



PR Fortgeschrittenen-Praktikum

**Versuch 4: Differential Optical
Absorption Spectroscopy (DOAS)**

Lukas Prader¹, Andrija Djokic², Kemal Önen³

Betreuer: Ao. Univ.-Prof. Dr. Stefan Kimeswenger

Versuchsdurchführung am: 06.03.2024

Datum der Abgabe: 13.03.2024

¹ lukas.prader@student.uibk.ac.at
² andrija.djokic@student.uibk.ac.at
³ kemal.oenen@student.uibk.ac.at

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	1
2	Grundlagen und Theorie	2
2.1	Spektrographen und DOAS	2
2.2	Analyse verschiedener Himmelsrichtungen	2
3	Experiment und Aufbau	4
4	Ergebnisse	5
4.1	DARK und BIAS	5
4.2	Statistik des Rauschens von DARK und BIAS	6
4.3	Wissenschaftlich nutzbare Daten	6
4.4	Das Kontinuum - Streuung des Lichtes	7
4.5	Messung von Molekularen Absorptionen	11
4.6	Messungen der Kurzzeitvariation	12
4.7	Messungen mit molecfit	12
5	Diskussion und Schlussfolgerung	14

Zusammenfassung

Beobachtungen von Objekten innerhalb und vor allem außerhalb der Erdatmosphäre werden maßgeblich durch die Atmosphärenzusammensetzung beeinflusst. Differentielle optische Absorptionsspektroskopie (DOAS) kann einen Aufschluss über genau diese Zusammensetzung und ihre Abhängigkeiten liefern. In diesem Versuch wurden Intensitätsverläufe der Sonneneinstrahlung für verschiedene Wellenlängen (UV, VIS, NIR) in Abhängigkeit des Zenithwinkels gemessen. Mit diesen Messungen konnten mittlere Variationen, wellenlängenspezifische Verläufe der Intensität sowie Verläufe der relativen Intensität von Absorptionslinien (O_2 und H_2O) bestimmt werden, sowie darauf basierende Berechnungen der O_2 - und H_2O -Konzentrationen der Atmosphäre durchgeführt werden. Die eigenen Daten wurden aufgrund der Wetterlage zusätzlich mit Archivdaten erweitert und verglichen. Die Resultate, wenn auch nicht immer eindeutig, ermöglichten die Bestätigung von bekannten Zusammenhängen.

1 Einleitung

Kenntnisse über die chemische Zusammensetzung der Erdatmosphäre sind nicht nur von entscheidender Bedeutung für die Meteorologie und Klimaforschung, sondern bildet die Grundlage für die Entstehung und Entwicklung des Lebens auf der Erde. In der Astrophysik und beobachtenden Astronomie sind Informationen über die chemische Zusammensetzung ebenfalls unerlässlich [1], um das Absorptionsverhalten der Atmosphäre zu bestimmen. Dies ist wiederum wichtig, um spektrale Daten aus dem Weltraum korrekt zu verarbeiten und zu interpretieren. Darüber hinaus ermöglicht uns die genaue Analyse der Atmosphärenkomposition Rückschlüsse auf das Vorhandensein von Leben außerhalb unseres Sonnensystems zu ziehen [2].

Eine gängige Methode zur Messung atmosphärischer Eigenschaften, wie die Bestimmung der molekularen Zusammensetzung, ist die differentielle optische Absorptionsspektroskopie (DOAS). Diese basiert hierbei auf der Wechselwirkung von Atomen bzw. Molekülen mit Licht, d.h. Streuungen und quantenmechanische Anregungen. Im Rahmen des hier vorliegenden Versuchs wird ein Multi Axis DOAS (MAX-DOAS) Messaufbau verfolgt, wobei das gestreute Sonnenlicht als Lichtquelle dient. Es werden die Intensitätsänderung der Sonnenstrahlung in Abhängigkeit von Zenitwinkel des Messaufbaus und Sonnendistanz, sowie die Änderung der Adsorptionslinienstärken von ausgewählten Linien des O_2 - und H_2O -Spektrums bestimmt.

2 Grundlagen und Theorie

2.1 Spektrographen und DOAS

Ein Spektrograph ermöglicht die Zerlegung des Lichtes auf die verschiedenen Wellenlängen. Hierbei muss man jedoch beachten, dass je nach Wellenlängen-Bereich jeweils ein hierfür angepasster Spektrograph verwendet werden muss.

