 30, esta radiación es mayor ya que la T_k a 60 km es mayor (y los niveles ν_3 están en ETL a esa altura). Esto hace que, aun teniendo en cuenta que tanto la T_k local a 80 km como la concentración de OH^* son menores, la excitación de los niveles en $4.3 \mu\text{m}$ del CO_2 sea mayor para el evento 30.

En las Figuras 5.4 y 5.5, se representan las radiancias para los canales en 4.3 y $2.0 \mu\text{m}$

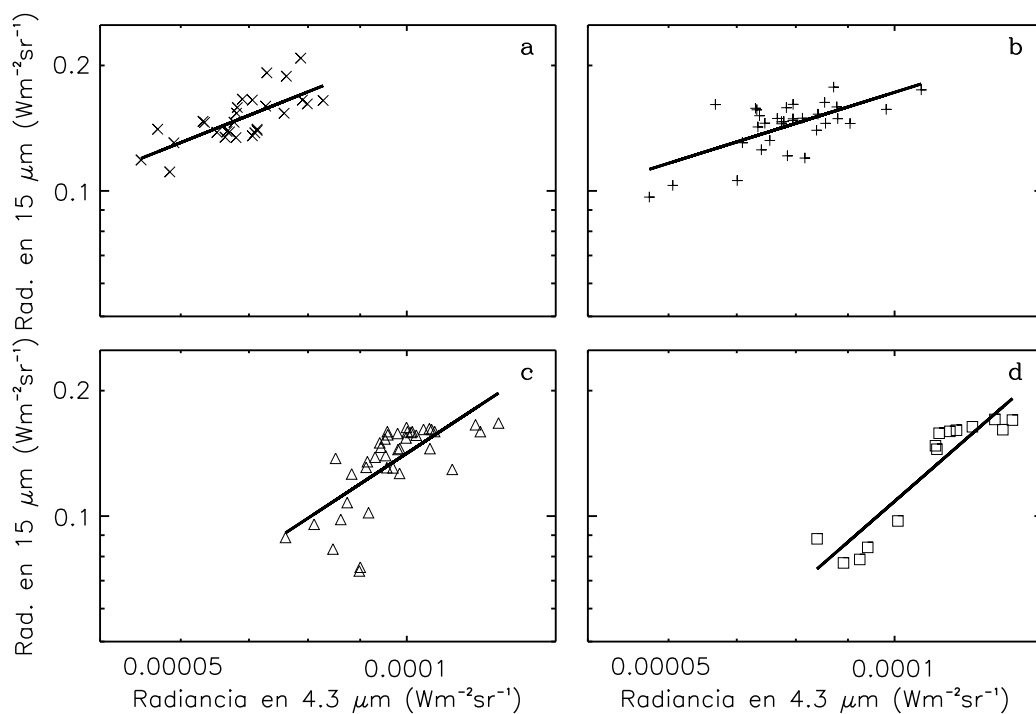


Figura 5.6: Correlación entre las radiancia nocturnas medidas por SABER en $4.3 \mu\text{m}$ (canal 7) a 85 km y las medidas en $15 \mu\text{m}$ (canal 1) entre 55 y 65 km para los eventos de las cuatro órbitas estudiadas manteniendo la radiancia en $2.0 \mu\text{m}$ a 85 km dentro de los intervalos (a) $[0.3,0.4]$; (b) $[0.4,0.5]$; (c) $[0.6,0.7]$; y (d) $[0.7,0.8]$ (en $\text{mWm}^{-2}\text{sr}^{-1}$). Se representan los ajustes por mínimos cuadrados con líneas continuas.

respectivamente para los eventos nocturnos de las 4 órbitas indicadas en la Tabla 5.1. Se observan regiones donde hay un aumento de la radiancia en 4.3 μm alrededor de la mesopausa relacionado con una alta señal en 2.0 μm (ver p.e. eventos 62-65 y 78-85 de la órbita 3098 o eventos 45-51 de la órbita 4272). La elevada señal en 4.3 μm registrada durante los eventos 65-75 de la órbita 3046 se debe a la existencia de actividad auroral.

El efecto de la T_k en la baja mesosfera sobre las emisiones en 4.3 μm en la alta mesosfera para los eventos nocturnos de las órbitas mostradas en la Tabla 5.1 se muestra en la Figura 5.6. En ella se representa la radiancia medida por SABER en 4.3 μm a 85 km en función de la media de las radiancias medidas en 15 μm entre 55 y 65 km. Para eliminar la dependencia de las emisiones en 4.3 μm en la alta mesosfera con la excitación proveniente del hidroxilo, se muestra la correlación entre las radiancias en 4.3 y 15 μm fijando la radiancia en 2.0 μm (en intervalos de 0.1 $\text{mWm}^{-2}\text{sr}^{-1}$), es decir, manteniendo la excitación del OH^* casi constante.

Para cada intervalo de radiancia en 2.0 μm , se aprecia una clara dependencia de las radiancias en 4.3 μm a 85 km con la radiancia en 15 μm en la baja mesosfera. Esto da cuenta de la dependencia de la excitación de los niveles ν_3 del CO_2 en la alta mesosfera con la temperatura cinética en regiones situadas por debajo que, como ya se ha mencionado, se debe a absorción del flujo radiativo ascendente.

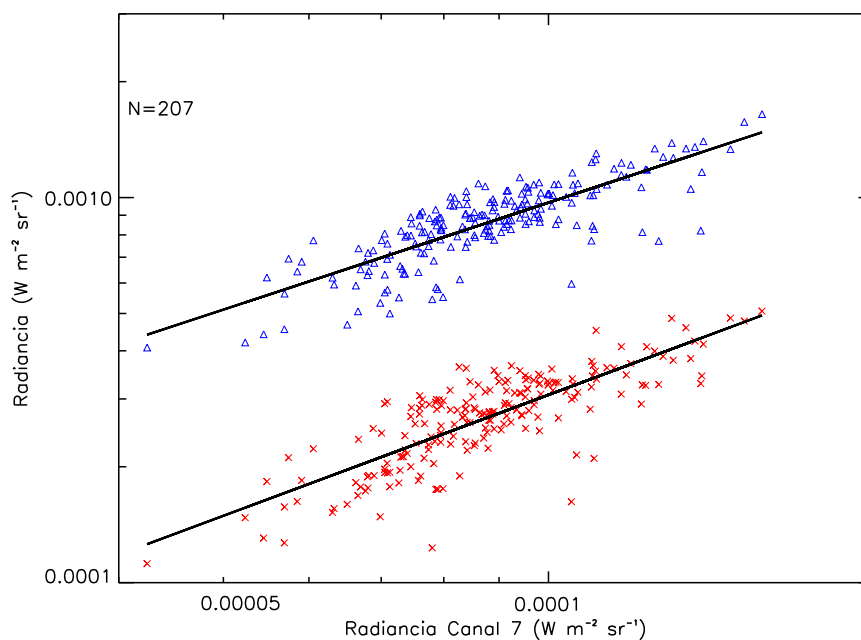


Figura 5.7: Correlación entre las radiancia nocturnas en 4.3 μm (canal 7) y las radiancias en 2.0 (canal 8; aspas) y en 1.6 μm (canal 9; triángulos) medidas por SABER a 85 km para los eventos de las cuatro órbitas estudiadas. Los ajustes por mínimos cuadrados se representan con la línea negra. (Nota: Las radiancias del canal 8 están desplazadas un factor 0.5.)

Sin embargo, según se observa en las figuras, la dependencia de la radiancia del canal del CO_2 en $4.3 \mu\text{m}$ con la del canal del OH es más fuerte que con el canal de temperatura.

Para determinar el grado de importancia de la correlación entre las emisiones en $4.3 \mu\text{m}$ y en 2.0 y $1.6 \mu\text{m}$, se ha representado la radiancia medida en el canal 7 a 85 km en función de las medidas en los canales 8 y 9 a dicha altura para los datos correspondientes a todos eventos nocturnos estudiados (ver Figura 5.7). Se observa de manera sistemática una relación entre las emisiones registradas alrededor de $4.3 \mu\text{m}$ (canal 7) y las registradas alrededor de 2.0 y $1.6 \mu\text{m}$ (canales 8 y 9 respectivamente). Esto confirma que existe una relación entre la excitación del sistema OH^* y la radiancia en $4.3 \mu\text{m}$, que podría deberse bien a la contribución directa de la emisión de los niveles OH^* en $4.3 \mu\text{m}$, o bien a excitación de los niveles $\text{CO}_2(\nu_3)$ por el OH^* ya sea directa o indirectamente.

Para identificar los mecanismos responsables de estas emisiones alrededor de $4.3 \mu\text{m}$ se han realizado simulaciones introduciendo varios procesos hasta conseguir explicar las radiancias medidas.

5.3. Simulaciones de las emisiones nocturnas en $4.3 \mu\text{m}$

Con el fin de entender las medidas nocturnas de SABER en $4.3 \mu\text{m}$, se han realizado simulaciones de perfiles de radiancia para cada uno de los eventos nocturnos de los días mostrados en la Tabla 5.1. Para ello, es necesario conocer las poblaciones de los niveles vibracionales del $\text{CO}_2(\nu_3)$ y $\text{OH}(\nu=1-9)$.

Tanto los niveles del CO_2 como los del OH se encuentran alejados de las condiciones de equilibrio termodinámico local (ETL) en la mesosfera y la baja termosfera (región MBT). Modelar su población de manera adecuada necesita pues de códigos que consideren de manera rigurosa todos los procesos (tanto colisionales como radiativos) de excitación y desexcitación de la molécula en cuestión. Una vez calculadas las poblaciones, también es necesario utilizar un modelo de transferencia radiativa (*modelo directo*) que soporte cálculos de radiancias en el limbo en condiciones de no-equilibrio termodinámico local (no-ETL).

Para llevar a cabo los cálculos, se han de incluir perfiles de presión y temperatura, de abundancia de nitrógeno molecular, de oxígeno atómico y molecular, y de dióxido de carbono. Además, se requiere conocer simultáneamente la distribución del hidroxilo en sus estados vibracionales $\nu=1-9$ para los eventos simulados.

5.3.1. Cálculo de perfiles de radiancia

En la Figura 5.8 se ilustra el esquema seguido para calcular las radiancias en $4.3 \mu\text{m}$ en condiciones nocturnas.

Haciendo uso de los datos de SABER en $15 \mu\text{m}$, se invierte la presión y la temperatura cinética considerando no-ETL. SABER produce de forma operacional perfiles p- T_k en no-ETL utilizando el algoritmo desarrollado por *Mertens y col.* [2001] (ver Sección 2.4.2). La temperatura cinética se invierte de este modo con una precisión de entre 1 y 2 K por debajo de 70 km y de ~ 4.5 K a 100 km.

En cuanto a la composición de la atmósfera, se necesita información sobre la abundancia del dióxido de carbono, del nitrógeno molecular, del oxígeno molecular y del oxígeno atómico. El modelo TIME-GCM (*Roble y Ridley, 1994; Roble, 2000*) tiene en cuenta la variabilidad de las concentraciones de los compuestos atmosféricos y de la estructura térmica para diferentes latitudes y épocas del año. Por esta razón, y teniendo en cuenta la carencia de medidas simultáneas de [O] y [CO₂] (en condiciones nocturnas), se han tomado los perfiles de razón de mezcla de dichos compuestos de las predicciones del modelo TIME-GCM para cada una de las geolocalizaciones de las medidas. También se ha tomado de ese mismo modelo la temperatura y la presión en las regiones donde no se tienen medidas de SABER, esto es, por encima de 105 km. En las Figuras 5.9 y 5.10 se ilustran la temperatura cinética y la razón de mezcla del CO₂ utilizadas en este trabajo para las órbitas consideradas.

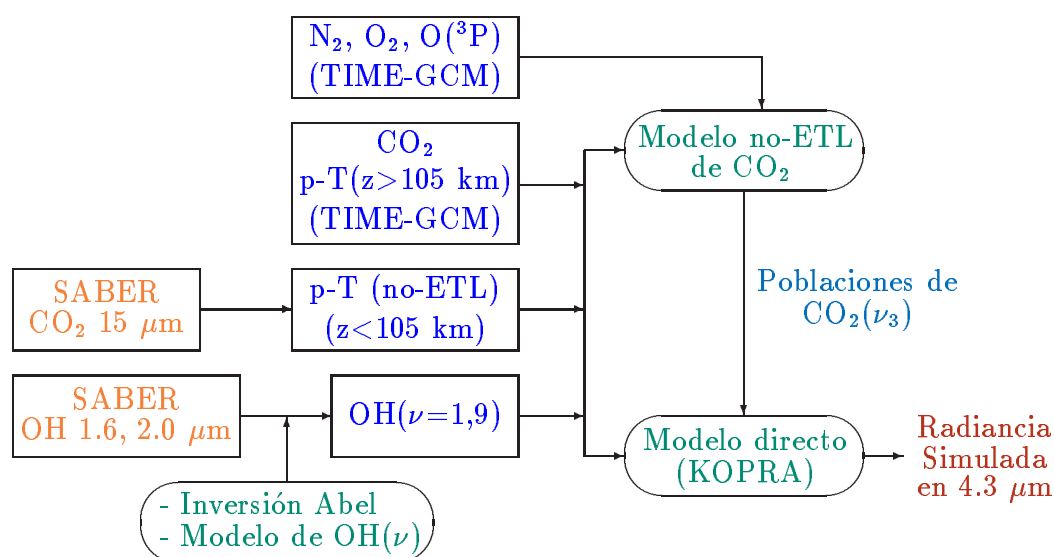


Figura 5.8: Esquema utilizado para realizar simulaciones de radiancia en $4.3 \mu\text{m}$.

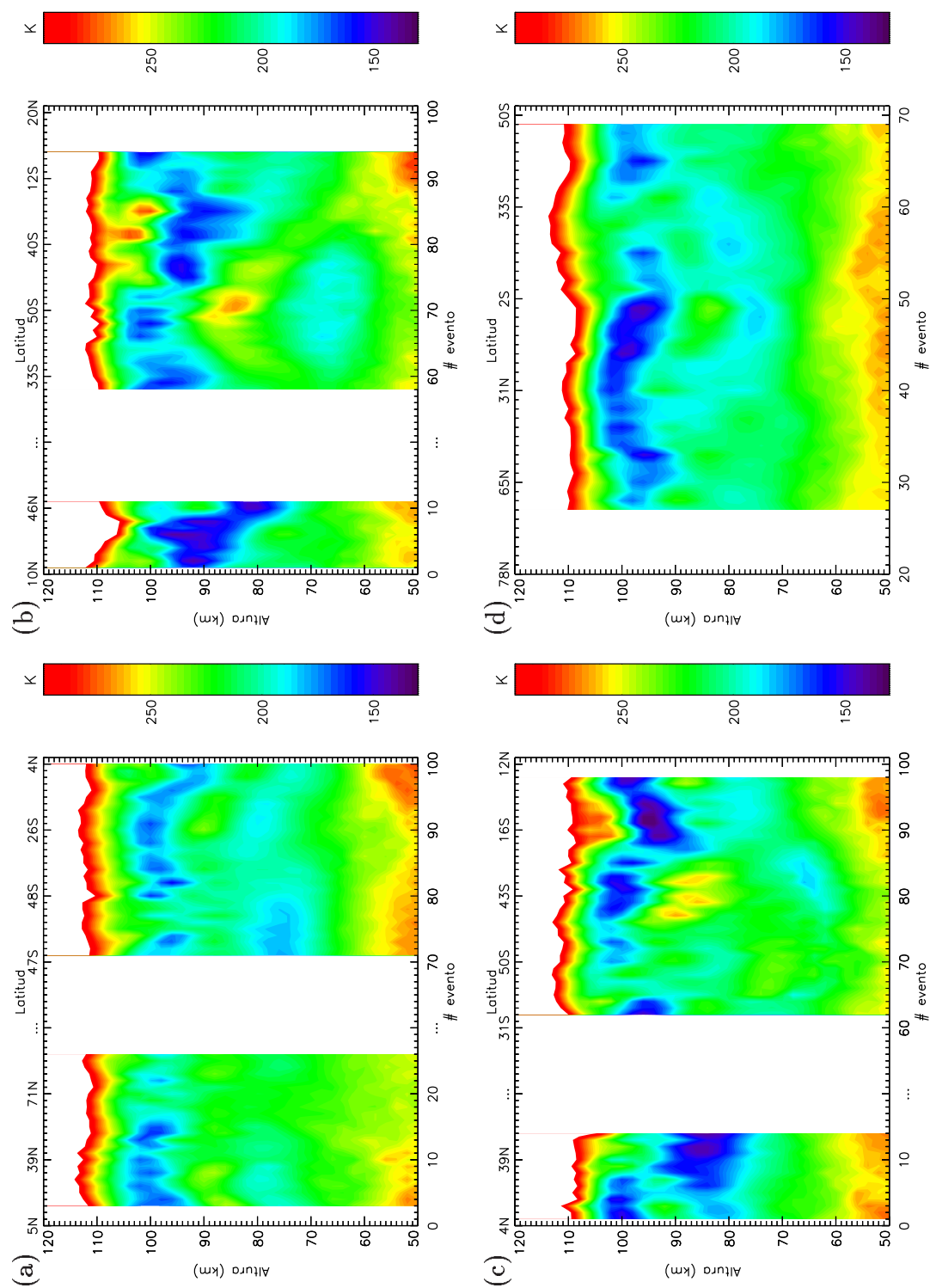


Figura 5.9: Temperatura cinética para los eventos nocturnos de las órbitas consideradas. (a) Órbita 1264 de 3 de Marzo; (b) Órbita 3046 de 1 de Julio; (c) Órbita 3098 de 4 de Julio; y (d) Órbita 4272 de 22 de Septiembre;

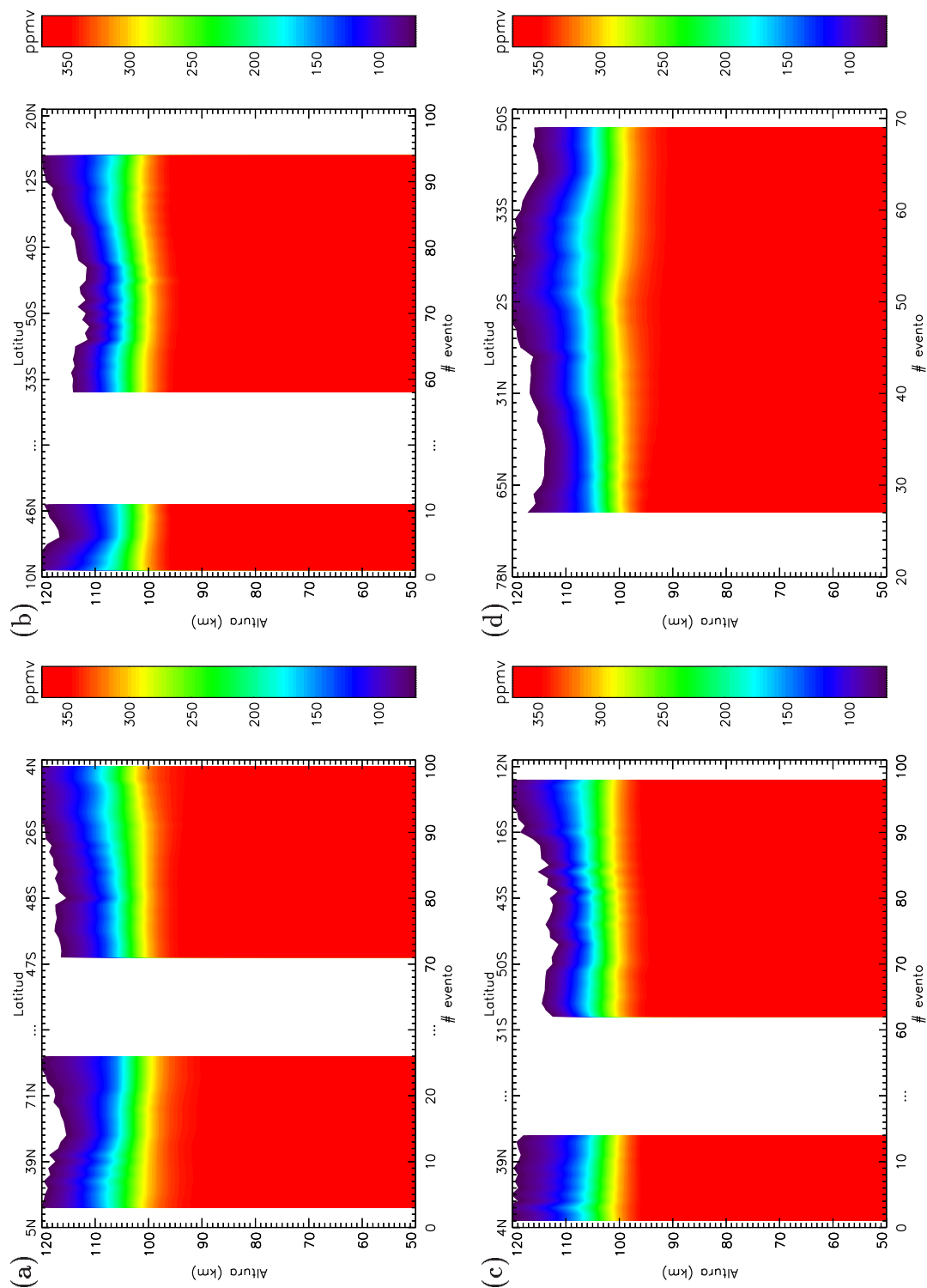


Figura 5.10: Razón de mezcla de CO_2 para los eventos nocturnos de las órbitas consideradas. (a) Órbita 1264 de 3 de Marzo; (b) Órbita 3046 de 1 de Julio; (c) Órbita 3098 de 4 de Julio; y (d) Órbita 4272 de 22 de Septiembre;

Poblaciones de OH(ν)

A partir de las medidas simultáneas de la emisión del OH* de SABER en 1.6 y 2.0 μm , se han derivado las distribuciones OH($\nu=1-9$) mediante la inversión Abel para cada uno de los eventos. Tal y como se describe con detalle en la Sección 2.5, se utiliza una distribución OH* de referencia [OH(ν)]^{ref} de modo que la suma de las poblaciones de los niveles [OH(ν)] a la altura j se calculan para cada evento mediante la Ecuación 2.70.

Para deducir las poblaciones de cada uno de los niveles OH($\nu=1,9$) para cada evento se necesitarían nueve medidas de sus emisiones en regiones espectrales diferentes. El instrumento SABER sólo dispone de dos canales de OH. El primero mide fundamentalmente las emisiones de las bandas 9 \rightarrow 7 y 8 \rightarrow 6 y en menor medida 7 \rightarrow 6; y el segundo las de las bandas 5 \rightarrow 3, 4 \rightarrow 2 y 3 \rightarrow 1. Por ello, para cada uno de los eventos, se han derivado las poblaciones de los niveles vibracionales mediante

$$[\text{OH}(\nu)]_j = \frac{\sum_i (G^{-1})_{ji} L_i}{\sum_k (G^{-1})_{jk} L_k^{\text{ref}}} [\text{OH}(\nu)]_j^{\text{ref}}, \quad (5.3)$$

donde L es la radiancia medida en el canal en 2.0 μm (canal 8) para $\nu=6-9$ (niveles más energéticos) y en el canal en 1.6 μm (canal 9) para $\nu=1-5$ (niveles menos energéticos), L^{ref} es la radiancia calculada para la distribución de referencia [OH(ν)]^{ref} y G^{-1} es la inversa de la matriz de factores geométricos característicos de la observación en el limbo.

Aquí, la distribución de referencia [OH(ν)]^{ref} de la Ecuación 5.3 se ha calculado haciendo uso de un modelo químico del hidroxilo similar al desarrollado por *Makhlouf* y

Tabla 5.2: Procesos de producción y pérdida de OH(ν) incluidos en el modelo fotoquímico.

Proceso		Constante de reacción ^a
H+O ₃ \rightarrow OH(ν)+O ₂	$\nu=6-9$	$1.4 \times 10^{-10} \exp(-470/T) b(\nu)$
O+HO ₂ \rightarrow OH(ν)+O ₂	$\nu=0-3$	$3.0 \times 10^{-11} d(\nu)$
O+O ₂ +M \rightarrow O ₃ +M		$6.0 \times 10^{-34} (300/T)^{2.3}$
H+O ₂ +M \rightarrow HO ₂ +M		$5.7 \times 10^{-32} (300/T)^{1.6}$
O ₃ +HO ₂ \rightarrow OH($\nu=0$)+2O ₂		1.1×10^{-14}
OH($\nu=0$)+O ₃ \rightarrow HO ₂ +O ₂		$1.6 \times 10^{-12} \exp(-940/T)$
OH($\nu=0$)+HO ₂ \rightarrow H ₂ O+O ₂		4.8×10^{-11}
OH(ν)+O \rightarrow H+O ₂	$\nu=0-9$	$a_8(\nu) \times 10^{-11}$
OH(ν)+O ₂ \rightleftharpoons OH($\nu-1$)+O ₂	$\nu=0-9$	$a_9(\nu) \times 10^{-13}$
OH(ν)+N ₂ \rightleftharpoons OH($\nu-1$)+N ₂	$\nu=1-9$	ver Tabla 5.4
OH(ν) \rightarrow OH($\nu-n$)+h ν	$\nu=1-9, n=1-6, \nu-n \geq 0$	Coef. Einstein (Tabla 5.3)

^aTasas en el sentido directo del proceso en $\text{cm}^3 \text{s}^{-1}$ para reacciones entre dos moléculas y en $\text{cm}^6 \text{s}^{-1}$ entre tres. T es la temperatura en K. $b(9)=0.48, b(8)=0.27, b(7)=0.17, b(6)=0.08, b(\nu)=0$ para $\nu=0-5$. $d(0)=0.52, d(1)=0.34, d(2)=0.13, d(3)=0.01, d(\nu)=0$ para $\nu=4-9$. $a_8(0)=3.9, a_8(1)=10.5, a_8(\nu)=25$ para $\nu=2-9$. $a_9(1)=1.3, a_9(2)=2.7, a_9(3)=5.2, a_9(4)=8.8, a_9(5)=17, a_9(6)=30, a_9(7)=54, a_9(8)=98, a_9(9)=170$.

col. [1995]. Este modelo calcula las densidades de los estados ro-vibracionales del hidroxilo en estado estacionario. Para ello, se considera el conjunto de procesos de producción y pérdida que se muestra en la Tabla 5.2.