Um DOAS Spektroskopie zu betreiben, brauchen wir zwei Spektren. Ein Spektrum sollte nur die Intensitätsverteilung der Lichtquelle darstellen. In unserem Fall ist dies die Sonne, dessen Spektrum wir mit dem ATLAS-Modell [3] beschreiben. Das zweite Spektrum wird mit dem ersten verglichen, um Absorptionen gewisser Wellenlängen zu detektieren. Da Atome und Moleküle nur in gewissen Bereichen das Licht absorbieren, kann man auf die Häufigkeit des jeweiligen Stoffes in verschiedenen Luftschichten schließen. Dabei ist zu beachten, dass die molekulare Absorptionen im Regelfall viel komplexer sein können, als diejenigen von Atomen, da neben rein elektronischen Anregungen, auch Schwingungs- und Rotationsübergänge möglich sind.

Während direkte DOAS Systeme direkt in die Lichtquelle blicken, handelt es sich bei der MAX-DOAS Anordnung um ein passives DOAS System, da hier das gestreute Sonnenlicht als Lichtquelle herangezogen wird. Das Licht kann auf verschiedenen Weisen gestreut werden. Bei Teilchen, die wesentlich kleiner als die Lichtwellenlänge sind, tritt Rayleigh-Streuung auf, wobei die Intensität des gestreuten Lichts proportional zur Wellenlänge wie $\propto \lambda^{-4}$ ist. Diese Streuung ist der Hauptgrund, warum der klare Himmel blau ist. Streuung an Teilchen mit Abmessungen ähnlich der Lichtwellenlänge wird Mie-Streuung genannt. Dabei ist die Intensität proportional zur Umkehrung der Wellenlänge, also $\propto \lambda^{-1}$. Bei einer Streuung an größeren Teilchen ist die Intensität unabhängig von der Wellenlänge.

2.2 Analyse verschiedener Himmelsrichtungen

Durch die Messungen verschiedener Himmelsrichtungen (von Osten oder Westen jeweils zum Zenit) erhalten wir Spektren des gestreuten Sonnenlichts. Eine schematische Darstellung sieht man in Abbildung (1). Diese Spektren müssen unter Berücksichtigung der Variabilität des Himmels betrachtet werden, da wir relativ zum Zenit arbeiten. Daher müssen die Messungen rasch erfolgen, vor allem bei schwankendem Wetter. Die Variabilität kann durch schnelle Aufnahmen des Himmels hintereinander ermittelt werden.

Das Zusammenspiel von Wetterdynamik und Kontinuum der Atmosphäre führt zu folgender Gleichung für die gemessene Intensität der einfallenden Sonnenstrahlung:

$$I(z, \alpha; \lambda) = a_0(\lambda) \frac{1}{\cos(z)} + a_1(\lambda) \cos(z) + a_2(\lambda) \cos^2(\alpha) + a_3(\lambda) \quad (1)$$

Hierbei bezeichnet z die Zenithdistanz und $\alpha(z, r, t)$ die Distanz zur Sonne. Die Termen mit Vorfaktoren a_1 und a_2 beschreiben die Streuung an diffusen Flächen, wie in etwa Wolken, und die dominierende Vorwärtstreuung nahe der Sonne. Diese Termen sollen bei schönem Wetter an sich wegfallen, da die Moleküle fast keine Beeinflussung der Wolkenstreuung spüren.

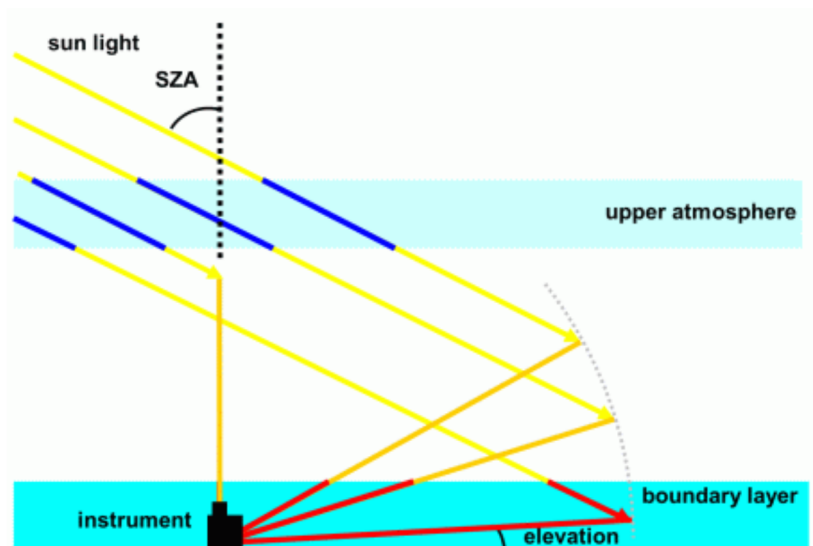


Abbildung 1: Optische Strahlgänge verschiedener Strahlen und Beziehung zwischen Zenith und Solarer Zenithwinkel (ZSA) [4].

3 Experiment und Aufbau

Auf Grund des schlechten Wetters wurde unsere Messanordnung (vgl. Abbildung (2)) im Inneren aufgebaut. Hierfür wurde das Stativ direkt vor der Tür platziert, die Optik darauf angebracht und die Winkelanzeige entsprechend geeicht. Die CCD Kamera wurde mittels optischer Fasern mit den Spektrographen verbunden, welche wiederum über einen USB Hub die Daten zum Laptop schicken konnten. Die Wellenlängenbereiche dieser sowie die jeweiligen Kanäle der Spektrographen sind in Tabelle (1) zusammengefasst.

Tabelle 1: Wellenlängenbereiche, Kanäle und Belichtungszeiten für die drei verwendeten Spektrographen.

Einsatz	Wellenlängenbereich in nm	Kanal	Belichtungszeit in ms
ultraviolettes Licht (UV)	300 – 507	c_2	400
sichtbares Licht (VIS)	500 – 680	c_3	1250
nahes Infrarot (NIR)	600 – 1015	c_1	600

Bevor die Messungen begannen, wurde die Optik des Messgeräts an den Punkt der stärksten Intensität (den wir erreichen konnten) gelenkt und die Belichtungszeit eingestellt (vgl. Tabelle 1). Dies ist nötig, damit man eine Überbelichtung verhindert und gleichzeitig eine gute Auflösung der Messungen gewährleistet.

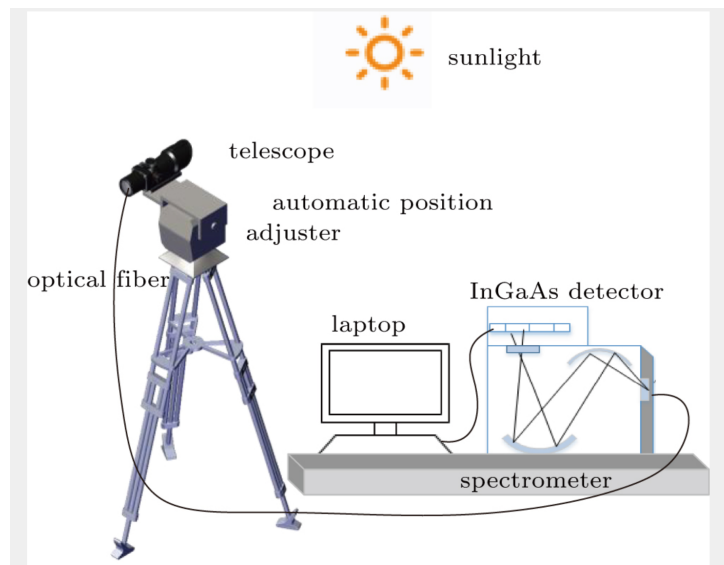


Abbildung 2: Skizze für ein ähnliches experimentelles Setup für die DOAS [5].

Anschließend erfolgten die Messungen. Zur Bestimmung des Dunkelstroms wurden 10 Messungen aufgenommen. Aufgrund der bereits erwähnten Wetterbedingungen konnte der Scan nur auf der Ostseite durchgeführt werden, wobei Messungen von 80 bis 40 Grad in 5-Grad-Schritten vorgenommen wurden. Für die Zeitvariation wurde eine Einstellung von 65 Grad gewählt. Abschließend wurde ein zweiter Scan der Ostseite mit denselben Winkeleinstellungen durchgeführt.

4 Ergebnisse

Im Folgenden sind die Ergebnisse der eigenen Messungen sowie jener der Archivdatei zusammengefasst. Auswertung der Versuche erfolgte mit Python. Der dazugehörige Source-Code ist in einem [GitHub-Repository](#) hinterlegt.