El primer proceso (reacción de Bates-Nicolet) es el principal mecanismo de producción de estos estados. El segundo proceso ocupa el segundo puesto en orden de importancia en cuanto a la producción de moléculas en los estados $\nu=0-3$ durante el día. Sin embargo, algunos autores consideran que esta reacción no produce OH excitado vibracionalmente (Llewellyn y col., 1978) y otros proponen que se produce en los estados $\nu=3-6$ (López-Moreno y col., 1987). En cualquier caso, la producción de OH* mediante este mecanismo es despreciable bajo condiciones nocturnas.

Otro de los procesos cuyo tratamiento es algo controvertido es la muerte súbita del OH(ν) mediante la reacción química con el oxígeno atómico. Este proceso, a pesar de que el oxígeno atómico es mucho menos abundante que el nitrógeno y el oxígeno moleculares alrededor del pico de hidroxilo (~ 85 km), es muy importante para el cálculo de las

Tabla 5.3: Características espectrales de los estados vibracionales del hidroxilo considerados en el modelo de OH.

ν	espín	Energía [cm^{-1}]	Coeficientes de Einstein [s^{-1}] ^a					
			espín 1/2			espín 3/2		
			$\Delta\nu=3$	$\Delta\nu=2$	$\Delta\nu=1$	$\Delta\nu=3$	$\Delta\nu=2$	$\Delta\nu=1$
1	1/2	3754			0.140			18.61
	3/2	3568			17.53			0.341
2	1/2	7155		0.132	0.159		11.31	26.09
	3/2	6971		10.80	24.65		0.166	0.487
3	1/2	10392	0.015	0.340	0.115	1.265	31.08	25.46
	3/2	10211	1.216	29.83	24.06	0.018	0.439	0.495
4	1/2	13467	0.055	0.578	0.056	4.786	56.54	19.76
	3/2	13287	4.619	54.51	18.61	0.066	0.768	0.415
5	1/2	16380	0.123	0.807	0.023	11.30	84.90	12.17
	3/2	16201	10.96	82.21	11.32	0.149	1.111	0.292
6	1/2	19128	0.219	0.996	0.049	21.34	113.3	5.998
	3/2	18952	20.77	110.2	5.385	0.029	1.428	0.163
7	1/2	21711	0.340	1.118	0.159	35.18	138.4	4.726
	3/2	21536	34.39	135.1	4.225	0.427	1.685	0.060
8	1/2	24122	0.483	1.145	0.361	53.16	155.5	11.66
	3/2	23950	52.18	152.5	11.16	0.620	1.839	0.007
9	1/2	26356	0.656	1.039	0.635	76.74	157.3	28.70
	3/2	26186	75.63	154.8	28.13	0.862	1.826	0.016
10	1/2	28401	0.864	0.792	0.929	107.9	139.0	54.53

^aDe Turnbull y Lowe [1989].

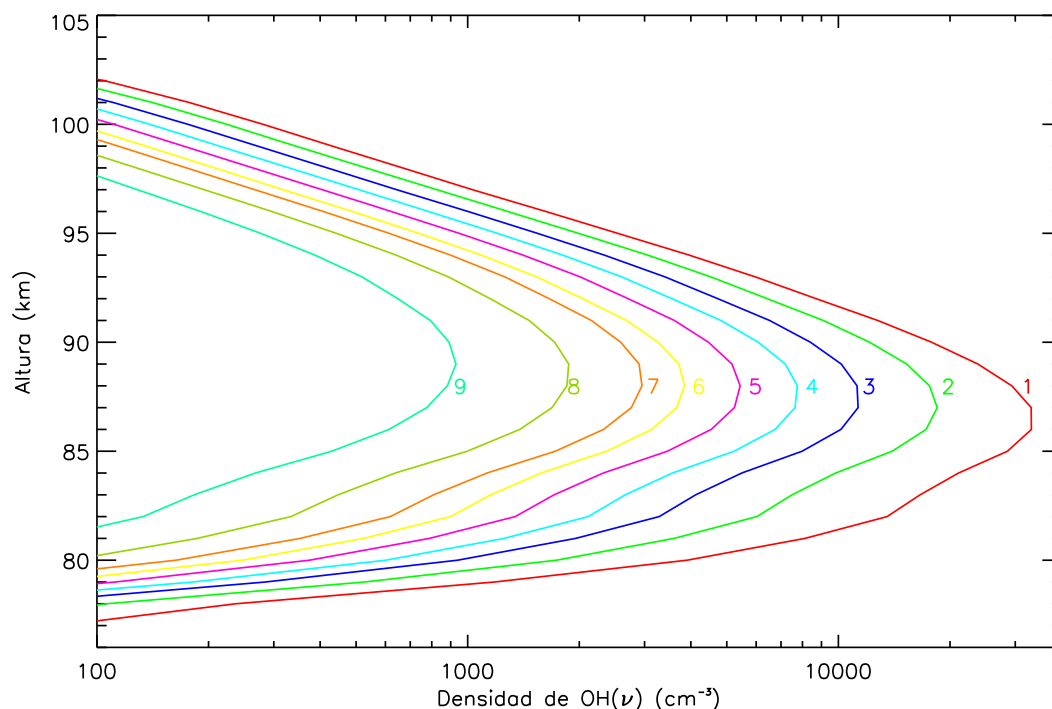


Figura 5.11: Densidades típicas nocturnas de los estados vibracionales $\text{OH}(\nu=1-9)$ calculadas con el modelo fotoquímico del hidroxilo.

poblaciones de los estados vibracionales del OH ya que el oxígeno atómico es muy eficaz desactivándolos. Los valores para esta constante de reacción sugeridos en la bibliografía varían desde 2.2×10^{-11} hasta $4.0 \times 10^{-10} \text{cm}^3 \text{s}^{-1}$ y dan lugar a variaciones del 50 % en las densidades de los estados menos energéticos (*Makhlouf y col.*, 1995). No obstante, si las poblaciones de estos estados se derivan escalando los resultados obtenidos con este modelo mediante medidas de las emisiones del hidroxilo, el impacto de esta constante sobre la densidad total invertida $\sum_{\nu} \text{OH}(\nu)$ no es de gran importancia aunque sí lo es sobre la distribución vibracional.

El resto de procesos químicos de producción y pérdida son de poca importancia aunque son necesarios para conservar la densidad total de hidroxilo.

Por otra parte, no se consideran otros procesos radiativos, además de la desexcitación radiativa, ya que las bandas vibracionales del radical hidroxilo son ópticamente delgadas a cualquier altura.

En este modelo se incluyen diez estados vibracionales (con doble degeneración de espín). En la Tabla 5.3 se muestran los datos espectrales y los correspondientes coeficientes de Einstein de emisión espontánea para los dos estados de espín de cada estado vibracional y las posibles transiciones de cada nivel, tanto mono-cuanto como multi-cuanto (en las que se pone en juego más de un cuanto vibracional) con $\Delta\nu \leq 3$ (*Turnbull y Lowe*, 1989).

Se han utilizado las tasas de relajación del OH en colisiones con O_2 y N_2 sugeridas

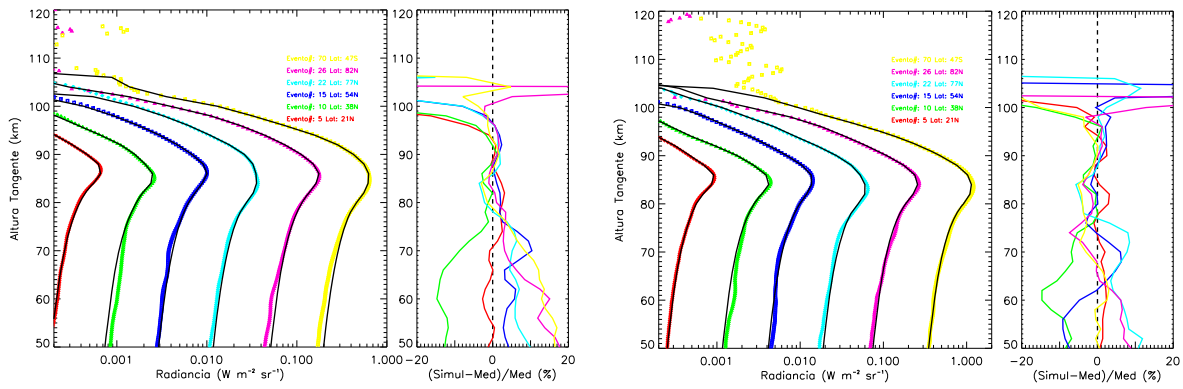


Figura 5.12: Radiancias medidas y simuladas junto a diferencias entre ellas en los canales de 2.0 (izda.) y $1.6 \mu\text{m}$ (dcha) para eventos de la órbita 1264.

por *Adler-Golden* [1997] considerando en ambos casos relajación mono-cuanto, es decir, que el hidroxilo excitado se relaja hacia el nivel vibracional inmediatamente inferior. Con este modelo, se han calculado las poblaciones de los estados de hidroxilo de referencia $[\text{OH}(\nu)]^{ref}$. En la Figura 5.11 se muestra un ejemplo típico de las densidades de sus nueve primeros estados vibracionales. El caso presentado corresponde a equinoccio en latitudes medias. Las concentraciones de hidrógeno atómico y ozono son del modelo fotoquímico de *García y Solomon* [1994]. Con estas poblaciones de referencia del $\text{OH}(\nu)$ se han construido los perfiles de radiancia de referencia L_{ref} en 2.0 y $1.6 \mu\text{m}$ utilizando el modelo de transporte radiativo línea-a-línea KOPRA (*Stiller y col.*, 2001) descrito en la Sección 2.2.1).

Se ha comprobado la calidad de las inversiones de las poblaciones de $\text{OH}(\nu)$ cotejando las radiancias calculadas con las poblaciones de OH^* derivadas con las medidas de SABER, tanto en 2.0 como en $1.6 \mu\text{m}$, encontrando diferencias menores del 5% en la región donde se sitúa la capa de hidroxilo (ver Figura 5.12).

Poblaciones del $\text{CO}_2(\nu_3)$

La temperatura, la presión, las concentraciones de CO_2 , N_2 , O_2 , y O , y las poblaciones $\text{OH}(\nu)$ descritas hasta ahora constituyen la entrada para el modelo de cálculo de temperaturas vibracionales (T_v) del CO_2 (ver Figura 5.8). El modelo de no-ETL del CO_2 utilizado en este trabajo es el desarrollado por *López-Puertas y col.* [1986,1998a] (con las actualizaciones descritas en *López-Puertas y Taylor*, 2001) en el que se incluyen (ver Sección 2.3 y Tabla 3.3 en pág. 71),

- El conjunto completo de las bandas vibracionales ν_3 ;
- Procesos colisionales tipo vibración-vibración (V-V) incluyendo los acoplamientos $\text{CO}_2(\nu_3) \rightleftharpoons \text{N}_2(1)$ y $\text{CO}_2(\nu_3) \rightleftharpoons \text{CO}_2(\nu'_3)$;
- Procesos colisionales tipo vibración-traslación (V-T);

Tabla 5.4: Tasa de colisiones $\text{OH}(\nu)\text{-N}_2(1)$ (proceso 5.1) para los niveles vibracionales $\nu=1\text{-}9$ del hidroxilo según *Adler-Golden* [1997].

$k_\nu [10^{14} \text{cm}^3 (\text{s}^{-1})]$								
$\nu=1$	$\nu=2$	$\nu=3$	$\nu=4$	$\nu=5$	$\nu=6$	$\nu=7$	$\nu=8$	$\nu=9$
0.6	1.0	1.7	3.0	5.2	9.1	16.0	70.0	48.0

- Procesos radiativos: intercambio entre capas atmosféricas, flujo ascendente proveniente del límite inferior del modelo; y
- Transferencia vibracional del OH^* al $\text{CO}_2(\nu_3)$ (mediante los procesos 5.1 y 5.2).

Este modelo ha sido ampliamente utilizado en el análisis de medidas de satélites y recientemente comparado con el modelo del AFGL (*Wintersteiner y col.*, 1992) y el modelo genérico de no-ETL GRANADA (*Funke y col.*, 2004) encontrándose diferencias menores de 0.5 K y, sólo para algunos niveles y algunas alturas, picos de 1 K.

Para la ejecución del modelo en este trabajo se han situado los límites inferior y superior de la atmósfera en 40 y 160 km respectivamente. Por otra parte, para el caso nominal, se han fijado las tasas de colisiones $\text{OH}(\nu)\text{-N}_2(1)$ (proceso 5.1) según sugiere *Adler-Golden*

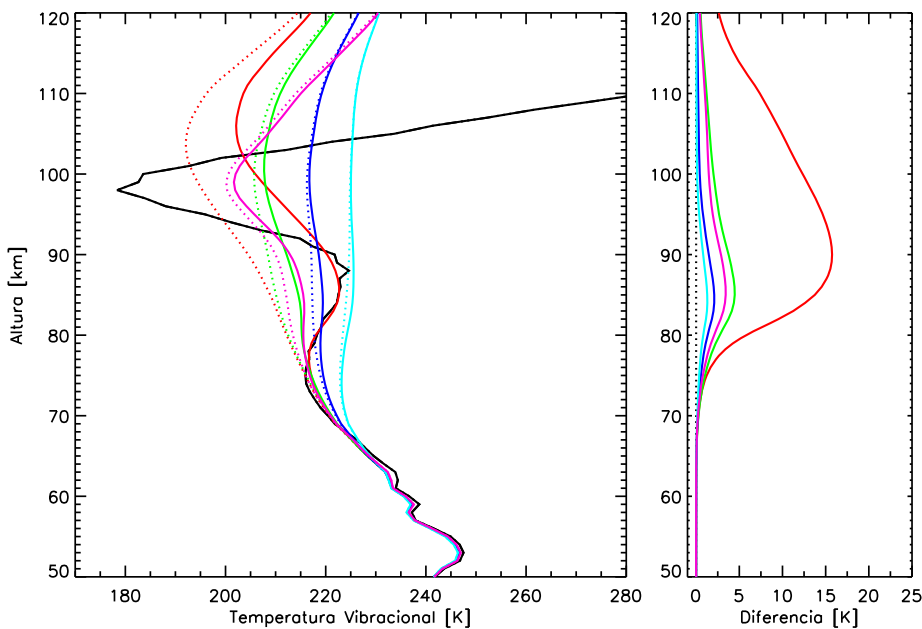


Figura 5.13: Temperaturas vibracionales de los principales niveles del CO_2 en $4.3 \mu\text{m}$ con (línea sólida) y sin (línea punteada) la excitación por el OH^* vía $\text{N}_2(1)$ tratada convencionalmente (panel izdo.) y diferencias al considerar dicho efecto (panel dcho.) (negro: T_k ; rojo: 00^01 del isótopo 626; verde: 00^01 del isótopo 636; azul: 00^01 del isótopo 628; celeste: 00^01 del isótopo 627; y rosa: 01^11 del isótopo 626).

[1997] (ver Tabla 5.4) y se ha tomado la constante de colisiones $\text{CO}_2(\nu_3)\text{-N}_2(1)$ (proceso 5.2) igual a $5 \times 10^{-13} \sqrt{300/T} \text{ cm}^3 \text{ s}^{-1}$ (Inoue y Tsuchiya, 1975).

En la Figura 5.13 se muestran las temperaturas vibracionales de los niveles del CO_2 responsables de las emisiones en 4.3 μm para las condiciones del evento 22 de la órbita 1264 del día 3 de Marzo de 2002 y el efecto sobre las mismas al incluir la excitación del OH^* a través del N_2 . Hasta 65 km, los niveles $\text{CO}_2(\nu_3)$ se encuentran en ETL (situación en la que $T_v = T_k$). Por encima de esa altura empiezan a separarse de dichas condiciones debido a la escasez de colisiones suficientes para redistribuir eficazmente la energía cinética en energía vibracional. Aparte de la absorción de energía originada en la estratopausa y la baja mesosfera, el principal mecanismo de excitación de los niveles ν_3 entre 70 y 95 km en ausencia de radiación solar es el intercambio de energía vibracional desde el hidroxilo excitado vía $\text{N}_2(1)$. Además, la energía suministrada por este mecanismo se redistribuye entre los niveles en 4.3 μm de todos los isótopos del CO_2 mediante colisiones tipo V-V. Este proceso afecta sobre todo a la T_v del nivel 00⁰1 del isótopo 626 del CO_2 que, en este caso, aumenta más de 15 K a 90 km. En menor medida, afecta a la T_v de los niveles 00⁰1 del resto de los isótopos, que aumentan entre 5 y 1 K. Por esto, aún en este ejemplo algo desfavorable en el que la T_k es elevada en la alta mesosfera y, por tanto, los efectos de no-ETL son menos importantes, considerar este proceso en los cálculos de temperaturas vibracionales en condiciones nocturnas es crucial. Por encima de 100 km, los estados del CO_2 se excitan fundamentalmente por absorción del flujo radiativo ascendente originado en capas inferiores. De hecho, comparando las Figuras 5.13 y 5.11 se puede observar cómo el efecto local (donde se encuentra la capa de hidroxilo) del mecanismo de excitación por parte del OH^* se transmite a capas superiores.

Cálculo de radiancias en 4.3 μm

Una vez determinadas las poblaciones de los niveles vibracionales $\text{CO}_2(\nu_3)$, $\text{OH}(\nu)$, y haciendo uso de los perfiles de p- T_k y de las razones de mezcla del CO_2 y del OH , se han calculado las radiancias en el canal de 4.3 μm de SABER durante la noche. Para realizar estos cálculos, se ha elegido el modelo directo de transferencia radiativa línea-a-línea *KOPRA* (Sección 2.2.1), debido a su gran versatilidad y su capacidad para efectuar cálculos de radiancias integradas en el limbo, incluyendo emisiones de varias moléculas a la vez de las que se permite seleccionar las bandas de interés tanto en emisión como en absorción. En las Tablas 5.5 y 5.6 se muestran las bandas del CO_2 y del OH que se han incluido en dichos cálculos junto a sus principales características espectrales. Los cálculos se han efectuado situando el límite superior de la atmósfera en 160 km.

En las Figuras 5.14 y 5.15 se muestran las contribuciones absoluta y relativa respectivamente de cada banda del CO_2 a la radiancia total del canal de SABER en 4.3 μm para unas condiciones atmosféricas típicas. La línea negra '*Total*' incluye tanto las contribu-

Tabla 5.5: Bandas del dióxido de carbono incluidas en las simulaciones de radiancia en el canal en 4.3 μm de SABER.

Isótopo	Grupo	Nivel ^a Superior	Nivel Inferior	Núm. Onda [cm ⁻¹]	Intensidad ^b [$\times 10^{-22}$ cm ⁻¹ cm ²]
626	FB	00 ⁰ 1	00 ⁰ 0	2349.143	955357.125
	FH	01 ¹ 1	01 ¹ 0	2336.632	73666.258
	SH	02 ² 1	02 ² 0	2324.141	2838.857
02 ⁰ 1		02 ⁰ 0	2327.433	1789.326	
10 ⁰ 1		10 ⁰ 0	2326.598	1079.329	
	TH	03 ¹ 1	03 ¹ 0	2315.235	14.610
		03 ³ 1	03 ³ 0	2311.667	10.260
		11 ¹ 1	11 ¹ 0	2313.773	72.010
636	FB	00 ⁰ 1	00 ⁰ 0	2283.488	9598.150
	FH	01 ¹ 1	01 ¹ 0	2271.760	817.848
	SH	02 ² 1	02 ² 0	2260.049	33.330
02 ⁰ 1		02 ⁰ 0	2261.910	19.460	
10 ⁰ 1		10 ⁰ 0	2262.848	11.620	
628	FB	00 ⁰ 1	00 ⁰ 0	2332.113	3518.852
	FH	01 ¹ 1	01 ¹ 0	2319.738	257.879
627	FB	00 ⁰ 1	00 ⁰ 0	2340.014	647.575
	FH	01 ¹ 1	01 ¹ 0	2327.581	49.683

^aNotación de Herzberg^bValores a $T=296$ K.Tabla 5.6: Bandas del hidroxilo incluidas en las simulaciones de radiancia en el canal en 4.3 μm de SABER.

Nivel Superior ^a	Nivel Inferior	Núm. Onda [cm ⁻¹]	Coef. Eins. [s ⁻¹]
9($\frac{3}{2}$)	8($\frac{3}{2}$)	2235.963	20.100
9($\frac{3}{2}$)	8($\frac{1}{2}$)	2063.748	0.0117
9($\frac{1}{2}$)	8($\frac{3}{2}$)	2405.748	0.448
9($\frac{1}{2}$)	8($\frac{1}{2}$)	2233.533	20.200
8($\frac{3}{2}$)	7($\frac{3}{2}$)	2413.623	8.400
8($\frac{3}{2}$)	7($\frac{1}{2}$)	2239.246	0.005
8($\frac{1}{2}$)	7($\frac{3}{2}$)	2585.838	0.267
8($\frac{1}{2}$)	7($\frac{1}{2}$)	2411.461	8.640
7($\frac{3}{2}$)	6($\frac{3}{2}$)	2584.340	3.340
7($\frac{3}{2}$)	6($\frac{1}{2}$)	2407.980	0.047
7($\frac{1}{2}$)	6($\frac{3}{2}$)	2758.717	0.123
7($\frac{1}{2}$)	6($\frac{1}{2}$)	2582.357	3.650

^aEntre paréntesis se indica el estado de espín.

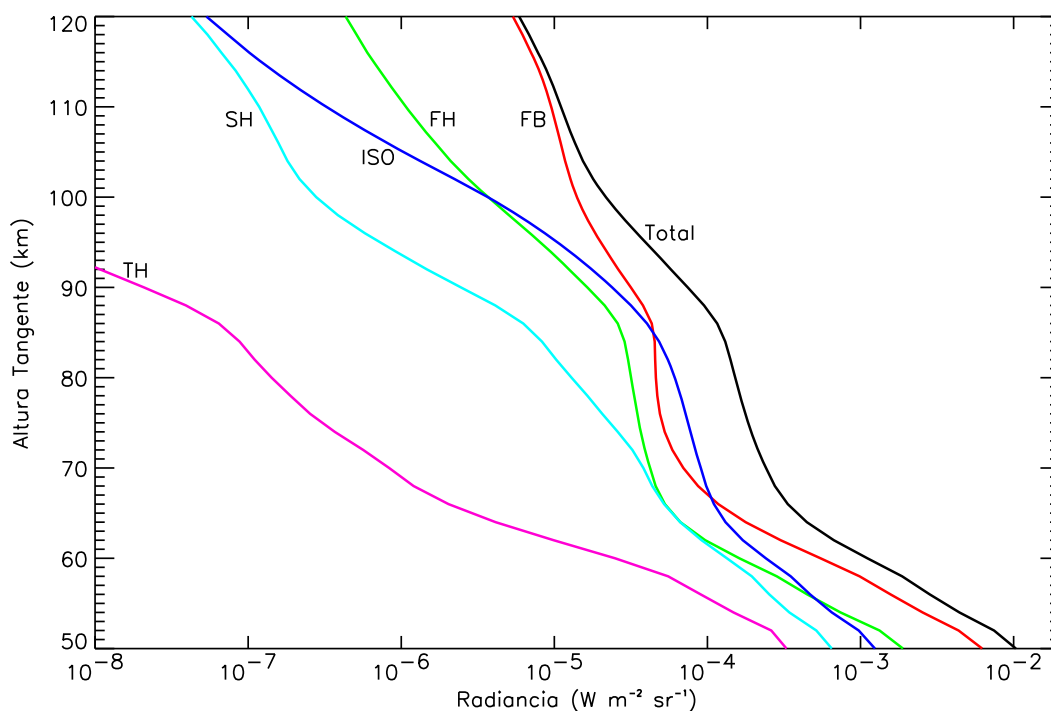


Figura 5.14: Contribuciones de las principales bandas del CO_2 a la radiancia en canal de SABER alrededor 4.3 μm en condiciones nocturnas para el evento 6 de la órbita 3046 del 1 de Julio de 2002 (Total: Radiancia en 4.3 μm incluyendo OH^* ; FB: banda fundamental; FH: primera banda caliente; SH: segunda banda caliente; TH: tercera banda caliente; ISO: contribución de los isótopos del CO_2 .)