4.1 DARK und BIAS

Die Messungen von DARKs von den drei Kanälen zeigen die systematischen Fehler unserer Messanordnung (vgl. Abbildung (3)). Aus der Abbildung (3) ist es klar ersichtlich, dass unsere Kamera besonders empfindlich auf die Licht mit der Wellenlänge von $\lambda \approx 468 \text{ nm}$ im ultravioletten Bereich ist. Auch etwas stärker ist die Kamera auf die Wellenlänge von $\lambda \approx 317 \text{ nm}$ gegenüber anderen in dem UV Bereich. Im sichtbaren Bereich hat die Kamera näherungsweise konstante Empfindlichkeit für alle im Bereich zugänglichen Wellenlängen. Jedoch erwiesen sich stärkere Linien in engen Bereichen der Wellenlängen 517nm, 563nm und 665nm. Im infraroten Bereich hat unsere Anordnung höhere Empfindlichkeit auf die Wellenlängen um $\lambda \approx 610 \text{ nm}$ sowie um $\lambda \approx 716 \text{ nm}$.

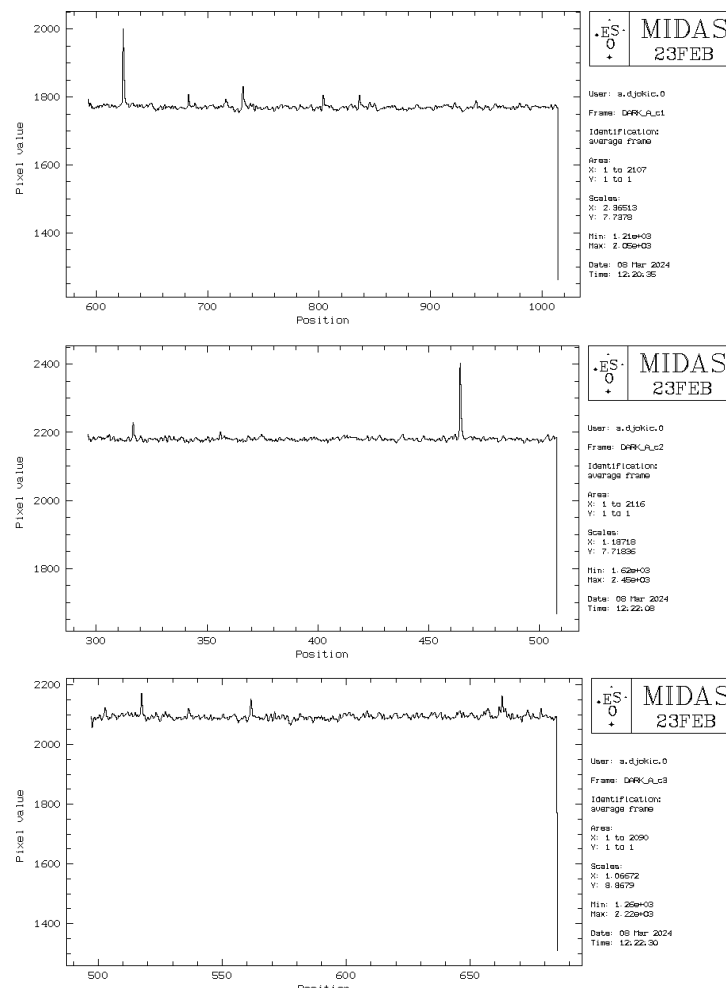


Abbildung 3: Aufnahme des DARK Stroms für (von oben nach unten) Kanal 1, 2 und 3 eines Spektrographen.

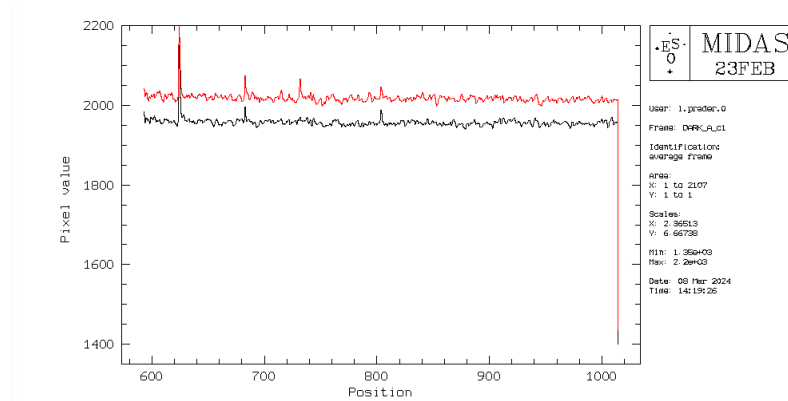


Abbildung 4: Darstellung der Unterschiede zwischen zwei DARK Messungen desselben Kanals (rot erster Block zu Versuchsbeginn, schwarz zweiter Block am Ende des Versuchs) mit klaren unterschieden in den systematischen Fehlern (Spikes).

Bei den eigenen Daten wurden aufgrund der limitierten Messmöglichkeiten nicht mehrere DARK Blöcke aufgenommen. Aus den Archivdaten, bei denen zwei verschiedene Blöcke an DARKs aufgenommen wurden, ist auch ein Unterschied in den systematischen Fehlern der DARKs der beiden Blöcke erkennbar (Abb. (4)). Der spätere Block zeigt auch eine niedrigere mittlere Intensität, was möglicherweise auf unzureichende Lichtabdeckung der Spektrographen und den dadurch möglichen Einfluss der Tageszeit zurückzuführen ist.

4.2 Statistik des Rauschens von DARK und BIAS

Mit Hilfe von Programm MIDAS haben wir die gemittelten DARK Werte von einzelnen DARK Aufnahmen abziehen und dann Mittelwerte und Standardabweichungen ermitteln können. Die Werte befinden sich in Tabelle (2).

Tabelle 2: Statistik des Rauschens für die drei Kanäle. In diesem Beispiel wurden, pro Kanal extra, die gemittelten DARK Frames vom ersten Frame abgezogen.

Kanal	Mittelwert	Standardabweichung
c_1	-9,12	11,7
c_2	-7,35	13,0
c_3	-8,24	12,5

4.3 Wissenschaftlich nutzbare Daten

Die systematische Fehler können zum Teil verringert werden, indem man mehrere DARK Aufnahmen mittelt und dann von jeder Aufnahme abzieht. Des Weiteren haben unsere Geräte eine mittlere Empfindlichkeitsfunktion, die für ein Gerät separat bestimmt werden muss. Auch diese beeinflusst die erhaltenen Messwerte systematisch. Daher sollten die vorher mit DARK Aufnahmen korrigierten Werte auch durch diese Funktion dividiert werden, damit die Intensitäten der Linien den reellen entsprechen. Hiermit erhalten wir wissenschaftlich verwendbaren Daten.

4.4 Das Kontinuum - Streuung des Lichtes

Zuerst haben wir Bereiche der Wellenlängen ausgesucht, welche frei von Absorptionslinien von Molekülen sind. Durch Vergleich der von uns aufgenommenen Daten und deren aus Messungen von [3] stellten wir die folgende absorptionsfreie Wellenlängenbereiche fest:

Tabelle 3: Absorptionsfreie Wellenlängenbereiche für vier Farben.

Farbe	Wellenlängenbereich in nm
Blau	460 - 480
Gelb	565 - 585
Rot	665 - 680
Infrarot	740 - 755

Diese Bereiche wurden nun für alle Zenithwinkel, Himmelsrichtungen und Versuchsiterationen aufgezeichnet um anschließend gefittet zu werden. Hierfür wurde ein Fit der Funktion (1), multipliziert mit $\cos(z)$ für eine bessere Fitfunktion, berechnet, und zwar mit beiden Eingabeparametern z und α . Die Fits wurden jeweils für die Himmelsrichtungen und Iterationen einzeln berechnet und jeweils in der Achse des Zenithwinkels und der Sonnendistanz separat geplottet (Abb. 5, 6, 7, 8). Die erhaltenen Fitparameter für die jeweiligen Datensets sind in Tabelle (4) angegeben.