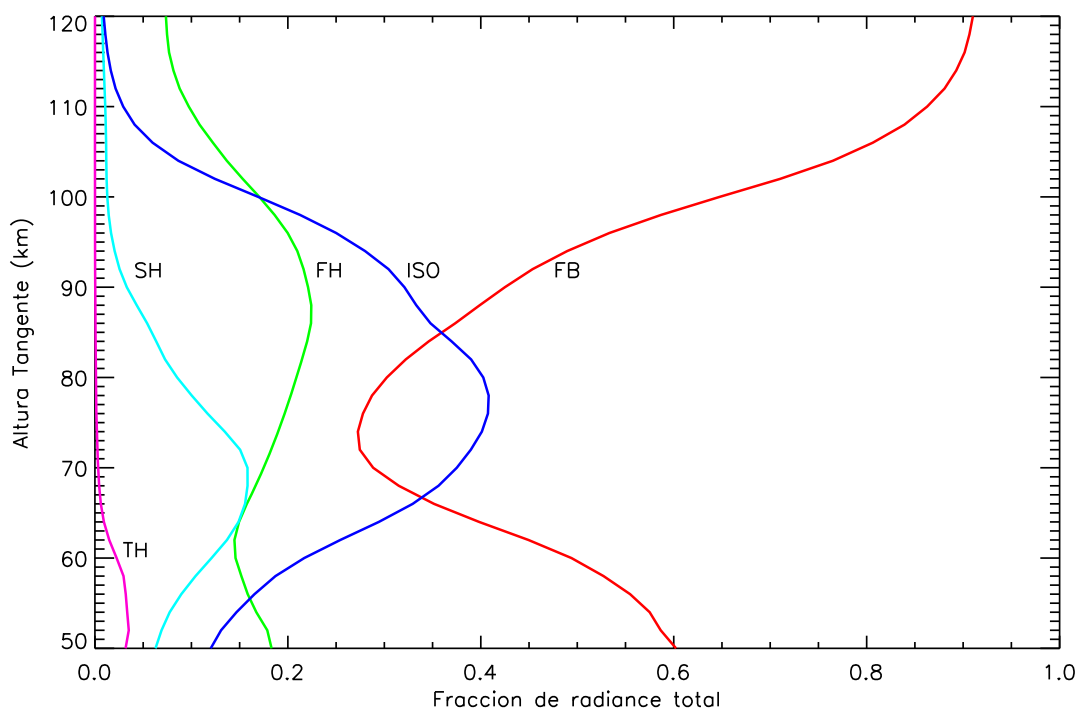


Figura 5.15: Contribuciones relativas de las principales bandas del CO_2 al canal de SABER en 4.3 μm en condiciones nocturnas. La leyenda es análoga a la de la Figura 5.14.

ciones de las bandas del CO_2 a la radiancia como la contribución directa de las bandas con $\Delta\nu=1$ del OH. Asimismo, se ha incluido la excitación del CO_2 por el OH^* vía $\text{N}_2(1)$ convencional, es decir, mediante los procesos 5.1 y 5.2. La banda fundamental $00^01 \rightarrow 00^00$ del isótopo 626 del CO_2 (FB) es la principal responsable de las radiancias en el canal de 4.3 μm en todas las alturas de interés excepto entre 65 y 85 km, región donde son las bandas vibracionales de los isótopos minoritarios las que más contribuyen a la radiancia. Esto sucede porque, en dicho intervalo de alturas, la banda $00^01 \rightarrow 00^00$ del CO_2 626 es ópticamente espesa, es decir, la emisión proveniente de la misma no escapa de la atmósfera sino que es absorbida por capas superiores. Sin embargo, las bandas fundamentales del resto de isótopos empiezan a ser ópticamente delgadas. Luego, aunque los isótopos 636, 628 y 627 son menos abundantes que el 626, sus emisiones son capaces de atravesar el resto de atmósfera situada por encima de la altura donde se origina la emisión y alcanzar el detector del instrumento. De hecho, alrededor de 75 km, la contribución de los isótopos a la radiancia total supone más del 40 %. En concreto esta contribución proviene de las emisiones de las bandas fundamentales de los isótopos 628 y 627 ya que la correspondiente al 636 está casi fuera del filtro del canal en 4.3 μm de SABER. También es notable la contribución de la primera banda caliente (FH) del isótopo principal del CO_2 que puede alcanzar el 20 % de la radiancia en el canal 7 por debajo de 95 km. Es importante notar que estas contribuciones relativas dependen de las condiciones atmosféricas. En concreto, la contribución a la radiancia de los isótopos minoritarios es mayor en los casos en los que la temperatura cinética en la estratopausa y baja mesosfera es elevada, pudiendo alcanzar hasta un 60 % a 80 km en los casos extremos. Por contra, la contribución de la primera banda caliente es mayor cuando dicha T_k es menor y puede alcanzar más del 30 % alrededor de 95 km.

Hay que hacer notar que estas contribuciones relativas dependen de la excitación del $\text{OH}(\nu)$. En concreto, cuanto mayor sea la excitación considerada, mayor será la contribución de la banda fundamental del isótopo principal.

5.3.2. Comparación entre simulaciones y medidas: un ejemplo

Utilizando el esquema descrito se han realizado simulaciones en 4.3 μm y se han comparado con las medidas de SABER. En la Figura 5.16 se muestra un ejemplo de dicha comparación (las simulaciones corresponden al caso representado en la Figura 5.13) en el que se ilustra el efecto tanto directo como indirecto del OH^* sobre la radiancia.

El hecho de incluir la contribución directa del OH^* al canal supone un aumento en la radiancia de tan sólo un 5 % entre 85 y 90 km. Sin embargo, el considerar el mecanismo de excitación del $\text{CO}_2(\nu_3)$ por el OH^* vía N_2 constituye un aumento de más de un 15 % de la radiancia y no sólo alrededor del pico de OH sino en todo el intervalo de alturas superiores. El gráfico muestra que la radiancia nocturna de SABER en 4.3 μm está cla-

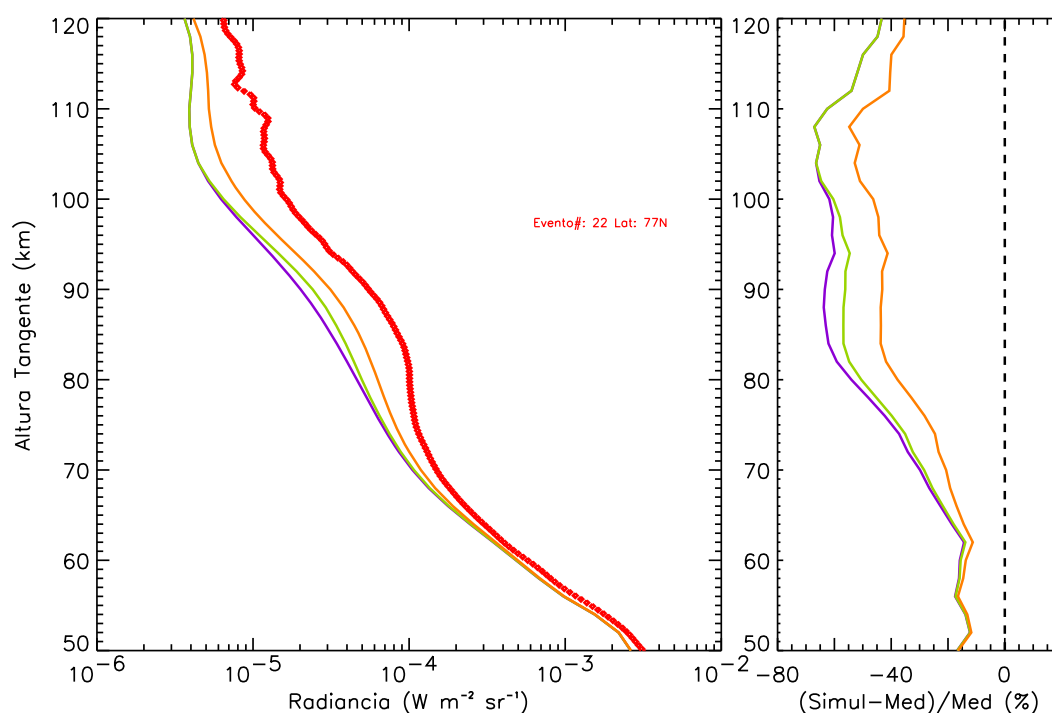


Figura 5.16: Panel izdo.: Radiancia simulada y medida en el canal en $4.3 \mu\text{m}$ de SABER para el evento 22 de la órbita 1264 (morado: sin OH^* ; verde: añadiendo contribución directa del OH^* ; naranja: añadiendo excitación nominal del CO_2 por el OH^* ; y cuadrados rojos: medida de SABER). Panel dcho.: Diferencias porcentuales entre radiancias simuladas y medida.

ramente subestimada por las simulaciones si se incluye el esquema tal y como se propuso originariamente por *Kumer y col.* [1978]. Esta subestimación, aún cuando se considera conjuntamente la contribución directa e indirecta del hidroxilo al canal, alcanza el 15 % por debajo de 60 km y más del 45 % por encima de 80 km. Esto significa que la temperatura vibracional de, por ejemplo, el nivel 00^0_1 del isótopo 626 debería ser más de 20 K mayor que la modelada para poder reproducir las medidas.

Esta subestimación en la radiancia no puede deberse a la contribución directa de la emisión de los niveles OH^* porque no sucede sólo en la región situada alrededor de la capa de OH^* (única región donde afectaría el incremento de dicha contribución) sino también a alturas superiores (ver, p.e., Figura 5.1).

Los errores en la temperatura cinética pueden ser los responsables del defecto de radiancia en las simulaciones en la baja mesosfera. De hecho, en capítulos anteriores, ya se indicaba que posiblemente la T_k invertida a partir de los datos de SABER sea unos 2-3 K menor que la real alrededor de 55 km. Un sesgo de esta magnitud en la temperatura en estas regiones atmosféricas, donde los niveles ν_3 del CO_2 se hallan en ETL, se traduce en un sesgo de $\tilde{15}$ -20 % en la radiancia en $4.3 \mu\text{m}$. No obstante, dichos niveles están en

no-ETL en la alta mesosfera, por lo que el efecto de errores en la T_k local no afectan de forma tan dramática en esta región. Por otra parte, y como se verá más adelante, aunque la excitación del $\text{CO}_2(\nu_3)$ en la alta mesosfera se deba en parte a la absorción de radiación proveniente de la baja mesosfera, un aumento de la T_k en esta última región de 3 K no produce el aumento del 45 % que se necesita por encima de 80 km (de hecho, produce un cambio menor del 5 % en la radiancia). Luego es necesario buscar un proceso de excitación, no considerado hasta ahora, que sea capaz de reproducir las medidas nocturnas de SABER en 4.3 μm en condiciones no-aurorales.

5.4. Posibles mecanismos de excitación del $\text{CO}_2(\nu_3)$

Los procesos a considerar han de surtir efecto en la radiancia nocturna en 4.3 μm desde 70 km hasta la baja termosfera. Por otra parte, debido a la alta correlación entre las medidas en el canal de CO_2 en 4.3 μm y las tomadas en los canales de OH, es de suponer que los potenciales mecanismos de excitación han de estar relacionados con el hidroxilo.

En los cálculos realizados hasta este punto, se han utilizado las tasas de colisiones entre el $\text{OH}(\nu)$ y el N_2 mostradas en la Tabla 5.4. Sin embargo, aunque son precisas, estas constantes fueron medidas a temperatura ambiente y las temperaturas en la mesosfera pueden alcanzar los 130 K. Por ello, es importante tener en cuenta una posible dependencia con la temperatura. En los trabajos publicados por *Dyer y col.* [1997] se sugiere que las tasas colisionales se ralentizan al reducir la temperatura de la ambiente a 245 K pero vuelven a aumentar por debajo de 225 K. Este comportamiento, en el que una constante colisional tiene una dependencia inversa con la temperatura, suele producirse cuando un mecanismo de pérdida está dominado por fuerzas atractivas de largo alcance, como es el caso de las colisiones OH^*-N_2 . *Adler-Golden* [1997] propone aumentar los valores de dichas constantes en un factor 1.4 a las temperaturas reinantes alrededor de la mesopausa. Este resultado ha sido corroborado recientemente por las medidas de laboratorio realizadas por *Lacoursière y col.* [2003]. En todo caso y como se observa en la Figura 5.18, esto produce un aumento adicional en la radiancia de menos del 5 %, insuficiente aún para explicar las medidas.

Una excitación vibracional de los niveles ν_3 del CO_2 alrededor entre 80-85 km se puede transmitir a capas superiores mediante transporte radiativo. La excitación vibracional de estos niveles por parte del OH^* ocurre en regiones cercanas al máximo de $[\text{OH}]$, es decir, alrededor de 80 km. Esto, junto al hecho de que se observa una correlación entre los canales de OH y el canal de CO_2 en 4.3 μm , parece indicar que el aumento de radiancia alrededor de 85 km se debe a la excitación de los niveles $\text{CO}_2(\nu_3)$ mediante los procesos 5.1 y 5.2 o, cuanto menos, mediante procesos que propician un intercambio de energía vibracional entre el CO_2 y el OH. Los potenciales candidatos deben ser, por tanto, mecanismos que

exciten los niveles ν_3 del CO_2 directa o indirectamente a partir del OH^* . Se han explorado los siguientes:

- Excitación directa por el $\text{OH}(\nu)$;
- Mecanismos de excitación vía $\text{O}_2(\nu)$; y
- Vía N_2 tras transferencia multi-cuanto del $\text{OH}(\nu)$ al N_2 .

5.4.1. Excitación directa del $\text{CO}_2(\nu_3)$ por el $\text{OH}(\nu)$

En el esquema del modelo de no-ETL utilizado se incluye la excitación del $\text{N}_2(1)$ por el hidroxilo excitado vibracionalmente (proceso 5.1). Sin embargo, no se considera la excitación del CO_2 proveniente directamente del $\text{OH}(\nu)$, es decir,



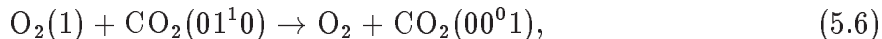
Los niveles ν_3 del CO_2 y el nitrógeno excitado vibracionalmente están fuertemente acoplados a través del proceso 5.2. Por ello, existe lo que se denomina un depósito de energía vibracional en el que cualquier energía que se transfiera se distribuye indistintamente entre los estados $\text{CO}_2(\nu_3)$ y el $\text{N}_2(1)$. Ambos mecanismos (tanto el 5.1 como el 5.2) fomentan el aumento de la energía de este depósito $\text{CO}_2(\nu_3)$ - $\text{N}_2(1)$. Para hacer una estimación de la influencia del proceso 5.4 sobre la excitación de los niveles ν_3 del CO_2 , se puede comparar el número de cuantos que se ponen a disposición de dicho depósito mediante ese proceso (P_{CO_2}) con el que se ponen tras el proceso 5.1 (P_{N_2}). Sabiendo que las constantes $k_{\text{OH}-\text{CO}_2}$, que caracterizan las colisiones del OH^* con el CO_2 , son del mismo orden que las $k_{\text{OH}-\text{N}_2}$, que caracterizan colisiones con el N_2 (ver, p.e., *Dodd y col.*, 1991; *Dyer y col.*, 1997), la razón entre las producciones P_{CO_2} y P_{N_2} es

$$\frac{P_{\text{CO}_2}}{P_{\text{N}_2}} = \frac{\sum_{\nu=1}^9 k_{\text{OH}-\text{CO}_2}(\nu)[\text{OH}(\nu)][\text{CO}_2]}{\sum_{\nu=1}^9 k_{\text{OH}-\text{N}_2}(\nu)[\text{OH}(\nu)][\text{N}_2]} \approx \frac{3.6 \times 10^{-4}}{0.78} \approx 0.0005, \quad (5.5)$$

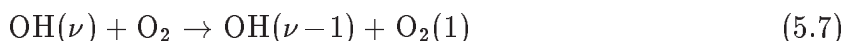
donde se ha tenido en cuenta que, alrededor de 85 km, la razón de mezcla del CO_2 es ~ 360 ppmv y la del N_2 es $\sim 7.8 \times 10^5$ ppmv. Es decir, la relajación del OH^* mediante colisiones con N_2 es unas 2000 veces más eficaz que mediante colisiones con el CO_2 por lo que el efecto de este último proceso sobre las poblaciones de los niveles $\text{CO}_2(\nu_3)$ es despreciable. De hecho, dicha excitación aumenta la T_v del nivel $\text{CO}_2(00^01)$ en poco más de 1 K. Por tanto, incluir este proceso no conseguiría explicar las medidas en $4.3 \mu\text{m}$.

5.4.2. Mecanismos de excitación vía $\text{O}_2(\nu)$

Otros mecanismos considerados en este trabajo son aquellos en los que hay un intercambio de energía vibracional entre el oxígeno molecular y el dióxido de carbono. Uno de ellos es la transferencia de energía vibracional en el proceso



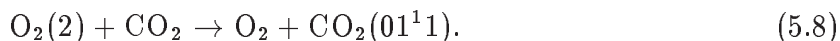
cuya constante colisional es $k = 3 \times 10^{-15} [1 + 0.02(T - 210)] \exp[-117/(k_B T)] \text{cm}^3 \text{s}^{-1}$ (Alexander y col., 1968; Houghton y col., 1969). Para estimar el efecto de este proceso sobre la población del $\text{CO}_2(01^10)$ es necesario conocer qué mecanismos son capaces de excitar vibracionalmente al O_2 durante la noche. El proceso fundamental considerado es,



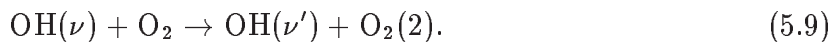
cuyas constantes de relajación se han tomado de Adler-Golden y col. [1997] y son, dependiendo de ν , entre 10 y 40 veces más elevadas que las asociadas a colisiones con N_2 (ver Tabla 5.2). Haciendo uso del modelo de no-ETL del vapor de agua desarrollado por López-Puertas y col. [1995] con las actualizaciones de Zaragoza y col. [1998] e incluyendo el proceso 5.6, se ha determinado que tras la excitación del $\text{O}_2(1)$ por parte del OH^* , la temperatura vibracional del primero aumentaría tan solo en 10 K alrededor de la capa de hidroxilo, alcanzando un valor de aproximadamente 210 K. Para no subestimar posibles excitaciones del $\text{O}_2(1)$ no tenidas en cuenta, se ha fijado la T_v del mismo a 250 K entre 75 y 95 km y se han calculado las poblaciones de los estados $\text{CO}_2(\nu_3)$ incluyendo la excitación de los mismos por parte del $\text{O}_2(1)$.

Como se ilustra en la Figura 5.17, las temperaturas vibracionales de los niveles del CO_2 en 4.3 μm apenas varían 2 K al incluir este mecanismo y, además, por debajo de 80 km. Como ya se ha mencionado anteriormente, para reproducir las medidas de SABER en el canal de 4.3 μm en condiciones nocturnas es necesario aumentar la T_v del estado 00^01 en al menos 20 K alrededor de 85 km. Por tanto, la excitación producida por el $\text{O}_2(1)$ es también insuficiente para explicar la deficiencia de más de 40 % en la radiancia simulada.

Otra posible vía de excitación de los estados ν_3 del CO_2 a partir del oxígeno molecular es mediante el proceso:



La constante colisional de este proceso es, aproximadamente, dos veces mayor que la del proceso 5.6, o sea, $k_{\text{O}_2(2)} = 2 \times k_{\text{O}_2(1)}$. Una vez más, se puede considerar que el OH^* es la principal fuente de excitación del $\text{O}_2(2)$ durante la noche, es decir,



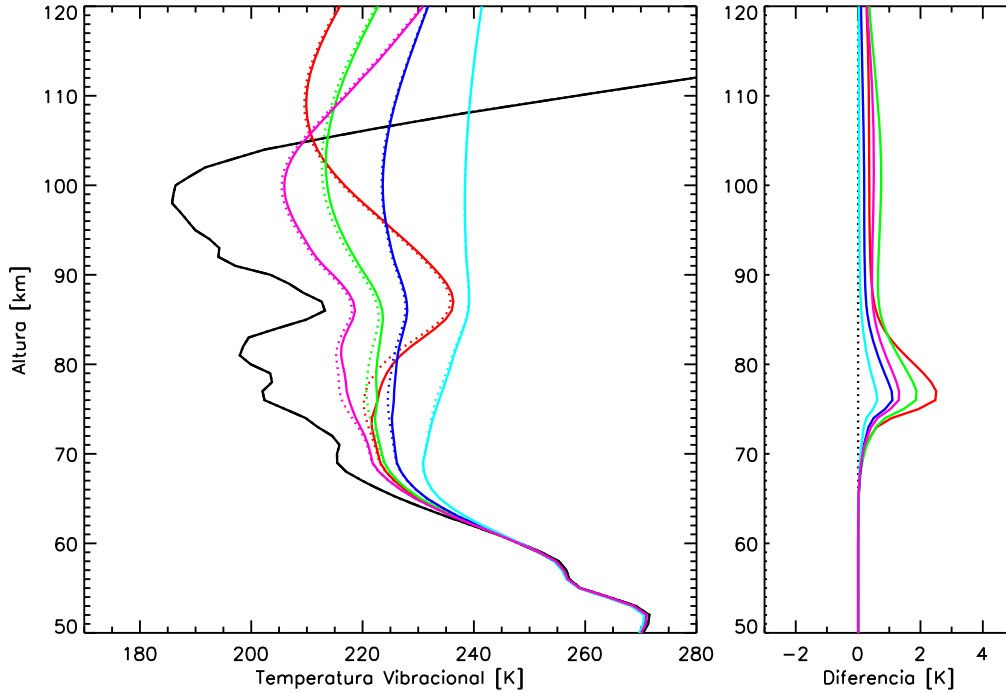


Figura 5.17: Efecto de incluir la excitación por parte del $\text{O}_2(1)$ sobre las temperaturas vibracionales de los niveles ν_3 del CO_2 (línea punteada: sin excitación; línea sólida: con excitación; negro: T_k ; rojo: 00^01 del isótopo 626; verde: 00^01 del isótopo 636; azul: 00^01 del isótopo 628; celeste: 00^01 del isótopo 627; y rosa: 01^11 del isótopo 626).

Sin embargo, para que este mecanismo sea efectivo, se necesita una transferencia muy rápida de la energía vibracional desde el OH^* hacia el $\text{O}_2(2)$ y además éste último se relaja rápidamente mediante colisiones con el oxígeno atómico e intercambio V-V con el vapor de agua. Aún así, se ha supuesto una temperatura vibracional del $\text{O}_2(2)$ límite de 300 K para estimar el efecto del proceso 5.8 en relación al 5.6. Esta comparación da cuenta de la importancia de este proceso ya que, si bien a través del mismo se poblaría el nivel 01^11 en vez del 00^01 , la energía, al fin y al cabo, llegaría al mismo depósito ν_3 y repercutiría del mismo modo sobre la emisión en $4.3 \mu\text{m}$. En efecto,

$$\begin{aligned} \frac{P_{011}}{P_{001}} &= \frac{k_{\text{O}_2(2)}[\text{O}_2(2)][\text{CO}_2]}{k_{\text{O}_2(1)}[\text{O}_2(1)][\text{CO}_2(010)]} = \\ &= \frac{k_{\text{O}_2(2)} \exp\left(-\frac{E_{\text{O}_2(2)}}{k_B T_v(\text{O}_2(2))}\right)}{k_{\text{O}_2(1)} \exp\left(-\frac{E_{\text{O}_2(1)}}{k_B T_v(\text{O}_2(1))}\right) \exp\left(-\frac{E_{\text{CO}_2(010)}}{k_B T_v(\text{CO}_2(010))}\right)} \approx 1.13, \end{aligned} \quad (5.10)$$

donde P_{011} y P_{001} son las tasas de producción de estados 01^11 y 00^01 respectivamente, $E_{\text{O}_2(2)}$, $E_{\text{O}_2(1)}$, $E_{\text{CO}_2(010)}$ son las energías de los niveles vibracionales $\text{O}_2(2)$, $\text{O}_2(1)$, $\text{CO}_2(01^11)$ respectivamente, y $T_v(\text{O}_2(2))$, $T_v(\text{O}_2(1))$, $T_v(\text{CO}_2(010))$ sus temperaturas vi-

bracionales. Luego, la influencia de este proceso es del orden de la del proceso 5.6 y, por tanto, tampoco es suficiente para explicar las radiancias de SABER en 4.3 μm .

5.4.3. Relajación multi-cuanto del OH(ν) por el N₂

Adler-Golden [1997] proporcionó un conjunto completo de las tasas de relajación estado-a-estado $k(\nu, \nu')$ para las colisiones del hidroxilo con el oxígeno molecular. Consideró que, en la relajación por el oxígeno molecular del hidroxilo excitado vibracionalmente, éste último no se desexcita únicamente al nivel vibracional inmediatamente inferior, sino a todos los niveles vibracionales con menor energía. En otras palabras, cuando una molécula OH(ν) colisiona con O₂ se relaja a cada uno de los estados $\nu' < \nu$ con una cierta probabilidad $P_{\nu \rightarrow \nu'}$ de modo que la constante colisional total k_ν no varía, es decir,

$$k_\nu = \sum_{\nu'=1}^{\nu-1} k(\nu, \nu') = \sum_{\nu'=1}^{\nu-1} P_{\nu \rightarrow \nu'} k_\nu. \quad (5.11)$$

Esto es lo que se denomina relajación multi-cuanto, ya que en cada colisión se pone en juego más de un cuanto vibracional. Este mecanismo es intermedio entre la relajación en cascada, en la que $P_{\nu \rightarrow \nu'} = \delta(\nu - \nu' - 1)$ o bien $\Delta\nu = \nu - \nu' \equiv 1$, y el referido en la literatura como ‘muerte súbita’, en el que $P_{\nu \rightarrow \nu'} = \delta(\nu')$ o bien $\Delta\nu \equiv \nu$.

Se han deducido las probabilidades $P_{\nu \rightarrow \nu'}$ a partir de las constantes $k(\nu, \nu')$ de las colisiones del OH(ν) con el O₂ de *Adler-Golden* [1997], que fueron inferidas con medidas tanto de laboratorio como de emisiones atmosféricas en nadir. Están esquematizadas en la Tabla 5.7.

Tabla 5.7: Probabilidad de relajación de los estados OH($\nu=1-9$) al estado OH(ν') ($P_{\nu \rightarrow \nu'}$) tras colisionar con N₂ basadas en las tasas de relajación multi-cuanto en colisiones OH(ν)-O₂ de *Adler-Golden* [1997].