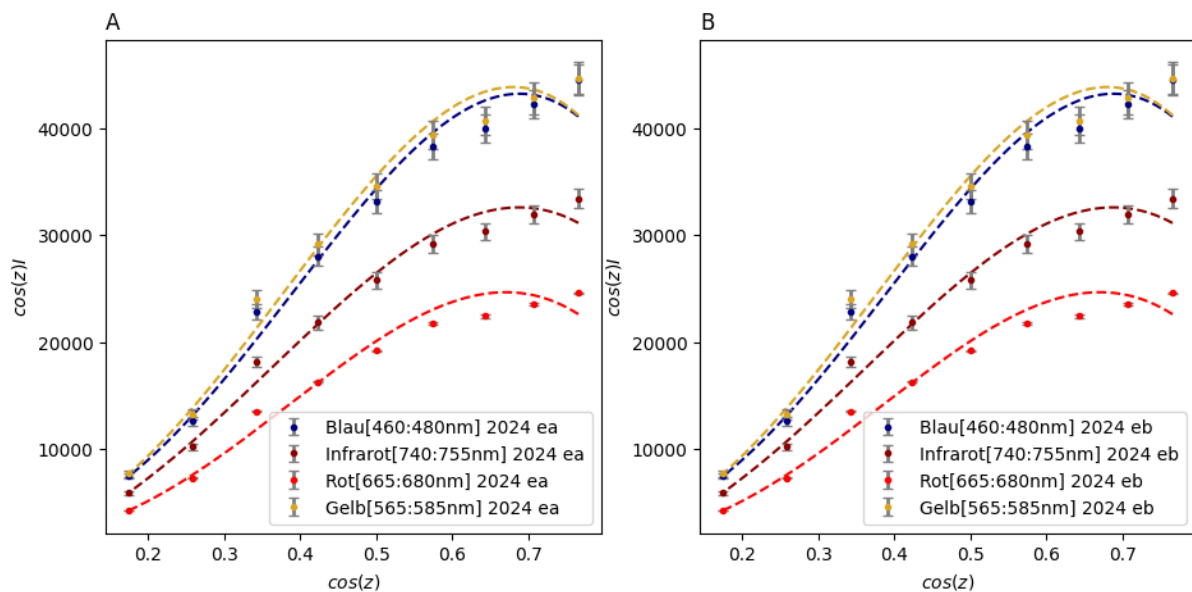


Abbildung 5: Plot der Intensitätsverläufe in der Achse des Cosinus der Zenithdistanz für die Wellenlängenbereiche aus Tabelle (3) und den zugehörigen Fits. A zeigt die Daten der ersten eigenen Messung 2024 (nur in Richtung Osten), B zeigt die Ergebnisse des zweiten Messdurchgangs.

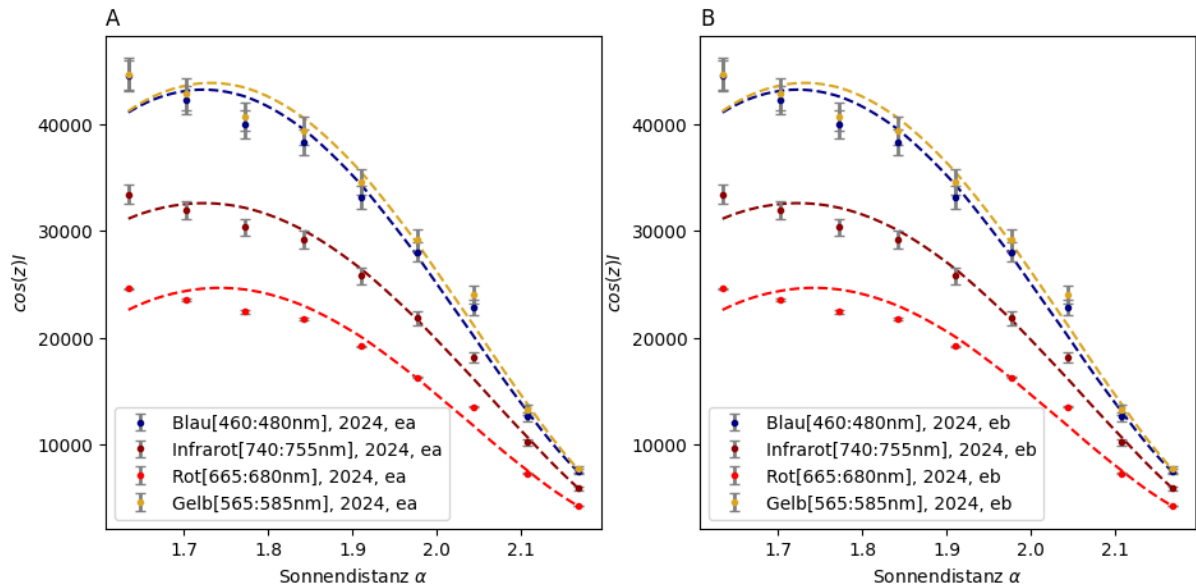


Abbildung 6: Plot der Intensitätsverläufe in der Achse der Sonnendistanz für die Wellenlängenbereiche aus Tabelle (3) und den zugehörigen Fits. A zeigt die Daten der ersten eigenen Messung 2024 (nur in Richtung Osten), B zeigt die Ergebnisse des zweiten Messdurchgangs.

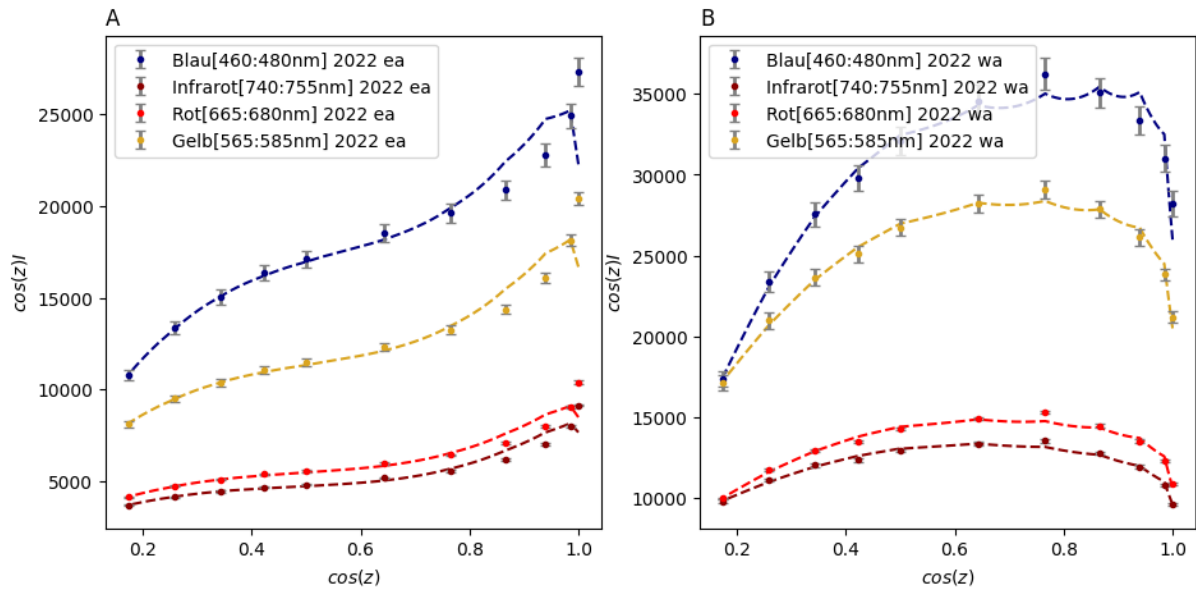


Abbildung 7: Plot der Intensitätsverläufe in der Achse des Cosinus der Zenithdistanz für die Wellenlängenbereiche aus Tabelle (3) und den zugehörigen Fits. A zeigt die Daten der ersten Messung 2022 in Richtung Osten, B zeigt die Ergebnisse in Richtung Westen.

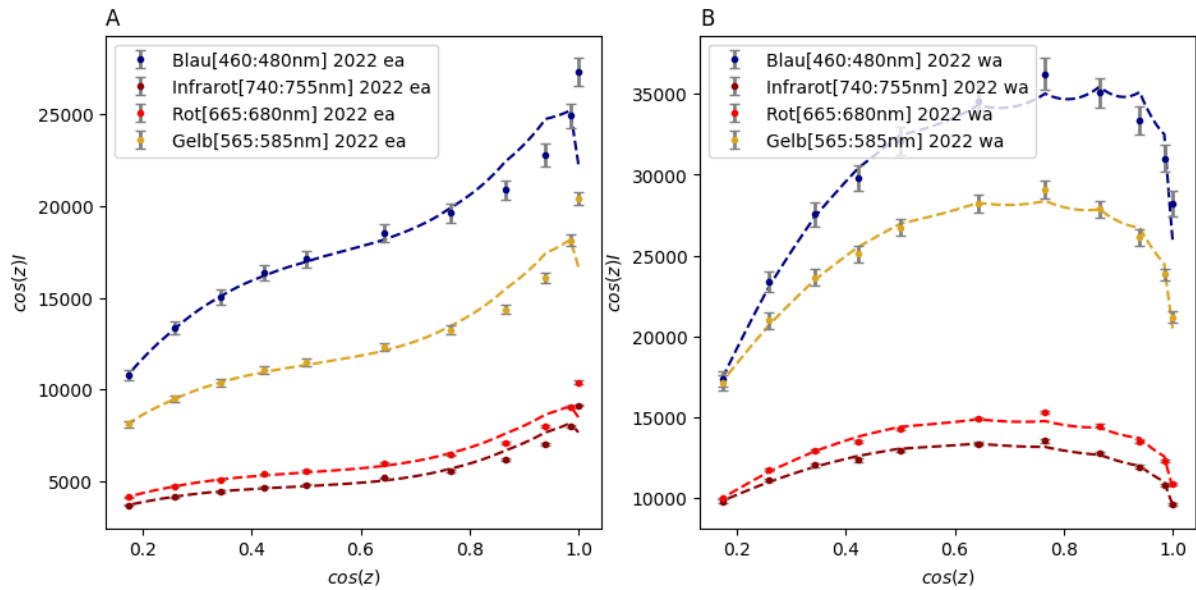


Abbildung 8: Plot der Intensitätsverläufe in der Achse der Sonnendistanz für die Wellenlängenbereiche aus Tabelle (3) und den zugehörigen Fits. A zeigt die Daten der ersten Messung 2022 in Richtung Osten, B zeigt die Ergebnisse in Richtung Westen.