	P _{$\nu \rightarrow \nu'$}									$\mathcal{R}(\nu)^a$
	$\nu'=8$	$\nu'=7$	$\nu'=6$	$\nu'=5$	$\nu'=4$	$\nu'=3$	$\nu'=2$	$\nu'=1$	$\nu'=0$	
$\nu=1$									1.00	1.00
$\nu=2$								0.92	0.08	1.08
$\nu=3$							0.85	0.13	0.02	1.17
$\nu=4$						0.77	0.18	0.04	0.01	1.29
$\nu=5$					0.64	0.23	0.08	0.03	0.01	1.51
$\nu=6$				0.51	0.25	0.13	0.06	0.03	0.02	1.91
$\nu=7$			0.31	0.22	0.16	0.12	0.08	0.06	0.04	2.75
$\nu=8$		0.25	0.20	0.16	0.12	0.09	0.07	0.06	0.04	3.22
$\nu=9$	0.14	0.13	0.12	0.12	0.11	0.10	0.10	0.09	0.09	4.62

^aNúmero medio de moléculas de N₂(1) producidas por colisión.

En este trabajo, se han adoptado estas probabilidades para las colisiones del OH con el N₂ junto a las tasas totales de la Tabla 5.4. Se puede considerar que, en dichas colisiones, hay un intercambio de energía vibracional V-V de tal naturaleza que todos y cada uno de los cuantos que el OH* libera se invierten en excitar moléculas de N₂. En consecuencia, en cada una de esas colisiones, se producirían tantas moléculas de N₂(1) como cuantos se pongan en juego, es decir, Δν. Entonces, la producción específica (es decir, por molécula de nitrógeno molecular) de N₂(1) por cada nivel ν del hidroxilo viene dada por

$$p_{N_2(1)}(\nu) = \sum_{\nu' < \nu} [OH(\nu)]k_\nu P_{\nu \rightarrow \nu'}(\nu - \nu') = [OH(\nu)]k_\nu \mathcal{R}(\nu), \quad (5.12)$$

donde se ha definido $\mathcal{R}(\nu) = \sum_{\nu' < \nu} P_{\nu \rightarrow \nu'}(\nu - \nu')$.

Los valores de $\mathcal{R}(\nu)$ (indicados en la Tabla 5.7 para cada nivel del OH) dan cuenta del número medio de moléculas N₂(1) producidas por cada colisión del OH en el estado ν con el N₂, o bien, del factor por el que se debería multiplicar cada $k(\nu)$ si se considerara relajación en cascada para que el efecto final sobre la excitación del N₂(1) sea el mismo que considerándola multi-cuanto. Los estados vibracionales más energéticos (aquellos con ν mayor) están menos poblados luego las colisiones en las que intervienen tendrán lugar con menos frecuencia. Por ello, es útil promediar teniendo esto en cuenta y pesando además con la constante total de relajación asociada a cada estado, es decir,

$$n = \left[\sum_{\nu=1}^9 [OH(\nu)]k(\nu) \right]^{-1} \sum_{\nu=1}^9 [OH(\nu)]k(\nu)\mathcal{R}(\nu), \quad (5.13)$$

con lo que se obtiene un valor promediado igual a 2.8 (tomando el valor [OH(ν)] a 85 km). Este valor, básicamente, indica el factor por el que se deberían multiplicar todas las constantes colisionales $k(\nu)$ para obtener un efecto similar al multi-cuanto, es decir, el número medio de moléculas N₂(1) producidas con cada colisión.

Incluyendo este mecanismo en el modelo de no-ETL, se ha recalculado la radiancia nocturna alrededor de 4.3 μm para el ejemplo con el que se ha trabajado, es decir, el evento 22 de la órbita 1264 del 3 de Marzo de 2002. La comparación está ilustrada en la Figura 5.18 donde se observa que, al considerar el mecanismo multi-cuanto, se consigue reproducir la medida de SABER con diferencias menores del 5% por encima de 65 km.

Además, la mejora en las simulaciones se extiende a alturas por encima de la capa de OH, capa donde este mecanismo tiene lugar con mayor eficacia. También aumentado la radiancia por debajo de dicha capa, debido a las características geométricas de la observación en el limbo, ya que un incremento en la emisión a cierta altura repercute sobre las medidas de radiancia a alturas tangentes inferiores.

Con el fin de realizar un examen más exhaustivo y comprobar si este comportamiento es general, se han realizado simulaciones en 4.3 μm siguiendo este nuevo esquema para todos los eventos nocturnos de las cuatro órbitas sujetas a estudio (ver Tabla 5.1) y se

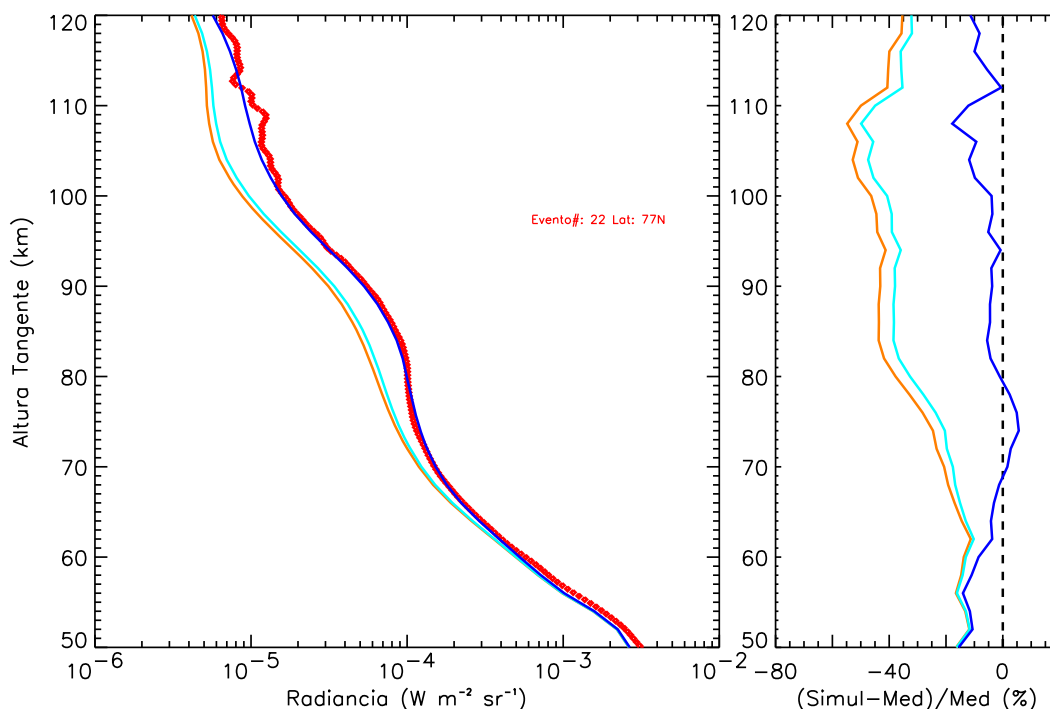


Figura 5.18: Como en la Figura 5.16 pero añadiendo simulaciones de radiancia aumentando k_{OH-N_2} un 40% (celeste) e incluyendo mecanismo multi-cuanto (azul).

han comparado con las medidas del instrumento SABER. En las Figuras 5.19 y 5.20 se han representado los perfiles de radiancia tanto simulados como medidos y las diferencias entre ellos para varios eventos de las órbitas 1264 (equinoccio) y 3046 (solsticio) respectivamente. Como se puede observar, la mayor parte de las diferencias están contenidas en $\pm 10\%$ y no superan el $\pm 20\%$ en ninguno de los casos, excepto en el evento 72 de la órbita 3046, donde, como se verá más adelante, se debe a la presencia de auroras dando lugar a una emisión en $4.3 \mu\text{m}$ inusualmente elevada. Las diferencias son algo menores en los casos de equinoccio que en los de solsticio y, en ambos, la tendencia es a subestimar la radiancia por debajo de 100 km y a sobreestimarla por encima de dicha altura.

Para analizar de forma global las diferencias entre radiancias simuladas y medidas en $4.3 \mu\text{m}$, se han representado mapas de las mismas para las cuatro órbitas consideradas (ver Figura 5.21). En general, las diferencias entre radiancias simuladas y medidas están alrededor de un $\pm 10\%$ por debajo de 100 km excepto para los eventos 47-50 de la órbita 4272 y los eventos 65-75 de la órbita 3046. Para el primer grupo de eventos, la radiancia se sobreestima en un 20% y para el último, la radiancia está subestimada en más de un 40% a partir de 85 km. Por encima de 100 km, el comportamiento de las diferencias es muy variable y hay zonas donde se sobreestima la radiancia en más de un 40% (ver p.e., eventos 45-54 de la órbita 4272 ó 96-100 de la órbita 1264). Esto, como se verá más adelante, se debe probablemente a una sobreestimación de la abundancia CO_2 .

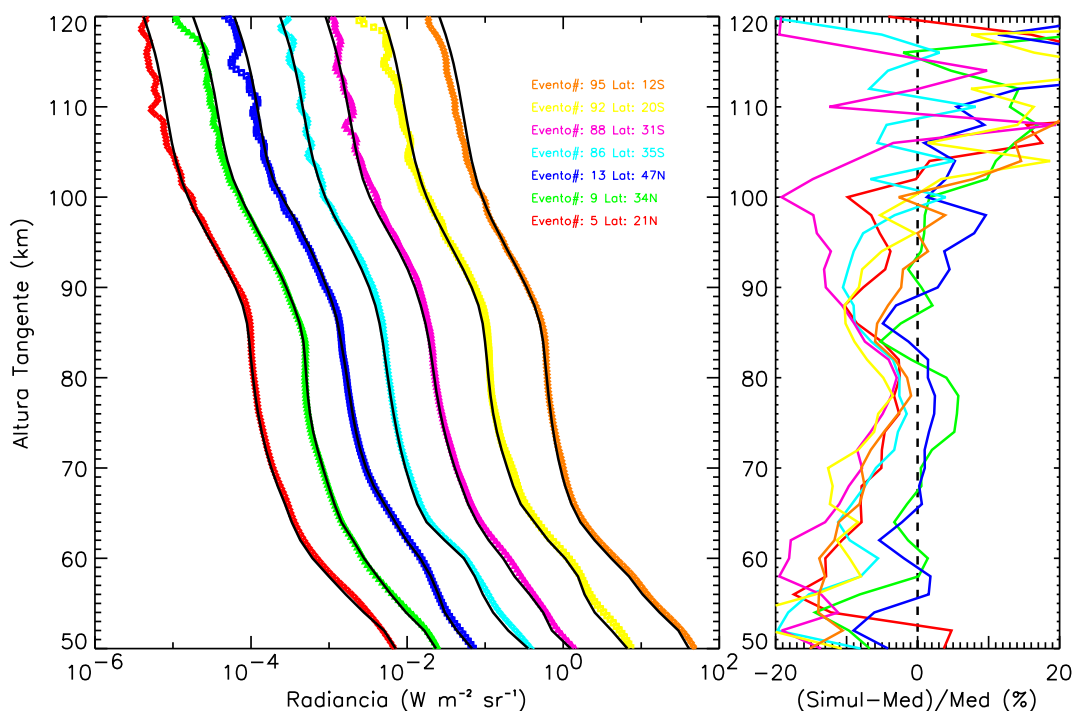


Figura 5.19: Comparaciones (izda.) y diferencias porcentuales (dcha.) entre simulaciones incluyendo transferencia multi-cuanto del OH^* al N_2 (negro) y medidas en el canal de $4.3 \mu\text{m}$ (coloreadas) para varios eventos nocturnos de la órbita 1264 del 3 de Marzo de 2002. (Nota: Las radiancias de cada evento está desplazada un factor 4 con respecto al evento contiguo.)

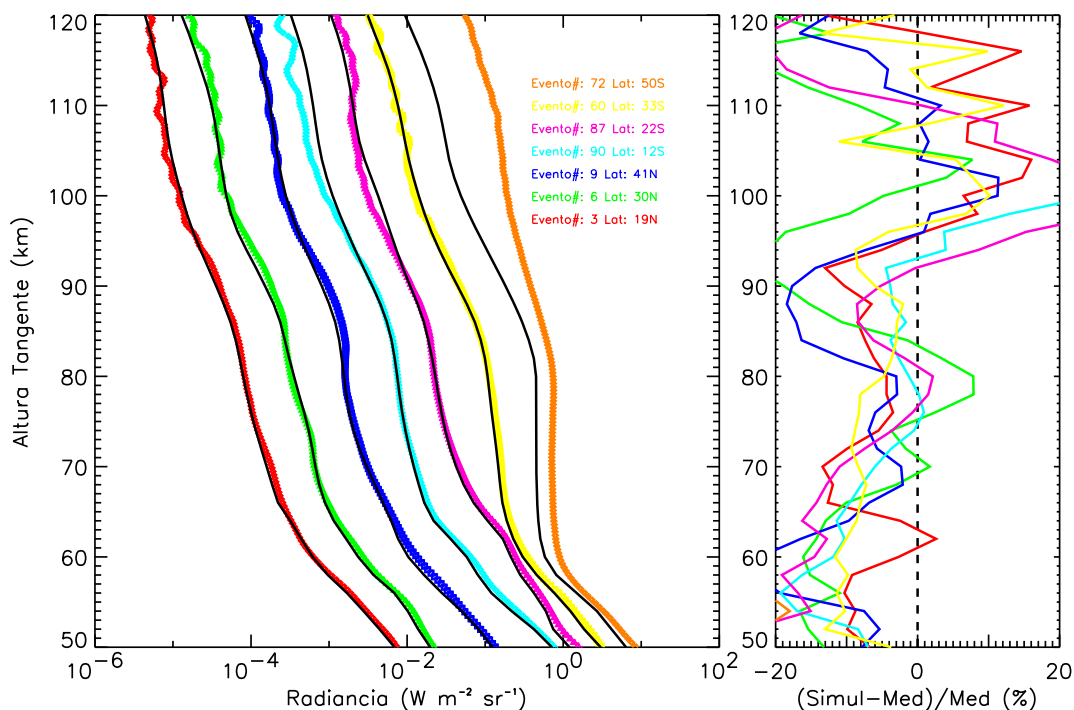


Figura 5.20: Como en la Figura 5.19 pero para eventos de la órbita 3046 del 1 de Julio de 2002.

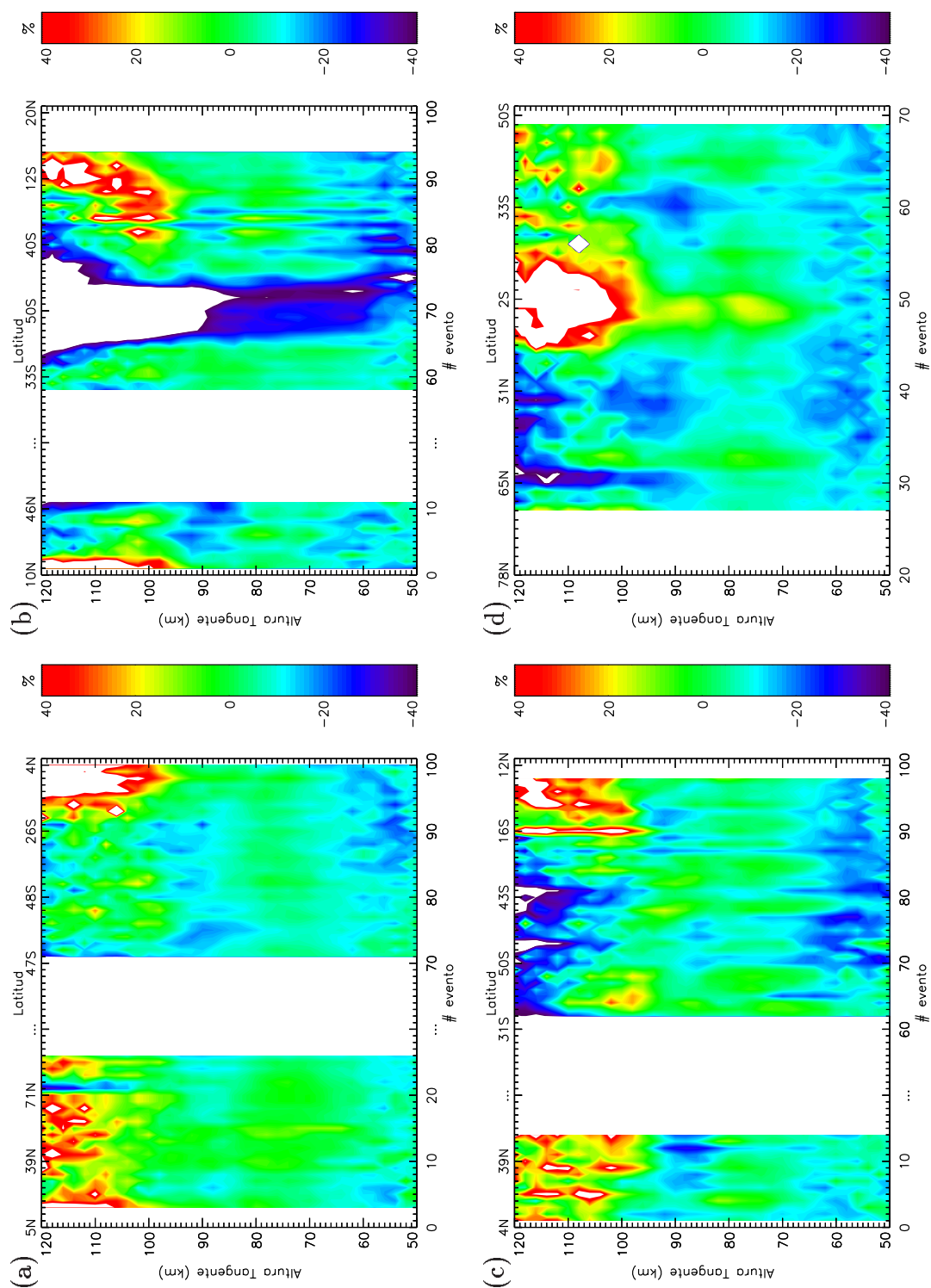


Figura 5.21: Diferencias entre radiancia simulada y medidas en el canal de CO_2 en $4.3 \mu\text{m}$ de SABER para los eventos nocturnos de las órbitas consideradas. (a) Órbita 1264 de 3 de Marzo; (b) Órbita 3046 de 1 de Julio; (c) Órbita 3098 de 4 de Julio; y (d) Órbita 4272 de 22 de Septiembre;

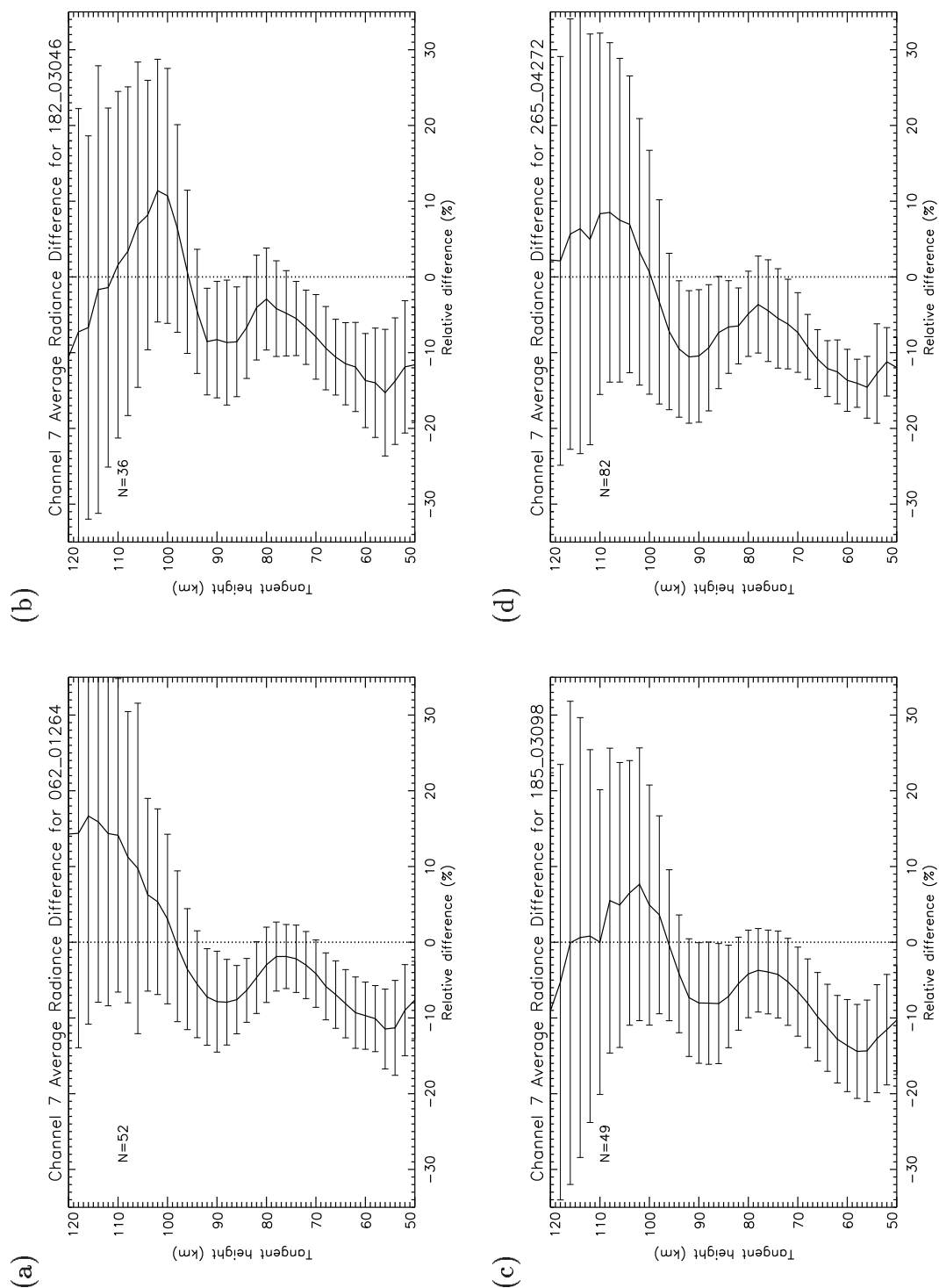


Figura 5.22: Diferencias medias entre radiancia simulada y medidas en el canal de CO_2 en $4.3 \mu\text{m}$ de SABER para los eventos nocturnos de las órbitas consideradas. (a) Órbita 1264 de 3 de Marzo; (b) Órbita 3046 de 1 de Julio; (c) Órbita 3098 de 4 de Julio; y (d) Órbita 4272 de 22 de Septiembre. Las barras indican la desviación estándar.

Finalmente, se han promediado las diferencias para cada una de las órbitas y se han representado junto a la desviación estándar (ver Figura 5.22). Para calcular la media para la órbita 3046, se ha prescindido de los eventos 65-75 afectados por excitación auroral. Entre 50 y 60 km, las diferencias están entre el -10 y el -15 % y la desviación estándar es menor para equinoccio (órbitas 1264 y 4272) que para solsticio (órbitas 3046 y 3098). Entre 65 y 100 km, las simulaciones difieren de las medidas entre -5 y -10 %, es decir, del orden de $1-\sigma$. El acuerdo en la radiancia en condiciones de equinoccio es similar al de condiciones de solsticio. Por encima de 100 km, las diferencias medias están entre -5 y 10 %, mayores en los casos de equinoccio, a los que, como se verá más adelante, corresponde una mayor concentración de CO_2 en la baja termosfera, y la variabilidad es muy elevada.

5.5. Análisis de errores de las radiancias en $4.3 \mu\text{m}$

Previo a la interpretación de las diferencias encontradas entre simulaciones y medidas alrededor de $4.3 \mu\text{m}$, se ha realizado un estudio de la sensibilidad de los resultados a varios parámetros físicos, a saber, la temperatura cinética, la razón de mezcla del CO_2 , la tasa de intercambio de energía vibracional entre el N_2 y el CO_2 , y la distribución de OH^* de referencia utilizada para invertir la población de los estados $\text{OH}(\nu)$.

Efecto de la temperatura cinética

Una de las posibles fuentes de error en las simulaciones de radiancia proviene de la temperatura cinética utilizada. Por encima de 70 km, como se ha dicho anteriormente, las variaciones de T_k no tienen un efecto significativo sobre los resultados ya que los estados $\text{CO}_2(\nu_3)$ están en no-ETL y la influencia de la temperatura local es de segundo orden. No obstante, existe el efecto directo sobre la densidad total de partículas.

Por debajo de 70 km, la T_k cobra mayor importancia ya que no sólo afecta a la radiancia en las alturas tangentes locales sino en regiones superiores. Los estados $\text{CO}_2(\nu_3)$ permanecen en ETL hasta aproximadamente 60 km. Por ello, cambios en la temperatura por debajo de esa región afectan notablemente a la radiancia simulada a esas alturas. Por otro lado, parte de la excitación de los niveles vibracionales del CO_2 en la alta mesosfera, fundamentalmente los de los isótopos minoritarios, proviene de la absorción de radiación originada en la estratopausa y la baja mesosfera. Si se incrementa la temperatura en esta última región, la población de los niveles ν_3 en dicha región aumentará y, en consecuencia, también lo hará la cantidad de energía disponible para ser absorbida por capas superiores. Por ello, la población de los niveles $\text{CO}_2(\nu_3)$ en la alta mesosfera aumenta y, por ende, la radiancia en $4.3 \mu\text{m}$.

Teniendo en cuenta que la temperatura cinética invertida de SABER podría estar

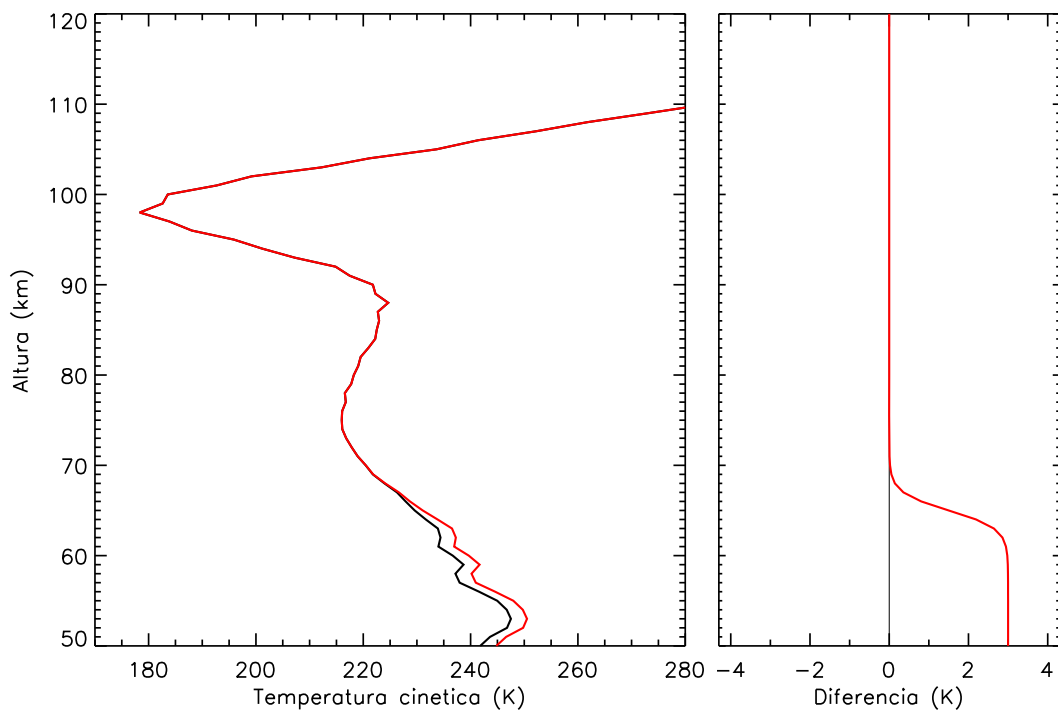


Figura 5.23: Perfiles de temperatura cinética utilizados para evaluar su efecto sobre la radiancia simulada en $4.3 \mu\text{m}$.

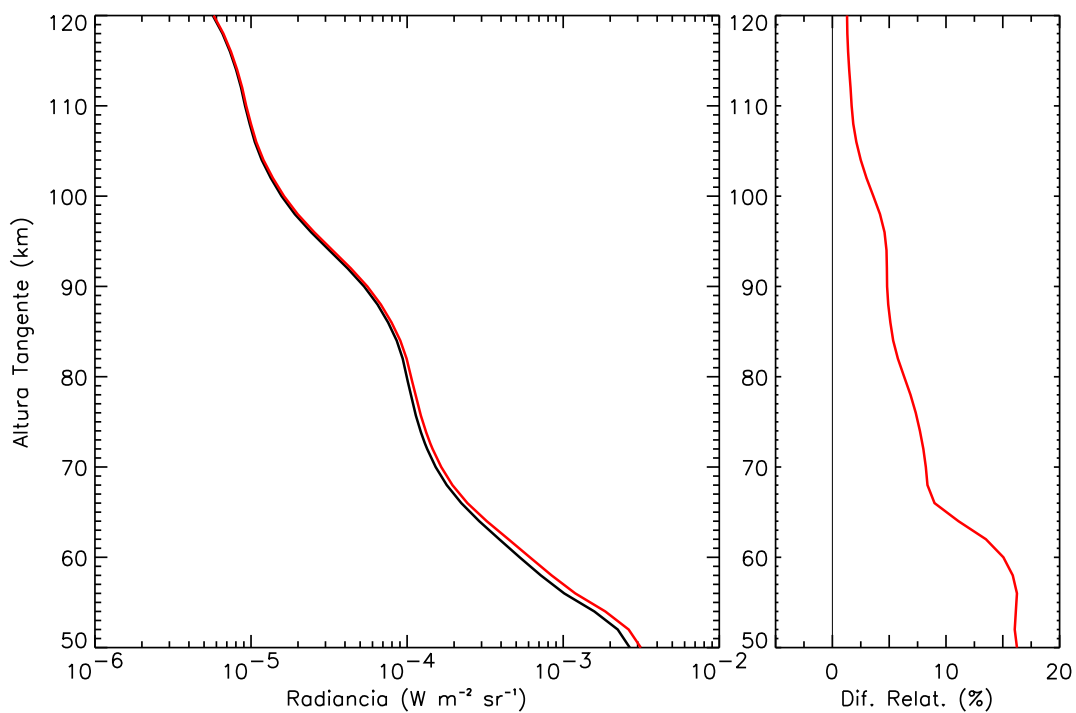


Figura 5.24: Efecto sobre la radiancia en $4.3 \mu\text{m}$ provocado por las variaciones en la T_k representadas en la Figura 5.23.

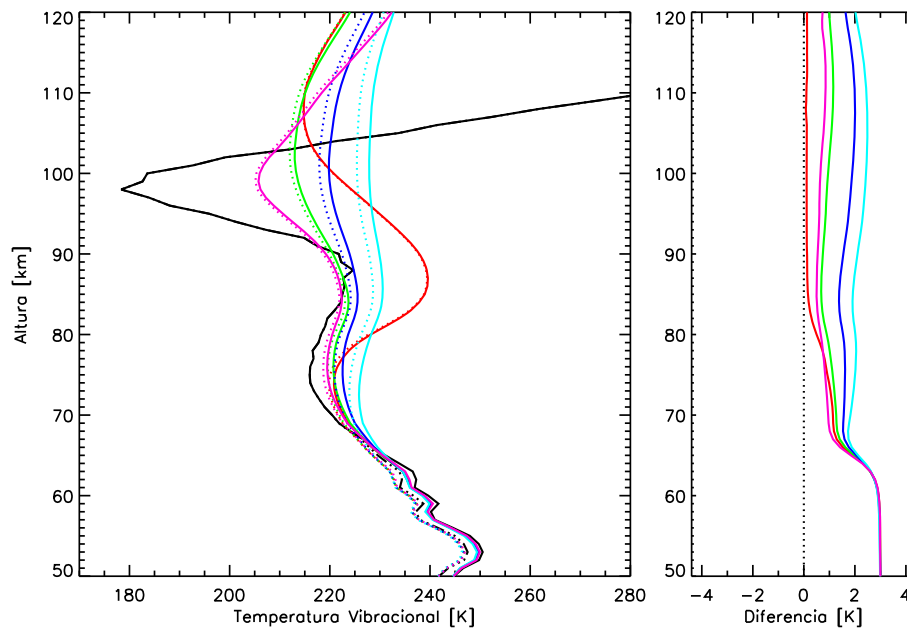


Figura 5.25: Temperaturas vibracionales de los niveles del $\text{CO}_2(\nu_3)$ considerando multi-cuanto (línea punteada) y aumentando la T_k en la baja mesosfera en 3 K (línea continua) (ver Figura 5.23) y diferencias entre ellas (panel dcho.) (negro: T_k ; rojo: 00^01 del isótopo 626; verde: 00^01 del 636; azul: 00^01 del 628; celeste: 00^01 del 627; y rosa: 01^11 del 626).

subestimada en unos 3 K por debajo de 60 km (ver Sección 4.5), se ha realizado una simulación para el evento 22 de la órbita 1264 aumentándola en dicho valor (ver Figura 5.23). Las temperaturas vibracionales varían con la T_k por debajo de 60 km y, por encima de esta altura, las T_v de los isótopos minoritarios son las que más aumentan (~ 2 K) (ver Figura 5.25). Como se puede observar en la Figura 5.24, el efecto sobre la radiancia, aunque mayor por debajo de 60 km, se extiende a todas las alturas. La radiancia en $4.3 \mu\text{m}$ aumenta en torno a un 15% en la baja mesosfera. No obstante, a 70 km, el aumento es menor del 7% y en la mesopausa no alcanza el 5%.

Efecto de la abundancia de dióxido de carbono

Para evaluar el efecto de variaciones de la concentración de CO_2 sobre las simulaciones en $4.3 \mu\text{m}$, se ha calculado la radiancia del evento 22 de la órbita 1264 perturbando la razón de mezcla del CO_2 de dos formas (ver Figura 5.27): a) disminuyéndola por encima de 100 km; y b) disminuyéndola en la región objeto de este estudio, es decir, entre 80 y 105 km. Estas perturbaciones están dentro del orden de concentraciones deducidas a partir del análisis de los datos de otros instrumentos, como p.e. ISAMS (Zaragoza y col., 2000).

Para el caso a), donde el CO_2 utilizado es menor que el nominal a alturas superiores

a 100 km (hasta un 40 % a 120 km), las T_v del $\text{CO}_2(\nu_3)$ a estas alturas no dependen de la concentración del CO_2 de forma significativa (0.5 K menor que en el caso nominal a 105 km). Por otra parte, en esas regiones atmosféricas, las bandas ν_3 del CO_2 son ópticamente delgadas y, por tanto, la radiancia es directamente proporcional a la concentración de CO_2 (ver p.e. *López-Puertas y col. [2001]* o la Ecuación 2.56). En consecuencia, como se muestra en la Figura 5.28, el cambio relativo en la radiancia en $4.3 \mu\text{m}$ es del orden del cambio en CO_2 (menor que el nominal en hasta un 40 % a 120 km), aunque se extiende a alturas inferiores debido a las características de la observación en el limbo.

El efecto de la disminución de la concentración de CO_2 entre 80 y 105 km (caso b) sobre las temperaturas vibracionales en $4.3 \mu\text{m}$ se representa en la Figura 5.26. La población de los niveles $\text{CO}_2(\nu_3)$ por debajo de 100 km no se ven afectadas significativamente por la variación de CO_2 . Por encima de esta altura, sin embargo, la T_v del nivel 00^01 aumenta hasta 1.5 K al disminuir el CO_2 . Esto se debe a que, en estas regiones, este nivel se activa por absorción de flujo ascendente. Este flujo es mayor cuanto mayor sea la T_v del nivel 00^01 en la región donde se genera la radiación ascendente, esto es, allí donde la banda fundamental en $4.3 \mu\text{m}$ (00^01-00^00) deja de ser ópticamente espesa (a partir de los 90 km). El espesor óptico es proporcional a la concentración luego esta altura es inferior por ser el CO_2 menor en esta región. Como la T_v del estado 00^01 aumenta al disminuir la altura

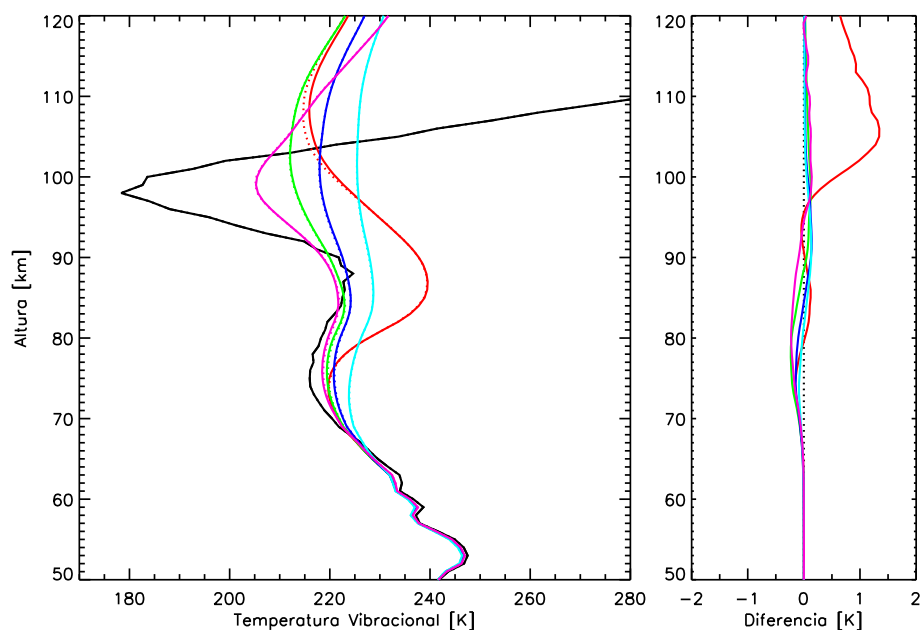


Figura 5.26: Temperaturas vibracionales de los niveles del $\text{CO}_2(\nu_3)$ utilizadas en este estudio (línea punteada) y disminuyendo el $[\text{CO}_2]$ entre 80 y 105 km (ver Figura 5.27) (línea continua) y diferencias entre ellas (panel dcho.) (negro: T_k ; rojo: 00^01 del isótopo 626; verde: 00^01 del 636; azul: 00^01 del 628; celeste: 00^01 del 627; y rosa: 01^11 del 626).

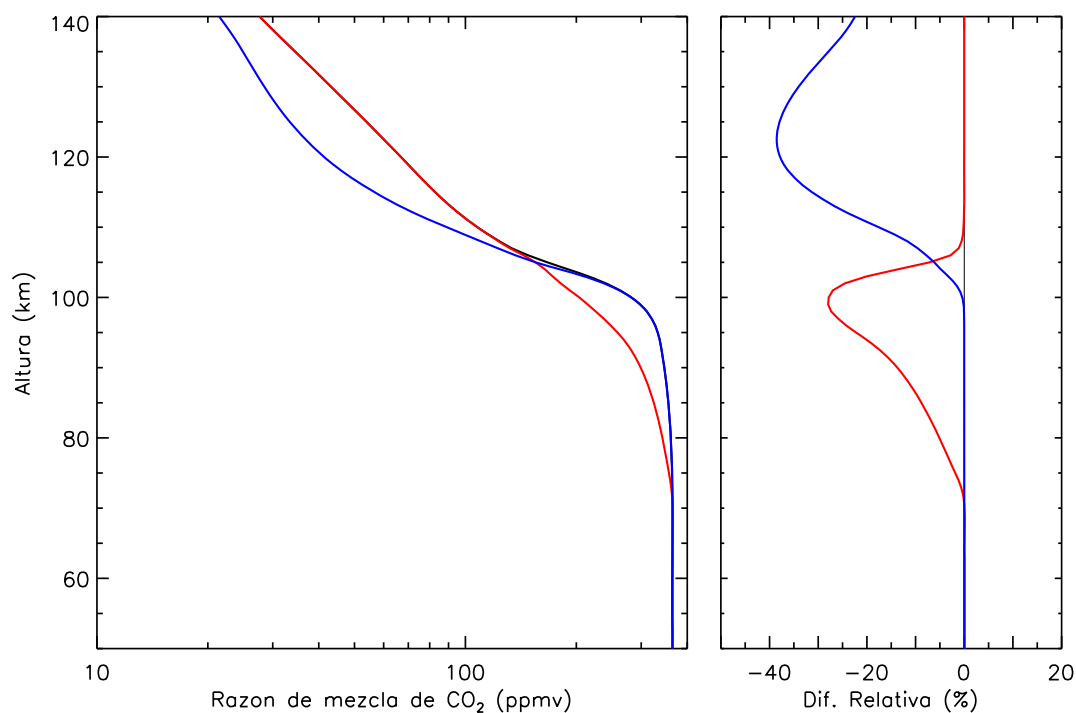


Figura 5.27: Perfiles de CO₂ utilizados para evaluar su efecto sobre la radiancia simulada en $4.3 \mu\text{m}$.

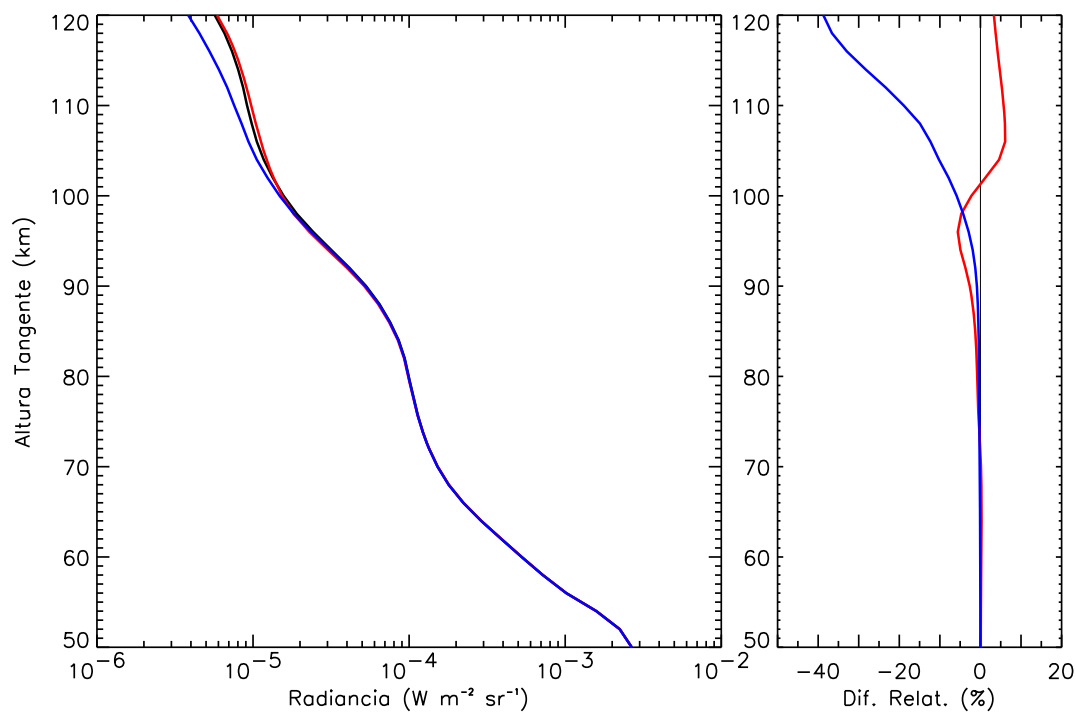


Figura 5.28: Efecto sobre la radiancia en $4.3 \mu\text{m}$ provocado por las variaciones en la concentración en CO₂ representadas en la Figura 5.27. Nótese que el intervalo de altura es distinto.

entre 90 y 105 km, la radiación ascendente es mayor si hay menos CO_2 . Por tanto, el nivel 00^01 está más excitado por encima de 105 km que en el caso nominal.

La respuesta de la radiancia a la disminución de CO_2 del caso b se muestra en la Figura 5.28. Por encima de 105 km, la radiancia aumenta en un 5 % porque lo hace la T_v del nivel 00^01 . Por debajo de 100 km, la radiancia disminuye en un 5 %, es decir, en menor proporción que el CO_2 . Esto se debe a que, si bien la emisión es menor por serlo el CO_2 , la contribución de capas superiores a la radiancia en estas alturas tangentes es mayor. Además, al haber menos CO_2 , la transmitancia también es mayor por lo que un mayor número de cuantos es capaz de escapar y alcanzar el instrumento. En todo caso, los cambios en la concentración de CO_2 por debajo de 100 km no tienen un efecto significativo sobre la radiancia en $4.3 \mu\text{m}$ a ninguna altura.

Efecto de la distribución del $\text{OH}(\nu)$

En las simulaciones presentadas, la distribución de OH^* de referencia, utilizada para derivar $\text{OH}(\nu)$ en cada evento, ha sido calculada mediante el uso de un modelo fotoquímico en el que se incluye relajación mono-cuanto del OH^* . En la Figura 5.29 se muestra el efecto sobre la densidad de moléculas en los estados vibracionales $\nu < 9$ del hidroxilo al incluir relajación multi-cuanto en colisiones con el O_2 , especie que desactiva al OH^* de manera más efectiva. Corroborando las predicciones de *Adler-Golden* [1997], la población de los estados vibracionales del OH alrededor de 85 km disminuye desde un 20 % (en el caso de los niveles $\nu=1, 3$) a más de un 50 % (en el caso de $\nu=5, 6, 7$) o permanece inalterable (en el caso de $\nu=9$). El número de moléculas en el estado $\nu=9$ no se ve afectado porque, al cambiar solamente los niveles hacia los que se desexcitan, las pérdidas por colisiones con O_2 no varían. Por otra parte, al permitir que las moléculas no se desexciten exclusivamente en cascada, los niveles de energía intermedia se pueblan en menor medida. Por ejemplo, la producción de moléculas en el nivel $\text{OH}(\nu=8)$ mediante colisiones con el O_2 , que proviene tan sólo de la desexcitación del nivel $\text{OH}(\nu=9)$, se reduce sustancialmente (en un 86 %) si se considera mecanismo multi-cuanto. En principio, lo opuesto sucedería con los niveles de menor energía ($\nu=1-3$). Sin embargo, al permitir desactivaciones directas hacia el nivel $\text{OH}(\nu=0)$, el sistema OH^* posee menos energía. Por ello, también la población de niveles ($\nu=1-3$) se ve reducida aunque en menor medida que el resto.

El efecto de la nueva distribución de referencia de OH^* sobre la radiancia en $4.3 \mu\text{m}$ para el evento 22 de la órbita 1264 se muestra en la Figura 5.30. La variación es pequeña porque aunque la excitación global de los niveles OH^* de referencia disminuye, también lo hace la radiancia de referencia de los canales 8 y 9. Por esto, la excitación global de OH^* invertida es casi invariable y sólo cambia la excitación relativa de cada nivel con respecto a los demás niveles. Esto se traduce en una disminución en las emisiones del CO_2 de menos del 2 %.

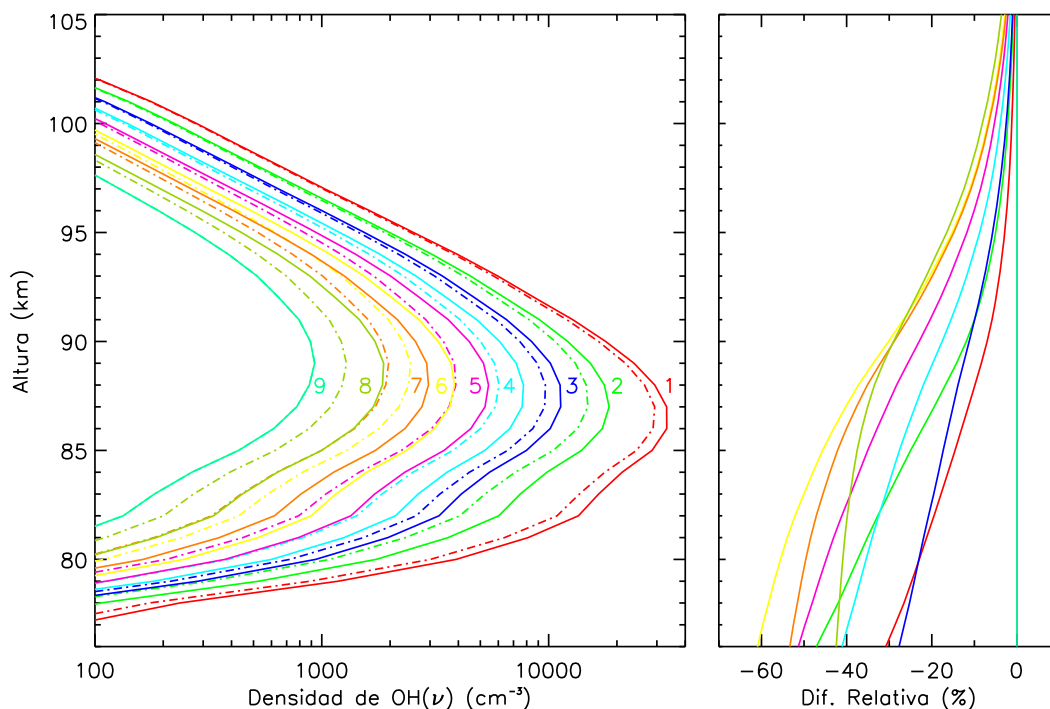


Figura 5.29: Distribuciones $\text{OH}(\nu=1-9)$ de referencia (OH_{ref}^*) al considerar relajación mono-cuanto (línea continua) y multi-cuanto (línea discontinua); y diferencia relativa (panel dcho). Nótese que las poblaciones del nivel $\text{OH}(9)$ están superpuestas.

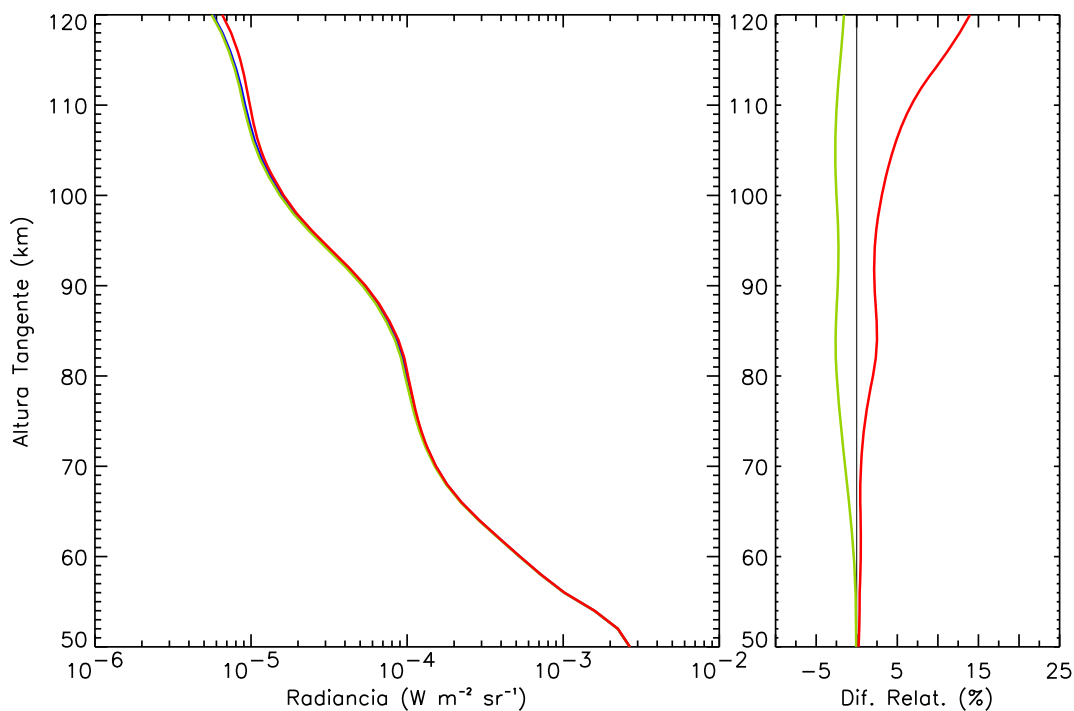


Figura 5.30: Efecto de la utilización de las distribuciones de OH_{ref}^* de la Figura 5.29 para derivar OH^* (verde) y de un aumento de $k_{vv}(\text{N}_2\text{-CO}_2)$ del 30 % (roja) sobre la radiancia nocturna en $4.3 \mu\text{m}$ medida por SABER.

Efecto de k_{vv}

Otra de las incertidumbres que intervienen son las relativas a las constantes colisionales utilizadas en el modelo de no-ETL. El coeficiente más directamente relacionado con este estudio, y aquél que puede tener mayor impacto sobre los resultados, es la tasa de transferencia de energía vibracional entre el nitrógeno molecular y el dióxido de carbono, es decir, k_{vv} del proceso 5.2.

El valor nominal utilizado en este trabajo es el recomendado por *Inoue y Tsuchiya* [1975] $5 \times 10^{-13} \sqrt{300/T} \text{ cm}^3 \text{ s}^{-1}$. Este valor también se ha utilizado en otros análisis previos de radiancias en $4.3 \mu\text{m}$ (ver, p.e., *Nebel y col.*, 1994; *López-Puertas y col.*, 1998b). Como ya se ha descrito de manera detallada en la sección 3.3.1, esta constante va acompañada de una incertidumbre de $\pm 25\%$. Con el fin de no subestimar el efecto de dicha incertidumbre sobre los resultados obtenidos, se ha estimado el error en la radiancia simulada asociado a una incertidumbre en k_{vv} del 30 %.

Según se observa en la Figura 5.29, en la que se muestran radiancias para el evento 22 de la órbita 1264, el aumentar dicha constante produce un aumento en la radiancia desde menos del 3 %, por debajo de 100 km, hasta un 15 % a 120 km. Lo que sucede es que el acoplamiento entre el $\text{N}_2(1)$ y el $\text{CO}_2(\nu_3)$ por debajo de 100 km es tan alto que un pequeño aumento del mismo apenas afecta la excitación de los estados ν_3 . Por encima de esa altura, el $\text{N}_2(1)$ está en ETL y aumentar la constante implica un aumento en la población de $\text{CO}_2(\nu_3)$ con el consiguiente aumento en la radiancia en $4.3 \mu\text{m}$.

5.6. Resumen y discusión

En este trabajo se ha llevado a cabo un estudio exhaustivo de las medidas nocturnas del instrumento SABER en $4.3 \mu\text{m}$ en condiciones no-aurorales. Dichas medidas se subestiman si se considera el mecanismo de relajación del hidroxilo en colisiones con el nitrógeno molecular como se había considerado hasta ahora. Otros mecanismos, como la excitación del $\text{CO}_2(\nu_3)$ ya sea directa, mediante colisiones con el OH^* , o indirecta, a través del oxígeno molecular, no producen un aumento de la radiancia suficiente para explicar las medidas. Tampoco lo es la contribución directa del OH^* a la radiancia en $4.3 \mu\text{m}$.

Sin embargo, la concordancia entre simulaciones de radiancia alrededor de $4.3 \mu\text{m}$ y las medidas nocturnas de SABER es muy buena en todo el intervalo de altura considerado si se incluye un mecanismo multi-cuanto de excitación de $\text{N}_2(1)$ por el OH^* mediante el cual, en media, se excitan 2.8 moléculas de $\text{N}_2(1)$ por colisión.

Los pocos desacuerdos encontrados entre las radiancias simuladas incluyendo este mecanismo y las medidas se justifican a continuación identificando correlaciones entre las diferencias y la temperatura cinética (Figura 5.9), las radiancias de los canales tanto de OH (Figura 5.5) como de CO_2 (Figura 5.4) consideradas o la distribución de dióxido de

carbono (Figura 5.10).

Entre 50 y 60 km, las diferencias entre las simulaciones y las medidas de SABER en $4.3 \mu\text{m}$, que en media son de alrededor de -10% , probablemente se deben a un error en la versión v1.03 de la temperatura cinética invertida de SABER, ya que la emisión a dichas alturas está directamente relacionada con la T_k local por estar los niveles ν_3 del CO_2 en ETL. En concreto, corresponderían a una subestimación de T_k de unos 3 K, valor que coincide con las estimaciones realizadas en el Capítulo 4. Por otro lado, las regiones en donde más se subestima la radiancia son aquellas en las que, habiendo una elevada radiancia en $4.3 \mu\text{m}$, la temperatura cinética es especialmente baja (p.e. en los eventos 83-93 de la órbita 1264 o 79-82 de la órbita 3098). Eso podría deberse a un mayor error en la T_k .

Las diferencias entre simulaciones y medidas encontradas en la alta mesosfera de alrededor de -5% en media para las cuatro órbitas consideradas, son también consistentes con dicho error sistemático de 3 K en la temperatura de la baja mesosfera (que produce una disminución en la radiancia de algo más del 5% a 70 km).

Por encima de 105 km, el comportamiento de las diferencias no es sistemático sino que depende de la órbita. Por tanto, no debe estar relacionado con un error en la constante que caracteriza las colisiones V-V del N_2 y el CO_2 . Sin embargo, a los eventos en los que se sobreestima la radiancia por encima de 105 km les corresponden sistemáticamente los perfiles de razón de mezcla de CO_2 más elevados. Por ejemplo, en el caso de los eventos 47-52 de la órbita 4272, tanto las diferencias en radiancia como en el $[\text{CO}_2]$ son especialmente elevados a esas alturas. La diferencia media entre radiancias medidas y simuladas y la concentración de CO_2 en media para la órbita 1264 es mayor que en los casos de solsticio en la baja termosfera. Luego, estas diferencias pueden estar relacionadas con un exceso en la concentración de CO_2 de la misma magnitud. En definitiva, el CO_2 de TIME-GCM utilizado en este trabajo parece estar sobreestimando el real entre un 20 y un 40 %.

Tal y como se observa en las medidas en el canal en $4.3 \mu\text{m}$ de SABER, durante los eventos 65-75 de la órbita 3046 de SABER dominaban condiciones aurorales. Por no ser motivo principal de este trabajo, no se ha considerado el modelado las emisiones del CO_2 en estas condiciones. Por ello, la radiancia simulada para estos eventos está subestimada en más de un 40 %.

En resumen, las diferencias encontradas entre medidas en $4.3 \mu\text{m}$ y simulaciones incluyendo un mecanismo de excitación de los niveles $\text{CO}_2(\nu_3)$ tan eficaz como es el multi-cuanto son, salvo excepciones justificadas, menores del $5-10\%$ y menores que la desviación estándar.

Por tanto, el hecho de considerar un mecanismo en el que, al desexcitarse una molécula de $\text{OH}(\nu)$, se produce más de una molécula excitada de nitrógeno molecular (en media 2.8 moléculas) con la consiguiente transferencia de energía vibracional al CO_2 , permite

reproducir las medidas realizadas por SABER en $4.3 \mu\text{m}$ durante la noche no sólo en la región atmosférica situada alrededor de la capa de OH sino a alturas por encima de la misma.

Según la teoría de Schwartz-Slowsky-Herzfeld sobre la relajación vibracional en los gases (*Schwartz y col.*, 1952), los mecanismos con relajación lenta y resonantes suelen producirse en saltos mono-cuanto ($\Delta\nu=1$). Asimismo, la relajación es menos eficiente si no se generan complejos intermedios estables (*Duff y Sharma*, 1997). Esto quiere decir que es posible que las probabilidades utilizadas en este trabajo para caracterizar la desexcitación multi-cuanto ($\Delta\nu\geq 1$) del $\text{OH}(\nu)$ tras colisiones con el N_2 sean elevadas, según las predicciones teóricas, ya que han sido obtenidas a partir de hipótesis referidas a colisiones entre OH y O_2 , que son procesos más rápidos y en los que se forma un complejo intermedio de oxígeno atómico. No obstante, aunque quizás no sea éste el mecanismo exacto, debería existir todo un abanico de probabilidades intermedias entre el eficaz mecanismo multi-cuanto en colisiones con O_2 y la relajación mono-cuanto total. En este caso debe encontrarse el N_2 .

Lo que este análisis no da lugar a duda alguna es que se necesita producir una media de 2.8 moléculas de $\text{N}_2(1)$ por colisión con el $\text{OH}(\nu)$. De hecho, el sistema OH^* posee suficiente energía como para excitar en media 8.4 moléculas de $\text{N}_2(1)$ por colisión con lo que, para reproducir las medidas de SABER en $4.3 \mu\text{m}$, sería suficiente una eficiencia del 30 %.

De cualquier modo, al modelar el mecanismo multi-cuanto, en este estudio se ha conseguido determinar con precisión el número de moléculas de $\text{N}_2(1)$ necesarias para explicar las emisiones alrededor de $4.3 \mu\text{m}$ en condiciones nocturnas. Además, ha quedado patente la relación que esa excitación debe tener con el hidroxilo, o al menos, que la excitación de los niveles $\text{CO}_2(\nu_3)$ debe suceder alrededor de 85 km.

Por otra parte, el hecho de considerar el mecanismo multi-cuanto en colisiones OH- N_2 en el modelo químico del hidroxilo no tiene consecuencias sobre la distribución de OH^* , ya que el N_2 no relaja al hidroxilo muy eficazmente. El considerarlo en colisiones OH- O_2 tiene un mayor efecto. De hecho, la población relativa de los estados vibracionales del OH varía sustancialmente. Sin embargo, esto no afecta de manera apreciable a las simulaciones en $4.3 \mu\text{m}$ ya que la excitación global de OH^* permanece casi inalterada por ser invertida a partir de las medidas simultáneas de SABER.

En definitiva, las radiancias nocturnas de SABER en $4.3 \mu\text{m}$ pueden ser reproducidas si se considera, junto a una tasa de colisiones entre el OH^* y el N_2 un 40 % mayor que a temperatura ambiente para considerar las bajas temperaturas de la mesopausa, un proceso de excitación del $\text{N}_2(1)$ 2.8 veces más eficaz que el mecanismo mono-cuanto hasta la fecha considerado.

Parte III

Conclusiones y trabajo futuro

Capítulo 6

Conclusiones

El radiómetro SABER a bordo de la misión TIMED de NASA ha sido pionero al medir la emisión de la atmósfera media-alta en el infrarrojo a escala global e ininterrumpidamente desde su lanzamiento a finales del año 2001. Este instrumento es capaz de producir más de 1500 perfiles diarios en cada uno de sus diez canales desde 15 a $1.27 \mu\text{m}$. A partir de estas medidas se derivan la temperatura cinética y la concentración de los constituyentes atmosféricos, incluyendo el dióxido de carbono, desde la estratosfera hasta la baja termosfera. Para ello se utilizan códigos de inversión en los que se consideran procesos de no-ETL, es decir, incluyendo las poblaciones en no-ETL de los estados responsables de las emisiones. El considerar estos procesos es imprescindible para invertir de manera precisa los parámetros atmosféricos en la mesosfera y la baja termosfera.

A continuación se detallan las principales conclusiones del estudio de los datos de SABER realizado en este trabajo.

1. Viabilidad de la inversión de T_k/CO_2 en no-ETL

La temperatura y el dióxido de carbono de SABER se invierten simultáneamente en no-ETL a partir de sus medidas de las emisiones del CO_2 en 15 y $4.3 \mu\text{m}$. Se ha encontrado, al simular la inversión simultánea de T_k/CO_2 a partir de radiancias sintéticas utilizando el código operacional en no-ETL de SABER, que:

- La temperatura invertida reproduce los perfiles originales hasta 105 km con diferencias menores de 1 K excepto en el caso extremo de verano polar en el que son menores de 2 K;
- Las diferencias entre dióxido de carbono invertido y el original son menores del 10 % hasta los 140 km en todos los casos excepto en el de verano polar por encima de 120 km donde son menores del 15 %;

- Los errores en la temperatura cinética debidos al ruido del instrumento son menores de 1 K por debajo de 85 km y menores de 3 K hasta los 100 km excepto en verano polar que son menores de 1 K por debajo de 80 km, de unos 3 K alrededor de 85 km y menores de 6 K por debajo de 100 km;
- Los errores en la concentración de CO₂ debidos al ruido del instrumento son menores del 5 % por debajo de 110 km y menores del 10 % por encima excepto en verano polar en que son menores del 10 % por debajo de 110 km y menores del 15 % por encima.

Además de estas simulaciones, se ha aplicado el código de inversión a medidas reales (derivando un número elevado de perfiles de T_k a partir de medidas de SABER en 15 μm) y se ha comprobado que el código de inversión en no-ETL responde adecuadamente presentando muy pocos casos de comportamiento inestable o de resultados poco realistas.

Por esto, se concluye que la inversión de p- T_k y CO₂ a partir de las medidas en 15 y 4.3 μm en la alta mesosfera y la baja termosfera, donde se precisa incluir los procesos de no-ETL y realizada por primera vez con este instrumento, es factible.

2. Errores debidos a los parámetros colisionales

En cuanto al estudio de sensibilidad de la inversión simultánea de T_k y CO₂ a incertidumbres en los parámetros colisionales del modelo de no-ETL, se ha encontrado que los errores inducidos en la temperatura son:

- Menores de 1 K por debajo de 80 km;
- Menores de 3 K entre 80 y 100 km (90 km en invierno polar); y
- $-2/+5$ K a 100 km.

El verano polar es una excepción a este comportamiento. En ese caso, los errores son:

- Menores de 2 K por debajo de 80 km;
- Menores de 4 K entre 80 y 95 km; y
- $-7/+19$ K a 100 km.

El error en la temperatura de SABER por encima de 105 km es muy elevado. Por tanto, por encima de dicha altura se deriva la densidad del CO₂ (cm^{-3}) pero no su razón de mezcla. Los errores en el CO₂ invertido en condiciones diurnas debidos a incertidumbres en las tasas colisionales son:

- Menores del 15 % hasta 105 km (hasta 100 km en verano polar);

- $-25/+20\%$ a 110 km;
- $-15/+10\%$ a 125 km; y
- $\pm 20\%$ a 130 km ($\pm 25\%$ en verano polar).

Estos errores son menores cuanto mayor sea el ángulo cenital solar, en definitiva, cuando los efectos de no-ETL son más pequeños.

Los mayores errores se deben a las incertidumbres en las tasas de colisiones entre el CO_2 y el oxígeno atómico y entre el N_2 y el $\text{O}(^1\text{D})$. Para cumplir el objetivo previsto de SABER de obtener la temperatura hasta 100 km con un error menor de 3 K y el dióxido de carbono hasta 140 km con un error menor del 15% sería necesario reducir dichas incertidumbres mediante medidas de laboratorio. Las recientes medidas de $k_{\text{CO}_2-\text{O}}$ (*Castle y col.*, 2003), de confirmarse, paliarían parcialmente estos errores.

Aunque el error inducido en la temperatura y el dióxido de carbono invertidos por incertidumbres en el resto de constantes colisionales no son significativos si se consideran individualmente, el efecto acumulado es significativo. Por ello, también sería conveniente mejorar las medidas de la tasa de colisiones entre el nitrógeno molecular y el oxígeno atómico.

3. Validación de la temperatura

Con respecto a la validación de la temperatura cinética, los resultados obtenidos en esta memoria indican una alta calidad de las medidas de SABER en la media y baja atmósfera. La temperatura invertida en no-ETL, además de ser más realista, reproduce las medidas de lídares con mayor exactitud que la invertida en ETL. En consecuencia, la inversión de la temperatura cinética en no-ETL a partir de $15\ \mu\text{m}$ es indispensable para obtener medidas precisas por encima de 70 km.

Tras comparar la temperatura de SABER (derivada considerando no-ETL) con la de seis lídares situados en diferentes latitudes, se concluye que la temperatura del primero es:

- I) 2–3 K mayor que la de los lídares por debajo de 35 km;
- II) ~ 5 K menor que las de los lídares entre 35 y 80 km; y
- III) ~ 5 –8 K menor que las de los lídares por encima de 80 km.

Las diferencias en la temperatura de los puntos I) y II) parecen debidas a un error en la presión de referencia p_0 que se obtiene mediante la técnica de ‘dos colores’. Las diferencias de temperatura se explican con un cambio en presión equivalente a un desplazamiento de altura de tan sólo +200 m.

La incertidumbre en la tasa de colisiones entre el dióxido de carbono y el oxígeno atómico o en la concentración de este último produce errores en la temperatura invertida de 3 a 7 K entre 95 y 105 km. Del mismo modo, el error esperado de la concentración de CO₂ induce un error en la temperatura de 1 a 4 K entre 85 y 105 km. Por tanto, las diferencias del punto III) se pueden explicar disminuyendo la constante $k_{\text{CO}_2-\text{O}}$ a $3 \times 10^{-12} \text{cm}^3 \text{s}^{-1}$ (consistente con las últimas medidas de laboratorio) o disminuyendo la concentración de CO₂ por encima de 80-90 km (consistente con ISAMS y CRISTA) o incluso ambos.

Cabe también destacar el elevado número de capas de inversión encontrados en los perfiles de temperatura. Se ha mostrado que SABER es capaz de detectar dichas capas.

4. Medidas nocturnas en 4.3 μm

La elevada relación señal-ruido del instrumento SABER proporciona unas excelentes medidas de las emisiones atmosféricas nocturnas en 4.3 μm . Las medidas simultáneas que realiza este instrumento de presión, temperatura y emisiones infrarrojas del hidroxilo excitado vibracionalmente OH(ν) ofrecen una oportunidad sin precedentes para entender el comportamiento de la mesosfera y la baja termosfera en condiciones nocturnas. Con respecto al análisis de las medidas de dichas emisiones se concluye que:

- Los mecanismos de excitación nocturna del dióxido de carbono considerados hasta la fecha subestiman las radiancias de SABER en un 50 %;
- Las radiancias de SABER muestran una fuerte correlación entre las emisiones del CO₂ en 4.3 μm y las del OH* en 2.0 y 1.6 μm . Ello sugiere que la excitación del primero en la alta mesosfera proviene directa o indirectamente del segundo;
- La contribución directa del OH en esta longitud de onda es insuficiente para explicar esta subestimación;
- Otros mecanismos no incluidos hasta ahora, como la excitación directa de los estados CO₂(ν_3) a partir del OH(ν) o indirecta vía oxígeno molecular, tampoco son capaces de reproducir las radiancias;
- Las radiancias nocturnas en 4.3 μm se reproducen adecuadamente al introducir un mecanismo muy eficaz de transferencia de energía vibracional entre el OH* y el N₂ mediante el cual se logra excitar, en promedio, 2.8-3 moléculas de N₂(1) en cada colisión efectiva con el OH(ν). En última instancia, esto produce una elevada excitación del CO₂(ν_3);

- Una posible vía para producir dicha excitación del $N_2(1)$ es la desactivación multi-cuanto del OH^* en colisiones con el N_2 análoga a la propuesta por *Adler-Golden* [1997] para colisiones con el O_2 ;
- Además del mecanismo anterior, es necesario considerar una corrección de las constantes de las colisiones $OH(\nu)-N_2$ de *Adler-Golden* en un factor 1.4 relacionado con las bajas temperaturas de la mesosfera terrestre.
- Incluir un mecanismo de estas características en los algoritmos de inversión de dióxido de carbono de SABER es esencial para obtener un CO_2 realista en condiciones nocturnas.

El mecanismo propuesto es factible pues el sistema formado por los estados vibracionales del OH tiene energía suficiente como para producir esa excitación. Además, no afecta a las poblaciones de los estados $OH(\nu)$ ya que el O_2 es notablemente más efectivo que el N_2 en su desactivación.

En esta memoria ha quedado patente no sólo el buen funcionamiento del instrumento SABER y del código de inversión de temperatura y dióxido de carbono sino también la alta calidad de las medidas de SABER y el gran potencial de las mismas para extraer información de los procesos físicos, químicos y dinámicos que tienen lugar en la media-alta atmósfera terrestre y así ampliar nuestro conocimiento sobre esta región prácticamente inexplorada de forma global y prolongada hasta la fecha.

Capítulo 7

Sugerencias para trabajos futuros

Las sugerencias para trabajos futuros que se proponen como continuación o aplicación de este estudio:

- En primer lugar, realizado el análisis de errores sistemáticos en esta memoria, sería prioritario invertir un número elevado de perfiles de concentración de dióxido de carbono en condiciones diurnas hasta los 140 km y el análisis de su comportamiento en función de la latitud y la época del año. Hasta la fecha no se ha invertido el CO₂ en condiciones de no-ETL de manera global y continua. La viabilidad de la inversión de este compuesto en no-ETL demostrada en este trabajo invita a pensar que nuestro conocimiento sobre la distribución vertical y latitudinal del CO₂ se verá ampliado en un futuro cercano.
- Una de las incógnitas que hasta la fecha no se ha resuelto con exactitud es la localización de la homopausa, es decir, la altura a la que los compuestos atmosféricos dejan de estar bien mezclados. La distribución de CO₂ invertida del amplio conjunto de medidas de SABER muy probablemente permitirá dar respuesta a este interrogante.
- Tras las conclusiones alcanzadas en esta memoria sobre el análisis de las medidas nocturnas de SABER en 4.3 μm , se abre una puerta a la inversión precisa de CO₂ durante la noche, hasta la fecha inviable debido al desconocimiento del comportamiento de estas emisiones. Con la parametrización de los mecanismos de excitación del CO₂(ν_3) presentada aquí se facilitará extender la inversión del dióxido de carbono a condiciones nocturnas.
- También sería conveniente la comparación de las medidas de SABER con las del instrumento MIPAS. Éste es un instrumento de alta resolución espectral que mide en 15 y 4.3 μm proporcionando información sobre p-T_k, la razón de mezcla del CO₂ y los procesos de no-ETL. Por tanto, es adecuado para la intercomparación de las medidas de temperatura y de dióxido de carbono. Asimismo, los resultados de no-ETL que se han obtenido con MIPAS se pueden aplicar a SABER.

- Como se ha mencionado en esta memoria, una de las características que se ha detectado en los perfiles de temperatura de SABER es la alta frecuencia de aparición de capas de inversión en la alta mesosfera. El origen de este fenómeno no está determinado hoy por hoy, aunque se cree debido a la interacción entre distintos procesos dinámicos (ondas de gravedad y mareas) y al calentamiento debido a procesos químicos (reacción exotérmica entre el ozono y el hidrógeno atómico). Es conveniente llevar a cabo un estudio sistemático del comportamiento de la temperatura cinética, su evolución en función de la estación y la latitud para determinar las condiciones bajo las que estas capas aparecen y así aportar un análisis estadístico que ayudará a resolver esta cuestión.
- Aspectos como el carácter bimodal de la mesopausa terrestre pueden ser también confirmados o desmentidos a partir de las medidas globales de T_k de SABER. Esta hipótesis, establecida por primera vez por *von Zahn y col.* [1996] y corroborada por las medidas de *Lübken y von Zahn* [1991] o *She y col.* [2000], plantea que la mesopausa se sitúa en dos únicas alturas: alrededor de 85 km y de 100 km, siendo ésta última característica del hemisferio de invierno, con un salto hacia la altura inferior alrededor de los 20° del hemisferio de verano. El origen de esta peculiaridad aún es desconocido aunque se cree relacionado con la dinámica y el balance energético de esta región.
- Es necesario realizar medidas de laboratorio de las tasas colisionales de $\text{CO}_2\text{-O}$, $\text{O}(^1\text{D})\text{-N}_2$, y $\text{N}_2\text{-O}$ para reducir los errores en la temperatura y la abundancia de CO_2 invertidos de las medidas en 15 y 4.3 μm . Asimismo, y tal y como se prevé en los objetivos de SABER, es deseable inferir las concentraciones de $\text{O}(^1\text{D})$ simultáneamente (a partir de las medidas en 1.27 μm y de acuerdo con el ozono invertido y el modelo de $\text{O}_2(^1\Delta)$ de *Mlynczak y col.* [1993]) para aumentar la calidad de la temperatura y el CO_2 invertidos en la baja termosfera.
- Otro aspecto a tener en cuenta es el balance energético en la mesosfera y la baja termosfera terrestres. Una vez demostrada la alta capacidad de SABER para producir perfiles precisos de temperatura y CO_2 , estos se pueden utilizar para calcular el balance energético de esta región atmosférica especialmente en lo que concierne al enfriamiento radiativo provocado por el CO_2 en 15 μm .
- Se ha observado de las medidas nocturnas de SABER que la razón entre los máximos de radiancia en 1.6 μm (sensibles a los estados vibracionales del hidroxilo menos energéticos) y en 2.0 μm (sensibles a los estados más energéticos) disminuye desde la puesta del Sol y hasta la media noche. Este estudio debe ser ampliado a un número elevado de días para establecer el comportamiento de la altura del pico, la densidad y la distribución vibracional del hidroxilo en función de la hora local

y la interrelación entre ellos, y así dilucidar los mecanismos que tienen lugar en la atmósfera nocturna.

Aunque inicialmente la vida nominal de TIMED era de dos años, NASA ha extendido la misión a otros dos más durante los que SABER, en caso de seguir funcionando como hasta hoy, continuará proporcionando datos de gran calidad, como se ha probado en esta memoria, permitiendo que la media-alta atmósfera deje de ser una frontera de nuestro conocimiento.

Parte IV
Apéndices

Apéndice A

Niveles vibracionales del CO₂ incluidos en el modelo de no-ETL

En la Tabla A.1 se muestran los niveles vibracionales de los isótopos del CO₂ incluidos en el modelo de no-ETL utilizado en esta memoria. Se indica para cada nivel la notación estándar (notación de Herzberg) así como la notación utilizada en la base de datos de HITRAN y su energía en cm⁻¹.

Tabla A.1: Niveles vibracionales del CO₂.

Nº	Isótopo	Nivel	Nivel ^a	Energía (cm ⁻¹)
1	626	01 ¹ 0	01101	667.380
2	626	02 ⁰ 0	10002	1285.409
3	626	02 ² 0	02201	1335.132
4	626	10 ⁰ 0	10001	1388.185
5	626	03 ¹ 0	11102	1932.470
6	626	03 ³ 0	03301	2003.246
7	626	11 ¹ 0	11101	2076.856
8	626	00 ⁰ 1	00011	2349.143
9	626	04 ⁰ 0	20003	2548.367
10	626	04 ² 0	12202	2585.022
11	626	12 ⁰ 0	20002	2671.143
12	626	04 ⁴ 0	04401	2671.717
13	626	12 ² 0	12201	2760.725
14	626	20 ⁰ 0	20001	2797.136
15	626	01 ¹ 1	01111	3004.012

^aNotación HITRAN

Nº	Isótopo	Nivel	Nivel ^a	Energía (cm ⁻¹)
16	626	02 ⁰ 1	10012	3612.842
17	626	02 ² 1	02211	3659.273
18	626	10 ⁰ 1	10011	3714.783
19	626	03 ¹ 1	11112	4247.705
20	626	03 ³ 1	03311	4314.913
21	626	11 ¹ 1	11111	4390.629
22	626	00 ⁰ 2	00021	4673.320
23	626	04 ⁰ 1	20013	4853.623
24	626	04 ² 1	12212	4887.990
25	626	04 ⁴ 1	04411	4970.930
26	626	12 ⁰ 1	20012	4977.840
27	626	12 ² 1	12211	5061.780
28	626	20 ⁰ 1	20011	5099.600
29	636	01 ¹ 0	01101	648.478
30	636	02 ⁰ 0	10002	1265.828

^aNotación HITRAN

Tabla A.1: Niveles vibracionales del CO₂. (cont.)

N°	Isótopo	Nivel	Nivel ^a	Energía (cm ⁻¹)
31	636	02 ² 0	02201	1297.264
32	636	10 ⁰ 0	10001	1370.063
33	636	03 ¹ 0	11102	1896.538
34	636	03 ³ 0	03301	1946.351
35	636	11 ¹ 0	11101	2037.093
36	636	00 ⁰ 1	00011	2283.488
37	636	04 ⁰ 0	20003	2507.527
38	636	04 ² 0	12202	2531.679
39	636	12 ⁰ 0	20002	2595.759
40	636	04 ⁴ 0	04401	2643.062
41	636	12 ² 0	12201	2700.264
42	636	20 ⁰ 0	20001	2750.597
43	636	01 ¹ 1	01111	2920.239
44	636	02 ⁰ 1	10012	3527.738
45	636	02 ² 1	02211	3580.750
46	636	10 ⁰ 1	10011	3632.910
47	636	03 ¹ 1	11112	4147.232
48	636	03 ³ 1	03311	4194.707
49	636	11 ¹ 1	11111	4287.698
50	636	04 ⁰ 1	20013	4748.063
51	636	04 ² 1	12212	4770.976
52	636	04 ⁴ 1	04411	4832.437
53	636	12 ⁰ 1	20012	4887.385

^aNotación HITRAN

N°	Isótopo	Nivel	Nivel ^a	Energía (cm ⁻¹)
54	636	12 ² 1	12211	4983.834
55	636	20 ⁰ 1	20011	4991.353
56	628	01 ¹ 0	01101	662.373
57	628	02 ⁰ 0	10002	1259.426
58	628	02 ² 0	02201	1325.141
59	628	10 ⁰ 0	10001	1365.844
60	628	03 ¹ 0	11102	1901.737
61	628	03 ³ 0	03301	1988.328
62	628	11 ¹ 0	11101	2049.339
63	628	00 ⁰ 1	00011	2332.113
64	627	01 ¹ 0	01101	664.729
65	627	02 ⁰ 0	10002	1272.287
66	627	02 ² 0	02201	1329.843
67	627	10 ⁰ 0	10001	1376.027
68	627	03 ¹ 0	11102	1916.695
69	627	03 ³ 0	03301	1995.352
70	627	11 ¹ 0	11101	2062.099
71	627	00 ⁰ 1	00011	2340.014
72	638	01 ¹ 0	01101	643.329
73	638	00 ⁰ 1	00011	2265.971
74	638	01 ¹ 1	01111	2897.709
75	637	01 ¹ 0	01101	645.744
76	637	00 ⁰ 1	00011	2274.088

^aNotación HITRAN

Apéndice B

Bandas vibracionales del CO₂

En la Tabla B.1 se muestran las principales bandas vibracionales del CO₂. Se indica los niveles tanto en notación estándar (notación de Herzberg) como en notación de la base de datos de HITRAN junto a la energía (número de onda) de la banda y su intensidad.

Tabla B.1: Principales bandas vibracionales del CO₂.

Grupo	Isótopo	Nivel Superior ^a	Nivel Inferior ^a	Nivel Superior ^b	Nivel Inferior ^b	$\Delta\nu$ (cm ⁻¹)	Intensidad ^c
15 FB	626	01 ¹ 0	00 ⁰ 0	01101	00001	667.380	79451.727
		01 ¹ 0	00 ⁰ 0	01101	00001	648.478	824.749
		01 ¹ 0	00 ⁰ 0	01101	00001	662.374	317.399
		01 ¹ 0	00 ⁰ 0	01101	00001	664.729	59.857
		01 ¹ 0	00 ⁰ 0	01101	00001	643.329	3.393
		01 ¹ 0	00 ⁰ 0	01101	00001	645.744	0.6147
15 FH	626	02 ⁰ 0	01 ¹ 0	10002	01101	618.029	1364.291
		02 ² 0	01 ¹ 0	02201	01101	667.752	6257.199
		10 ⁰ 0	01 ¹ 0	10001	01101	720.805	1395.613
	636	02 ⁰ 0	01 ¹ 0	10002	01101	617.350	19.480
		02 ² 0	01 ¹ 0	02201	01101	648.786	70.505
		10 ⁰ 0	01 ¹ 0	10001	01101	721.584	17.052
	628	02 ⁰ 0	01 ¹ 0	10002	01101	597.052	4.900
		02 ² 0	01 ¹ 0	02201	01101	662.768	25.356
		10 ⁰ 0	01 ¹ 0	10001	01101	703.470	7.930
	627	02 ⁰ 0	01 ¹ 0	10002	01101	607.558	1.108
		02 ² 0	01 ¹ 0	02201	01101	665.114	4.701
		10 ⁰ 0	01 ¹ 0	10001	01101	711.299	1.219

^a Notación de Herzberg. ^b Notación de HITRAN. ^c En (cm⁻¹/cm⁻²) $\times 10^{22}$ a 296 K.

Tabla B.1: Principales bandas vibracionales del CO₂
(cont.)

Grupo	Isótopo	Nivel Superior ^a	Nivel Inferior ^a	Nivel Superior ^b	Nivel Inferior ^b	$\Delta\nu$ (cm ⁻¹)	Intensidad ^c
15 SH	626	03 ¹ 0	02 ⁰ 0	11102	10002	647.062	212.882
		03 ¹ 0	02 ² 0	11102	02201	597.338	49.145
		03 ¹ 0	10 ⁰ 0	11102	10001	544.286	2.534
		03 ³ 0	02 ² 0	03301	02201	668.115	368.838
		11 ¹ 0	02 ⁰ 0	11101	10002	791.447	8.663
		11 ¹ 0	02 ² 0	11101	02201	741.724	76.730
		11 ¹ 0	10 ⁰ 0	11101	10001	688.671	144.014
	636	03 ¹ 0	02 ⁰ 0	11102	10002	630.710	2.483
		03 ¹ 0	02 ² 0	11102	02201	599.274	0.662
		03 ¹ 0	10 ⁰ 0	11102	10001	526.475	0.032
		03 ³ 0	02 ² 0	03301	02201	649.087	4.511
		11 ¹ 0	02 ⁰ 0	11101	10002	771.266	0.135
		11 ¹ 0	02 ² 0	11101	02201	739.829	0.679
		11 ¹ 0	10 ⁰ 0	11101	10001	667.031	1.521
	628	03 ¹ 0	02 ⁰ 0	11102	10002	642.311	0.747
		03 ¹ 0	02 ² 0	11102	02201	576.596	0.157
		03 ¹ 0	10 ⁰ 0	11102	10001	535.893	0.009
		03 ³ 0	02 ² 0	03301	02201	663.187	1.446
		11 ¹ 0	02 ⁰ 0	11101	10002	789.913	0.054
		11 ¹ 0	02 ² 0	11101	02201	724.198	0.304
		11 ¹ 0	10 ⁰ 0	11101	10001	683.495	0.743
	627	03 ¹ 0	02 ⁰ 0	11102	10002	644.408	0.143
		03 ¹ 0	02 ² 0	11102	02201	586.852	0.040
		03 ³ 0	02 ² 0	03301	02201	665.509	0.274
		11 ¹ 0	02 ⁰ 0	11101	10002	789.812	0.009
		11 ¹ 0	02 ² 0	11101	02201	732.256	0.044
		11 ¹ 0	10 ⁰ 0	11101	10001	686.071	0.125

^a Notación de Herzberg. ^b Notación de HITRAN. ^c En (cm⁻¹/cm⁻²) $\times 10^{22}$ a 296 K.

Tabla B.1: Principales bandas vibracionales del CO₂
(cont.)

Grupo	Isótopo	Nivel Superior ^a	Nivel Inferior ^a	Nivel Superior ^b	Nivel Inferior ^b	$\Delta\nu$ (cm ⁻¹)	Intensidad ^c
15 TH	626	04 ⁰ 0	03 ¹ 0	20003	11102	615.897	6.985
		04 ⁰ 0	11 ¹ 0	20003	11101	471.511	0.010
		04 ² 0	03 ¹ 0	12202	11102	652.552	15.810
		04 ² 0	03 ³ 0	12202	03301	581.776	1.968
		04 ² 0	11 ¹ 0	12202	11101	508.166	0.056
		12 ⁰ 0	03 ¹ 0	20002	11102	738.673	2.445
		12 ⁰ 0	11 ¹ 0	20002	11101	594.287	0.931
		04 ⁴ 0	03 ³ 0	04401	03301	668.468	18.270
		12 ² 0	03 ¹ 0	12201	11102	828.255	0.147
		12 ² 0	03 ³ 0	12201	03301	757.479	2.337
		12 ² 0	11 ¹ 0	12201	11101	683.869	8.173
		20 ⁰ 0	03 ¹ 0	20001	11102	864.666	0.041
		20 ⁰ 0	11 ¹ 0	20001	11101	720.280	3.981
	636	04 ⁰ 0	03 ¹ 0	20003	11102	610.996	0.106
		04 ² 0	03 ³ 0	12202	03301	585.328	0.033
		04 ² 0	03 ¹ 0	12202	11102	635.140	0.199
		12 ⁰ 0	11 ¹ 0	20002	11101	607.975	0.019
		12 ⁰ 0	03 ¹ 0	20002	11102	748.530	0.019
		04 ⁴ 0	03 ³ 0	04401	03301	649.409	0.246
		12 ² 0	11 ¹ 0	12201	11101	663.171	0.095
		12 ² 0	03 ¹ 0	12201	11102	803.726	0.0014
10	626	00 ⁰ 1	02 ⁰ 0	00011	10002	1063.735	9.686
		00 ⁰ 1	10 ⁰ 0	00011	10001	960.959	6.801
	636	00 ⁰ 1	02 ⁰ 0	00011	10002	1017.659	0.053
		00 ⁰ 1	10 ⁰ 0	00011	10001	913.425	0.076
	628	00 ⁰ 1	02 ⁰ 0	00011	10002	1072.687	0.035
		00 ⁰ 1	10 ⁰ 0	00011	10001	966.269	0.017
	627	00 ⁰ 1	02 ⁰ 0	00011	10002	1067.727	0.006
		00 ⁰ 1	10 ⁰ 0	00011	10001	963.986	0.004

^a Notación de Herzberg. ^b Notación de HITRAN. ^c En (cm⁻¹/cm⁻²) $\times 10^{22}$ a 296 K.

Tabla B.1: Principales bandas vibracionales del CO₂
(cont.)

Grupo	Isótopo	Nivel Superior ^a	Nivel Inferior ^a	Nivel Superior ^b	Nivel Inferior ^b	$\Delta\nu$ (cm ⁻¹)	Intensidad ^c	
4.3 FB	626	00 ⁰ 1	00 ⁰ 0	00011	00001	2349.143	955357.125	
		636	00 ⁰ 1	00 ⁰ 0	00011	00001	2283.488	9598.150
		628	00 ⁰ 1	00 ⁰ 0	00011	00001	2332.113	3518.852
		627	00 ⁰ 1	00 ⁰ 0	00011	00001	2340.014	647.575
		638	00 ⁰ 1	00 ⁰ 0	00011	00001	2265.972	38.781
		637	00 ⁰ 1	00 ⁰ 0	00011	00001	2274.088	7.147
4.3 FH	626	01 ¹ 1	01 ¹ 0	01111	01101	2336.632	73666.258	
		636	01 ¹ 1	01 ¹ 0	01111	01101	2271.760	817.848
		628	01 ¹ 1	01 ¹ 0	01111	01101	2319.738	257.879
		627	01 ¹ 1	01 ¹ 0	01111	01101	2327.581	49.683
4.3 SH	626	02 ² 1	02 ² 0	02211	02201	2324.141	2838.857	
		02 ⁰ 1	02 ⁰ 0	10012	10002	2327.433	1789.326	
		10 ⁰ 1	10 ⁰ 0	10011	10001	2326.598	1079.329	
	636	02 ² 1	02 ² 0	02211	02201	2260.049	33.330	
		02 ⁰ 1	02 ⁰ 0	10012	10002	2261.910	19.460	
		10 ⁰ 1	10 ⁰ 0	10011	10001	2262.848	11.620	
	4.3 TH	626	03 ¹ 1	03 ¹ 0	11112	11102	2315.235	14.610
			03 ³ 1	03 ³ 0	03311	03301	2311.667	10.260
			11 ¹ 1	11 ¹ 0	11111	11101	2313.773	72.010
636		03 ¹ 1	03 ¹ 0	11112	11102	2250.694	1.801	
		03 ³ 1	03 ³ 0	03311	03301	2248.356	1.398	
		11 ¹ 1	11 ¹ 0	11111	11101	2250.605	0.894	
4.3 FRH	626	04 ⁰ 1	04 ⁰ 0	20013	20003	2305.256	3.630	
		04 ² 1	04 ² 0	12212	12202	2302.963	6.073	
		12 ⁰ 1	12 ⁰ 0	20012	20002	2306.692	1.961	
		04 ⁴ 1	04 ⁴ 0	04411	04401	2299.214	3.908	
		12 ² 1	12 ² 0	12211	12201	2301.053	2.550	
		20 ⁰ 1	20 ⁰ 0	20011	20001	2302.525	1.069	
	636	04 ⁰ 1	04 ⁰ 0	20013	20003	2240.536	0.046	
		04 ² 1	04 ² 0	12212	12202	2239.297	0.080	
		12 ⁰ 1	12 ⁰ 0	20012	20002	2242.323	0.023	
		04 ⁴ 1	04 ⁴ 0	04411	04401	2236.678	0.057	
		12 ² 1	12 ² 0	12211	12201	2283.570	0.033	

^a Notación de Herzberg. ^b Notación de HITRAN. ^c En (cm⁻¹/cm⁻²) $\times 10^{22}$ a 296 K.

Tabla B.1: Principales bandas vibracionales del CO₂
(cont.)

Grupo	Isótopo	Nivel Superior ^a	Nivel Inferior ^a	Nivel Superior ^b	Nivel Inferior ^b	$\Delta\nu$ (cm ⁻¹)	Intensidad ^c
		20 ⁰ 1	20 ⁰ 0	20011	20001	2240.757	0.013
4.3SH2	626	00 ⁰ 2	00 ⁰ 1	00021	00011	2324.183	20.293
2.7 FB	626	10 ⁰ 1	00 ⁰ 0	10011	00001	3714.783	15796.078
		02 ⁰ 1	00 ⁰ 0	10012	00001	3612.842	10397.265
	636	02 ⁰ 1	00 ⁰ 0	10012	00001	3527.737	94.171
		10 ⁰ 1	00 ⁰ 0	10011	00001	3632.911	159.960
	628	10 ⁰ 1	00 ⁰ 0	10011	00001	3675.134	47.790
	628	02 ⁰ 1	00 ⁰ 0	10012	00001	3571.141	52.188
	627	02 ⁰ 1	00 ⁰ 0	10012	00001	3591.251	8.405
	627	10 ⁰ 1	00 ⁰ 0	10011	00001	3693.346	10.198
2.7 FH	626	11 ¹ 1	01 ¹ 0	11111	01101	3723.249	1270.129
		03 ¹ 1	01 ¹ 0	11112	01101	3580.326	779.872
	636	03 ¹ 1	01 ¹ 0	11112	01101	3498.754	7.271
		11 ¹ 1	01 ¹ 0	11111	01101	3639.220	15.460
2.7 SH	626	04 ² 1	02 ² 0	12212	02201	3552.854	28.710
		04 ⁰ 1	02 ⁰ 0	20013	10002	3568.215	31.180
		12 ⁰ 1	10 ⁰ 0	20012	10001	3589.651	16.210
		12 ⁰ 1	02 ⁰ 0	20012	10002	3692.427	36.220
		20 ⁰ 1	10 ⁰ 0	20011	10001	3711.476	29.360
		12 ² 1	02 ² 0	12211	02201	3726.646	47.210
2.0	626	12 ⁰ 1	00 ⁰ 0	20012	00001	4977.835	351.925
		20 ⁰ 1	00 ⁰ 0	20011	00001	5099.661	108.997
		04 ⁰ 1	00 ⁰ 0	20013	00001	4853.623	77.801
	636	04 ⁰ 1	00 ⁰ 0	20013	00001	4748.065	0.333
		12 ⁰ 1	00 ⁰ 0	20012	00001	4887.385	2.975
		20 ⁰ 1	00 ⁰ 0	20011	00001	4991.350	2.119

^a Notación de Herzberg. ^b Notación de HITRAN. ^c En (cm⁻¹/cm⁻²) $\times 10^{22}$ a 296 K.

Parte V
Bibliografía

Bibliografía

- [1] Adler-Golden, S., Kinetic parameters for OH nightglow modeling consistent with recent laboratory measurements, *J. Geophys. Res.*, *102*, 19969-19976, 1997.
- [2] Alexander, J.A.F., J.T. Houghton, and W.B. McKnight, Collisional relaxation from the ν_3 vibration of CO₂, *J. Phys. B At. Mol. Opt. Phys.*, *1*, 1225-1226, 1968.
- [3] Allen, D.C., T.J. Price, and C.J.S.M. Simpson, Vibrational deactivation of the bending mode of CO₂ measured between 1500 K and 150 K, *Chem. Phys. Lett.*, *45*, 183-187, 1977.
- [4] Allen, D.C., T. Scragg, and C.J.S.M. Simpson, Low temperature fluorescence studies of the deactivation of the bend-stretch manifold of CO₂, *Chem. Phys.*, *51*, 279-298, 1980.
- [5] Amimoto, S.T., A.P. Force, R.G. Gulotty Jr., and J.R. Wiesenfeld, Collisional deactivation of O(2^1D_2) by the atmospheric gases, *J. Chem. Phys.*, *71*, 3640-3647, 1979.
- [6] Andrews, D.G., J.R. Holton, and C.B. Leovy, *Middle Atmosphere Dynamics*, Academic Press, London, 1987.
- [7] Battaner, E., Transport phenomena and the chemical composition in the mesosphere and lower thermosphere, *J. Atmos. Terr. Phys.*, *37*, 1155-1165, 1975.
- [8] Brasseur, G.P., and S. Solomon, *Aeronomy of the Middle Atmosphere*, 2nd edition, D. Reidel, Dordrecht, 1986.
- [9] Castle, K.J., E.S. Hwang, J.A. Dodd, Laboratory Studies of CO₂(ν_2)-O Vibrational Energy Transfer, *AGU, Fall Meeting*, SA41B-0443, Dec., 2003.
- [10] DeMore, W.B., S.P. Sander, D.M. Golden, R.F. Hampson, M.J. Kurylo, C.J. Howard, A.R. Ravishankara, C.E. Kolb, and M.J. Molina, *Chemical kinetics and photochemical data for use in stratospheric modeling*, *Eval. 12, JPL Publ. 97-4*, 266 pp., Jet Propulsion Lab., Pasadena, Calif., 1997.

- [11] Dodd, J.A, S.J. Lipson, and W.A.M. Blumberg, Formation and vibrational relaxation of OH($X^2\Pi_i, \nu$) by O₂ and CO₂, *J. Chem. Phys.*, *95*, 5752-5762, 1991.
- [12] Duff, J.W., and R.D Sharma, Quasiclassical trajectory study of NO vibrational relaxation by collisions with atomic oxygen, *J. Chem. Soc. Faraday Trans.*, *93*, 1997.
- [13] Dyer, M.J., K. Knutsen, and R.A. Copeland, Energy transfer in the ground state of OH: Measurements of OH($\nu=8,10,11$) removal, *J. Chem. Phys.*, *107*, 7809-7815, 1997.
- [14] Edwards, D.P., M. López-Puertas, and M.A. López-Valverde, Non-local thermodynamic equilibrium studies of the 15 μm bands of CO₂ for atmospheric remote sensing, *J. Geophys. Res.*, *98*, 14955-14977, 1993.
- [15] Edwards, D.P., J.B. Kumer, M. López-Puertas, M.G. Mlynchzak, A. Gopalan, J.C. Gille, and A. Roche, Non-local thermodynamic equilibrium limb radiance near 10 μm as measured by UARS CLAES, *J. Geophys. Res.*, *101*, 26577-26588, 1996.
- [16] Fischer, H., and Oelhaf, Remote sensing of vertical profiles of atmospheric trace constituents with MIPAS limb-emission spectrometers, *Appl. Opt.*, *35*, 2787-2796, 1996.
- [17] Fleming, E.L., S. Chandra, J. J. Barnett, and M. Corney, Zonal mean temperature, pressure, zonal winds and geopotential heights as function of latitude, *Adv. Space Res.*, *10*, 1211-1259, 1990.
- [18] Forbes, J.M., and F. Vial, Monthly simulations of the solar semidiurnal tide in the Mesosphere and Lower Thermosphere, *J. Atmos. Terr. Phys.*, *51*, 649-661, 1989.
- [19] Franke, S.J., X. Chu, A.Z. Liu, and W.K. Hocking, Comparison of meteor radar and Na doppler lidar measurements of winds in the mesopause region above Maui, HI, enviado a *J. Geophys. Res.*, 2004.
- [20] Fricke, K.H., and U. von Zahn, Mesopause temperatures derived from probing the hyperfine structure of the D2 resonance line of sodium by lidar, *J. Atmos. Terres. Phys.*, *47*, 499-512, 1985.
- [21] Funke, B., M. López-Puertas, G. Stiller, T. von Clarmann, M. Höpfner, and M. Kuntz, Non-LTE state distribution of nitric oxide and its impact on the retrieval of the stratospheric daytime NO profile from MIPAS limb sounding experiments, *Adv. Space Res.*, *26*, 947-950, 2000.
- [22] Funke, B., M. López-Puertas, M. García-Comas, S. Gil-López, M.A. López-Valverde, T. von Clarmann, G.P. Stiller, N. Glatthor, U. Grabowski, and M. Höpfner, GRANA-DA: a Generic RAdiative traNsfers AnD non-LTE population Algorithm, en preparación, 2004.

- [23] García, R.R., and S. Solomon, A numerical model of the zonally averaged dynamical and chemical structure of the middle atmosphere, *J. Geophys. Res.*, *88*, 1379-1400, 1983.
- [24] García, R.R., and S. Solomon, A new numerical model of the middle atmosphere. 2. Ozone and related species, *J. Geophys. Res.*, *99*, 12937-12952, 1994.
- [25] Gavrilov, N.M., and Roble, R.G., The effect of gravity waves on the global mean temperature and composition structure of the upper atmosphere *J. Geophys. Res.*, *99*, 25773-25780, 1994.
- [26] Gille, J.C., and F.B. House, On the inversion of limb radiance measurements. I: Temperature and thickness, *J. Atmos. Sci.*, *28*, 1427-1442, 1971.
- [27] Gille, J.C., J.M. Russell III, P.L. Bailey, L.L. Gordley, E.E. Remsberg, J.H. Lienesch, W.G. Planet, F.B. House, L.V. Lyjak, and S.A. Beck, Validation of temperature retrievals obtained by the Limb Infrared Monitor of the Stratosphere (LIMS) experiment *J. Geophys. Res.*, *89*, 5147-5160, 1984.
- [28] Goody, R.M., and Y.L. Yung, *Atmospheric Radiation: Theoretical Basis*, Oxford University Press, Oxford, 1989.
- [29] Gordley, L.L., and J.M. Russell, Rapid inversion of limb radiance data using an emissivity growth approximation, *App. Opt.*, *20*, 807-813, 1981.
- [30] Gordley, L.L., B.T. Marshall, and D.A. Chu, LINEPAK: Algorithms for modeling spectral transmittance and radiance, *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer*, *52*, 563-580, 1994.
- [31] Gueguen, H., F. Yzambart, A. Chakroun, M. Margottin-Maclou, L. Doyennette, and L. Henry, Temperature dependence of the vibration-vibration transfer rates from CO₂ and N₂O excited in the (00⁰1) vibrational level to ¹⁴N₂ and ¹⁵N₂ molecules, *Chem. Phys. Lett.*, *35*, 198-201, 1975.
- [32] Harris, R.D., and G.W. Adams, Where does the O(¹D) energy go?, *J. Geophys. Res.*, *88*, 4918-4928, 1983.
- [33] Hauchecorne, A., and M.L. Chanin, Density and temperature profiles obtained by lidar between 35 and 70 km, *Geophys. Res. Lett.*, *7*, 565-568, 1980.
- [34] Houghton, J.T., Absorption and emission by carbon-dioxide in the mesosphere, *Q. J. R. Meteorol. Soc.*, *95*, 1-20, 1969.

- [35] Inoue, G., and S. Tsuchiya, Vibration-vibration energy transfer for CO₂(00⁰1) with N₂ and CO at low temperatures, *J. Phys. Soc. Jpn.*, 39, 479-486, 1975.
- [36] Kaufmann, M., O.A. Gusev, K.U. Grossmann, R.G. Roble, M.E. Hagan, C. Hart-sough, and A.A. Kutepov, The vertical and horizontal distribution of CO₂ densities in the upper mesosphere and lower thermosphere as measured by CRISTA, *J. Geophys. Res.*, 107, CRI 10.1-10.19, 2002.
- [37] Khvorostovskaya, L.E., I. Yu. Potekhin, G.M. Shved, V.P. Ogibalov, and T.V. Ushyukova, Measurement of rate constant for quenching CO₂(01¹0) by atomic oxygen at low temperatures: Reassessment of the rate of cooling by the CO₂ 15- μ m emission in the lower thermosphere, *Izvestiya, Atmospheric and Oceanic Physics*, 38, 613-624, 2002.
- [38] Klekociuk, A.R., P.S. Argall, R.J. Morris, P.J. Yates, A. Fleming, R.A. Vincent, I.M. Reid, P.A. Greet, and D.J. Murphy, The Australian Antarctic LIDAR facility, Wang J., Hays P.B. *Optical Spectroscopic Techniques and Instrumentation for Atmospheric and Space Research. Proc. SPIE*, 2266, 624-634, 1994.
- [39] Lacoursière, J., M.J. Dyer, and R.A. Copeland, Temperature dependence of the collisional energy transfer of OH($v=10$) between 220 and 310 K, *J. Chem. Phys.*, 118, 1661-1666, 2003.
- [40] Leovy, C., Radiative Equilibrium of the Mesosphere. *J. Atmos. Sci.*, 21, 238-248, 1964.
- [41] Lindemann, F.A., and G.M.B. Dobson, A theory of meteors and the density and temperature of the outer atmosphere to which it leads, *Proc. Roy. Soc. Lond. A*, 102, 411, 1922.
- [42] Linlenfeld, H.V., Deactivation of vibrationally-excited NO and CO₂ by O-atoms, *Tech. Rept. PL-TR-94-2180, 28pp.*, Air Force Phillips Lab., Bedford, Mass., 1994.
- [43] Liu, H.L., M.E. Hagan, Local heating/cooling of the mesosphere due to gravity wave and tidal coupling, *Geophys. Res. Lett.*, 25, 2941-2944, 1998.
- [44] López-Moreno, J.J., R. Rodrigo, F. Moreno, M. López-Puertas, and A. Molina, Altitude distribution of vibrationally excited states of atmospheric hydroxyl at levels $\nu=2$ to $\nu=7$, *Planet. Space Sci.*, 35, 1029-1038, 1987.
- [45] López-Puertas, M., R. Rodrigo, A. Molina, and F.W. Taylor, A non-LTE radiative transfer model for infrared bands in the middle atmosphere. I. Theoretical basis and application to CO₂ 15 μ m bands, *J. Atmos. Terr. Physics*, 48, 729-748, 1986a.

- [46] López-Puertas, M., R. Rodrigo, J.J. López-Moreno, and F.W. Taylor, A non-LTE radiative transfer model for infrared bands in the middle atmosphere. II. CO₂ (2.7 and 4.3 μm) and water vapour (6.3 μm) bands and N₂(1) and O₂(1) vibrational levels, *J. Atmos. Terr. Physics*, *48*, 749-764, 1986b.
- [47] López-Puertas, M., M.A. López-Valverde, C.P. Rinsland, and M.R. Gunson, Analysis of the upper atmosphere CO₂(ν_2) vibrational temperatures retrieved from ATMOS/Spacelab 3 observations, *J. Geophys. Res.*, *97*, 20469-20478, 1992.
- [48] López-Puertas, M., G. Zaragoza, B.J. Kerridge, and F.W. Taylor, Non-local thermodynamic equilibrium model for H₂O 6.3 and 2.7- μm bands in the middle atmosphere, *J. Geophys. Res.*, *100*, 9131-9147, 1995.
- [49] López-Puertas, M., G. Zaragoza, M.A. López-Valverde, and F.W. Taylor, Non local thermodynamic (LTE) atmospheric limb emission at 4.6 μm . 1. An update of the CO₂ non-LTE radiation transfer model, *J. Geophys. Res.*, *103*, 8499-8513, 1998.
- [50] López-Puertas, M., G. Zaragoza, M.A. López-Valverde, and F.W. Taylor, Non local thermodynamic (LTE) atmospheric limb emission at 4.6 μm . 2. An analysis of the daytime wideband radiances as measured by UARS improved stratospheric and mesospheric sounder, *J. Geophys. Res.*, *103*, 8515-8530, 1998b.
- [51] López-Puertas, M.A. López-Valverde, R.R. García, and R.G. Roble, A review of CO₂ and CO abundances in the middle atmosphere, in *Atmospheric Science Across the Stratopause*, Siskind, D.E., Eckermann, S.D. and Summers, M.E. (Eds.), Amer. Geophys. Union, Geophys. Mon. *123*, 83-100, 2000.
- [52] López-Puertas, M., and F.W. Taylor, *Non-LTE Radiative Transfer in the Atmosphere*, World Scientific Publishing Co., River Edge, N.J., 2001.
- [53] López-Puertas, M., M. García-Comas, B. Funke, R.H. Picard, J.R. Winick, P.P. Wintersteiner, M.G. Mlynczak, C.J. Mertens, J.M. Russell, and L.L. Gordley, Evidence for an OH(ν) excitation mechanism of CO₂ 4.3 μm nighttime emission from SABER/TIMED measurements, *J. Geophys. Res.*, en prensa, 2004.
- [54] Llewellyn, E.J., B.H. Long, and B.H. Solheim, The quenching of OH* in the atmosphere, *Planet. Space Sci.*, *26*, 525-531, 1978.
- [55] Lübken, F.J., and U. von Zahn, Thermal structure of the mesopause region at polar latitudes, *J. Geophys. Res.*, *96*, 20841-20857, 1991.
- [56] Lübken, F.J., Seasonal variation of turbulent energy dissipation rates at high latitudes as determined by in situ measurements of neutral density fluctuations, *J. Geophys. Res.*, *102*, 13441-13456, 1997.

- [57] Lunt, S.L., C.T. Wickham-Jones, and C.J.S.M. Simpson, Rate constants for the deactivation of the $15\mu\text{m}$ band of carbon dioxide by the collisions partners CH_3F , CO_2 , N_2 , Ar and Kr over the temperature range 300 to 150 K, *Chem. Phys. Lett.*, *115*, 60-64, 1985.
- [58] Mayr, H. G., and I. Harris, Annual variation in temperature and composition of the thermosphere and upper mesosphere, in *Symposium on Minor Constituents and Excited Species*, Philadelphia, Pa., June 9-10, Oxford and New York, Pergamon Press, 293-299, 1977.
- [59] Makhlof, U.B, R.H. Picard, and J.R. Winick, Photochemical-dynamical modeling of the measured response of airglow to gravity waves. 1. Basic model for OH airglow, *J. Geophys. Res.*, *100*, 11289-11311, 1995.
- [60] Manuilova, R. O., and G.M. Shved, The 4.8 and 9.6-micron O_3 band emissions in the middle atmosphere, *J. Atmos. Terr. Phys.*, *54*, 1149-1168, 1992.
- [61] Marshall, B.T., L.L. Gordley, and D.A. Chu, BANDPAK: Algorithms for modeling broadband transmission and radiance, *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer*, *52*, 581-599, 1994.
- [62] McDermid, I.S., D.A. Haner, M.M. Kleiman, T.D. Walsh, and M.L. White, Differential Absorption Lidar Systems at JPL-TMF for Tropospheric and Stratospheric Ozone Measurements, *Optical Engineering*, *30*, 22-30, 1991.
- [63] McDermid, I.S., M. Schmoë, E.W. Sirko, and T.D. Walsh, Lidar Measurements of Stratospheric Ozone, Temperature, and Aerosol Profiles at Mauna Loa, *NOAA Climate Monitoring and Diagnostics Laboratory No. 22*, Summary Report 1993, Eds. J.T. Peterson and R.M. Rosson, 125-127, December 1994.
- [64] McNeal, R.J., M.E. Whitson Jr., and G.R. Cook, Temperature-dependence of quenching of vibrationally excited nitrogen by atomic oxygen, *J. Geophys. Res.*, *79*, 1527-1531, 1974.
- [65] Meriwether, J.W., and M.G. Mlynczak, Is chemical heating a major cause of the mesosphere inversion layer? *J. Geophys. Res.*, *100*, 1379-1388, 1995.
- [66] Mertens, C.J., M.G. Mlynczak, M. López-Puertas, P.P. Wintersteiner, R.H. Picard, J.R. Winick, L.L. Gordley, and J.M. Russell III, Retrieval of mesospheric and lower thermospheric kinetic temperature from measurements of CO_2 $15\mu\text{m}$ Earth limb emission under non-LTE conditions, *Geophys. Res. Lett.*, *28*, 1391-1394, 2001.

- [67] Mertens, C.J., M.G. Mlynczak, M. López-Puertas, P.P. Wintersteiner, R.H. Picard, J.R. Winick, L.L. Gordley, and J.M. Russell III, Retrieval of kinetic temperature and carbon dioxide abundance from non-local thermodynamic equilibrium limb emission measurements made by the SABER experiment on the TIMED satellite, *Proceedings of the SPIE, Remote Sensing of Clouds and the Atmosphere VII*, Agia Pelagia, Crete, Greece, Sept. 24-27, Vol. 4882, 162-171, 2002.
- [68] Mertens, C.J., F.J. Schmidlin, R.A. Goldberg, E.E. Remsberg, W.D. Pesnell, J.M. Russell III, M.G. Mlynczak, M. López-Puertas, P.P. Wintersteiner, R.H. Picard, J.R. Winick, and L.L. Gordley, SABER observations of mesospheric temperatures and comparisons with falling sphere measurements taken during the 2002 summer MacWAVE campaign, *Geophys. Res. Lett.*, *31*, L03105, 2004.
- [69] Mlynczak, M.G., and S. Solomon, On the efficiency of solar heating in the middle atmosphere, *Geophys. Res. Lett.*, *18*, 1201-1204, 1991a.
- [70] Mlynczak, M.G., and S. Solomon, Middle atmosphere heating by exothermic chemical reactions involving odd-hydrogen species, *Geophys. Res. Lett.*, *18*, 37-40, 1991b.
- [71] Mlynczak, M. G., and S. Solomon, A detailed evaluation of the heating efficiency in the middle atmosphere, *J. Geophys. Res.*, *98*, 10517-10541, 1993.
- [72] Mlynczak, M.G., S. Solomon, and D.S. Zaras, An updated model for $O_2(a^1\Delta_g)$ concentrations in the mesosphere and lower thermosphere and implications for remote sensing of ozone at $1.27 \mu\text{m}$, *J. Geophys. Res.*, *98*, 18639-18648, 1993.
- [73] Mlynczak, M.G., D. S. Olander, and M. López-Puertas, Rapid computation of spectrally integrated non-LTE limb emission, *J. Geophys. Res.*, *99*, 25761-25772, 1994.
- [74] Mlynczak, M.G., A contemporary assessment of the mesospheric energy budget, in *Atmospheric Science Across the Stratopause*, Siskind, D.E., Eckermann, S.D. and Summers, M.E. (Eds.), Amer. Geophys. Union, *Geophys. Mon. 123*, 37-52, 2000.
- [75] Moore, C.B., Vibration-vibration energy transfer, in *Advances in Chemical Physics*, edited by I. Prigogine and S.A. Rice, vol. 23, 41-83, John Wiley, New York, 1973.
- [76] Murgatroyd, R.J., Winds and temperatures between 20 km and 100 km - a review, *Quart. J. Roy. Meteor. Soc.*, *83*, 417-458, 1957.
- [77] Murgatroyd, R.J., and R.M. Goody, Sources and sinks of radiative energy from 30 to 90 km, *Q. J. R. Meteorol. Soc.*, *87*, 225-234, 1958.

- [78] Nebel, H., P.P. Wintersteiner, R.H. Picard, J.R. Winick, and R.D. Sharma, CO₂ non-local thermodynamic equilibrium radiative excitation and infrared dayglow at 4.3 μm : Application to SPECTRAL Infrared Rocket Experiment data, *J. Geophys. Res.*, *99*, 10409-10419, 1994.
- [79] Nordberg, W., L. Katchen, J. Theon, and W.S. Smith, Rocket Observations of the Structure of the Mesosphere, *J. Atmos. Sci.*, *22*, 611-622, 1965.
- [80] Pollock, D.S., G.B.I. Scott, and L.F. Phillips, Rate constant for quenching of CO₂(010) by atomic oxygen, *Geophys. Res. Lett.*, *20*, 727-729, 1993.
- [81] Ravishankara, A.R., E.J. Dunlea, M.A. Blitz, T.J. Dillon, D.E. Heard, M.J. Pilling, R.S. Strekowski, J.M. Nicovich, P.H. Wine, Redetermination of the rate coefficient for the reaction of O(¹D) with N₂, *Geophys. Res. Lett.*, *29*, 35-1, 2002.
- [82] Remsberg, E., G. Lingenfelter, V.L. Harvey, W. Grose, J. Russell III, M. Mlynczak, L. Gordley, B.T. Marshall, On the verification of the quality of SABER temperature, geopotential height, and wind fields by comparison with Met Office assimilated analysis, *J. Geophys. Res.*, *108*, ACL 4.1-4.10, 4628, 2003.
- [83] Roble, R.G., and R.E. Dickinson, How will changes in dióxido de carbono and methane modify the mean structure of the mesosphere and thermosphere?, *Geophys. Res. Lett.*, *16*, 1441-1444, 1989.
- [84] Roble, R. G., and E.C. Ridley, A thermosphere-ionosphere-mesosphere-electrodynamics general circulation model (TIME-GCM): Equinox solar cycle minimum simulations (30-500 km) *Geophys. Res. Lett.*, *21*, 417-420, 1994.
- [85] Roble, R. G., Major greenhouse cooling (yes, cooling): The upper atmosphere response to increased CO₂, *Rev. Geophys.*, *33*, 539-546, 1995.
- [86] Roble, R.G., On the feasibility of developing a global atmospheric model extending from the ground to the exosphere, in *Atmospheric Science Across the Stratopause*, Siskind, D.E., S.D. Eckermann, and M.E. Summers (Eds.), Amer. Geophys. Union, *Geophys. Mon. 123*, 53, 2000.
- [87] Rodgers, C. D., R.L. Jones, and J.J. Barnett, Retrieval of temperature and composition from NIMBUS 7 SAMS measurements *J. Geophys. Res.*, *89*, 5280-5286, 1984.
- [88] Rodgers, C.D., F.W. Taylor, A.H. Muggeridge, M. López-Puertas, and M.A. López-Valverde, Local thermodynamic equilibrium of carbon dioxide in the upper atmosphere, *Geophys. Res. Lett.*, *19*, 589-592, 1992.

- [89] Rodgers, C.D., Inverse methods for atmospheric sounding: Theory and practice, World Sci., River Edge, N.J., 2000.
- [90] Rodgers, C.D., and B.J. Connor, Intercomparison of remote sounding instruments, *J. Geophys. Res.*, *108*, 4116, DOI 10.1029/2002JD002299, ACH 13-1:13-14, 2003.
- [91] Rodrigo, R., J.S. Nisbet, and E. Battaner, The effect of horizontal winds upon the chemical composition of the lower thermosphere at high latitude, *J. Geophys. Res.*, *86*, 3501-3508, 1981.
- [92] Rodrigo, R., J.J. Lopez-Moreno, F. Moreno, M. Lopez-Puertas, and A. Molina, Neutral atmospheric composition between 60 and 220 km - A theoretical model for mid-latitudes, *Planet. Space Sci.*, *34*, 723-743, 1986.
- [93] Rosser, W.A., A.D. Wood, and E.T. Gerry, Deactivation of vibrationally excited carbon dioxide (ν_3) by collisions with carbon dioxide or with nitrogen, *J. Chem. Phys.*, *50*, 4996-5008, 1969.
- [94] Rothman, L.S., A. Barbe, D.C. Benner, L.R. Brown, C. Camy-Peyret, M.R. Carleer, K. Chance, C. Clerbaux, V. Dana, V.M. Devi, A. Fayt, J.-M. Flaud, R.R. Gamache, A. Goldman, D. Jacquemart, K.W. Jucks, W.J. Lafferty, J.-Y. Mandin, S.T. Massie, V. Nemtchinov, D.A. Newnham, A. Perrin, C.P. Rinsland, J. Schroeder, K.M. Smith, M.A.H. Smith, K. Tang, R.A. Toth, J. Vander Auwera, P. Varanasi, K. Yoshino, The HITRAN molecular spectroscopic database: edition of 2000 including updates through 2001, *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer*, *82*, 5-44, 2003.
- [95] Rosser, W.A. Jr., and E.T. Gerry, De-excitation of vibrationally excited $\text{CO}_2^*(\nu_3)$ by collisions with He, O_2 , and H_2O , *J. Chem. Phys.*, *51*, 2286-2287, 1969.
- [96] Russell, J.M. III, M.G. Mlynczak, L.L. Gordley, J. Tansock, and R. Esplin, An overview of the SABER experiment and preliminary calibration results, *Proceedings of the SPIE, 44th Annual Meeting*, Denver, Colorado, July 18-23, Vol. 3756, pp. 277-288, 1999.
- [97] Russell, J.M. III, and H.G.J. Smit, Data quality, in SPARC/IOC/GAW assessment of trends in the vertical distribution of ozone, SPARC report 1, *World Meteorol. Organ. Ozone Res. and Monit. Proj. Rep. 43*, edited by N. Harris, R. Hudson, and C. Phillips, chap. 2, Geneva, 1998.
- [98] Schwartz, R.N., Z. I. Slawsky, and K.F. Herzfeld, Calculation of vibrational relaxation times in gases, *J. Chem. Phys.*, *20*, 1591-99, 1952.
- [99] Sharma, R.D., Kinetics of equilibrium of 1388-cm^{-1} vibrational level of CO_2 *J. Chem. Phys.*, *49*, 5195-5197, 1968.

- [100] Sharma, R.D., and P.P. Wintersteiner, Role of carbon dioxide in cooling planetary atmospheres, *Geophys. Res. Lett.*, *17*, 2201-2204, 1990.
- [101] She, C.Y., J.R. Yu, H. Latifi, and R.E. Bills, High-Spectral-Resolution Fluorescence Lidar for Mesospheric Sodium Temperature Measurements, *Appl. Opt.*, *31*, 2095-2106, 1992.
- [102] She, C.Y., J.R. Yu, and H. Chen, Observed thermal structure of a midlatitude mesopause, *Geophys. Res. Lett.*, *20*, 567-570, 1993.
- [103] She, C.Y., S.S. Chen, Z.L. Hu, J. Sherman, J.D. Vance, V. Vasoli, M.A. White, J.R. Yu, and D.A. Krueger, Eight-year climatology of nocturnal temperature and sodium density in the mesopause region (80 to 105 km) over Fort Collins, CO (41°N, 105°W), *Geophys. Res. Lett.*, *27*, 3289 - 3292, 2000.
- [104] Shved, G.m., L.E. Khvorostovskaya, I. Yu. Potekhin, A.I. Dem'Ryanikov, A.A. Kutepov, and V.I. Fomichev, Measurement of the quenching rate constant of CO₂(0110)-O collisions and its significance for the thermal regime and radiation in the lower thermosphere, *Atmos. Ocean. Phys.*, *27*, 295, 1991.
- [105] Siddles, R.M., G.J. Wilson, and C.J.S.M. Simpson, The vibrational deactivation of the (00⁰1) and (01⁰0) modes of CO₂ measured down to 140 K, *Chem. Phys.*, *189*, 779-791, 1994.
- [106] Simpson, C.J.S.M., P.D. Gait, and J.M. Simmie, The vibrational deactivation of the bending mode of CO₂ by O₂ and by N₂, *Chem. Phys. Lett.*, *47*, 133-136, 1977.
- [107] Siskind, D.E., S.D. Eckermann, and M.E. Summers, *Atmospheric Science Across the Stratopause*, Amer. Geophys. Union, Geophys. Mon. *123*, 2000.
- [108] Slinger, T.G., and G. Black, Electronic-to-vibrational energy transfer efficiency in the O(¹D)-N₂ and O(¹D)-CO systems *J. Chem. Phys.*, *60*, 468-477, 1974.
- [109] Stiller, G.P. editor. The Karlsruhe Optimized and Precise Radiative Transfer Algorithm (KOPRA), volume FZKA 6487, *Wissenschaftliche Berichte*. Forschungszentrum Karlsruhe, 2001.
- [110] Taine, J., F. Lepoutre, and G. Louis, A photoacoustic study of the collisional deactivation of CO₂ by N₂, CO and O₂ between 160 and 375 K, *Chem. Phys. Lett.*, *58*, 611-615, 1978.
- [111] Taine, J., and F. Lepoutre, A photoacoustic study of the collisional deactivation of the first vibrational levels of CO₂ by N₂ and CO, *Chem. Phys. Lett.*, *65*, 554-558, 1979.

- [112] Thayer, J.P., N.B.Nielsen, R.E. Warren, C. Heinselmann, and J. Sohn, Rayleigh lidar system for middle atmosphere research in the arctic *Opt. Eng.* *36*, 2045-2061, Brian J. Thompson Ed., 1997.
- [113] Turnbull, D.N., and R.P. Lowe, New hydroxyl transition probabilities and their importance in airglow studies, *Planet. Space Sci.*, *37*, 723-738, 1989.
- [114] Twomey, S., B. Herman, and R. Rabinoff, An extension to the Chahine Method of inverting the radiative transfer equation, *J. Atmos. Sci.*, *34*, 1085-1090, 1977.
- [115] Vegard, L., Continued investigations on light emission from solidified gases. Relations between electronic terms and after-glow of gaseous nitrogen, *Zeits. f. Physik*, *75*, 30-62, 1932.
- [116] Vollman, K., and K.U. Grossman, Excitation of 4.3 μm CO₂ emissions by O(¹D) during twilight, *Adv. Space Res.*, *20*, 1185-1189, 1997.
- [117] von Clarmann, T., A. Dudhia, D.P. Edwards, B. Funke, M. Höpfner, B. Kerridge, V. Kostsov, A. Linden, M. López-Puertas, T. Timofeyev, Intercomparison of radiative transfer codes under non-local thermodynamic equilibrium conditions, *J. Geophys. Res.*, *107*, ACH 12-1, 2002.
- [118] von Zahn, U., J. Höffner, V. ESKA, and M. Alpers, The mesopause altitude: Only two distinctive levels worldwide?, *Geophys. Res. Lett.*, *23*, 3231-3234, 1996.
- [119] Walker, J.C.G., R.S. Stolarski, and A.T. Nagy, The vibrational temperature of molecular nitrogen in the thermosphere, *Annals Geophys.*, *25*, 831-839, 1969.
- [120] Wang, P.H., A. Deepak, and S.S. Hong, General Formulation of Optical Paths for Large Zenith Angles in the Earth's Curved Atmosphere, *J. Atmos. Sci.*, *38*, 650-658, 1981.
- [121] Wine, P. H., and A. R. Ravishankara, Kinetics of O(¹D) interactions with the atmospheric gases N₂, N₂O, H₂O, H₂, CO₂, and O₃, *J. Chem. Phys. Lett.*, *77*, 103-109, 1981.
- [122] Wintersteiner, P.P., R.A. Joseph, and Paboojian, A.J. High-altitude non-equilibrium infrared emission models Final Report, 1986-1990 Arcon Corp., Waltham, MA., 1990.
- [123] Wintersteiner, P.P., R.H. Picard, R.D. Sharma, J.R. Winick, and R.A. Joseph, Line-by-line radiative excitation model for the non-equilibrium atmosphere - Application to CO₂ 15-microns emission, *J. Geophys. Res.*, *97*, 18083-18117, 1992.

- [124] Wintersteiner, P.P., C.J. Mertens, M. López-Puertas, et al., Comparison of CO₂ 15, 4.3, and 2.7 μm models, *J. Geophys. Res.*, en preparación, 2004.
- [125] Zaragoza, G., M. López-Puertas, A. Lambert, J.J. Remedios, and F.W. Taylor, Non-local thermodynamic equilibrium in H₂O 6.9 μm emission as measured by the improved stratospheric and mesospheric sounder, *J. Geophys. Res.*, *103*, 31293-31308, 1998.
- [126] Zaragoza, G., M. López-Puertas, and F.W. Taylor, Global distribution of CO₂ in the upper mesosphere as derived from UARS/ISAMS measurements, *J. Geophys. Res.*, *105*, 19829-19840, 2000.