Tabelle 4: Berechnete Fit Parameter der verschiedenen Datensets.

Fit	a_0	a_1	a_2	a_3
Blau 2022 ea	$1,88 \cdot 10^5 \pm 3,62 \cdot 10^4$	$2,55 \cdot 10^5 \pm 6,20 \cdot 10^4$	$-9,86 \cdot 10^4 \pm 1,65 \cdot 10^4$	$-4,16 \cdot 10^5 \pm 9,54 \cdot 10^4$
Infrarot 2022 ea	$5,45 \cdot 10^4 \pm 1,22 \cdot 10^4$	$7,28 \cdot 10^4 \pm 2,09 \cdot 10^4$	$-2,11 \cdot 10^4 \pm 5,71 \cdot 10^3$	$-1,20 \cdot 10^5 \pm 3,21 \cdot 10^4$
Rot 2022 ea	$6,08 \cdot 10^4 \pm 1,24 \cdot 10^4$	$8,11 \cdot 10^4 \pm 2,12 \cdot 10^4$	$-2,51 \cdot 10^4 \pm 5,76 \cdot 10^3$	$-1,34 \cdot 10^5 \pm 3,27 \cdot 10^4$
Gelb 2022 ea	$1,24 \cdot 10^5 \pm 2,82 \cdot 10^4$	$1,66 \cdot 10^5 \pm 4,83 \cdot 10^4$	$-5,57 \cdot 10^4 \pm 1,34 \cdot 10^4$	$-2,73 \cdot 10^5 \pm 7,42 \cdot 10^4$
Blau 2022 wa	$2,18 \cdot 10^5 \pm 3,85 \cdot 10^4$	$3,31 \cdot 10^5 \pm 7,08 \cdot 10^4$	$1,77 \cdot 10^5 \pm 1,75 \cdot 10^4$	$-5,85 \cdot 10^5 \pm 1,14 \cdot 10^5$
Infrarot 2022 wa	$3,13 \cdot 10^4 \pm 9,43 \cdot 10^3$	$3,93 \cdot 10^4 \pm 1,74 \cdot 10^4$	$3,35 \cdot 10^4 \pm 4,55 \cdot 10^3$	$-7,11 \cdot 10^4 \pm 2,82 \cdot 10^4$
Rot 2022 wa	$4,94 \cdot 10^4 \pm 1,06 \cdot 10^4$	$6,86 \cdot 10^4 \pm 1,95 \cdot 10^4$	$4,79 \cdot 10^4 \pm 5,01 \cdot 10^3$	$-1,23 \cdot 10^5 \pm 3,15 \cdot 10^4$
Gelb 2022 wa	$1,04 \cdot 10^5 \pm 2,23 \cdot 10^4$	$1,44 \cdot 10^5 \pm 4,13 \cdot 10^4$	$1,01 \cdot 10^5 \pm 1,09 \cdot 10^4$	$-2,61 \cdot 10^5 \pm 6,67 \cdot 10^4$
Blau 2024 ea	$-4,45 \cdot 10^5 \pm 2,85 \cdot 10^5$	$-8,22 \cdot 10^5 \pm 4,49 \cdot 10^5$	$6,82 \cdot 10^3 \pm 5,81 \cdot 10^4$	$1,27 \cdot 10^6 \pm 7,14 \cdot 10^5$
Infrarot 2024 ea	$-2,60 \cdot 10^5 \pm 2,16 \cdot 10^5$	$-4,77 \cdot 10^5 \pm 3,43 \cdot 10^5$	$-2,54 \cdot 10^4 \pm 4,59 \cdot 10^4$	$7,47 \cdot 10^5 \pm 5,43 \cdot 10^5$
Rot 2024 ea	$-3,06 \cdot 10^5 \pm 1,85 \cdot 10^5$	$-5,44 \cdot 10^5 \pm 2,90 \cdot 10^5$	$8,73 \cdot 10^3 \pm 3,72 \cdot 10^4$	$8,49 \cdot 10^5 \pm 4,62 \cdot 10^5$
Gelb 2024 ea	$-4,43 \cdot 10^5 \pm 2,99 \cdot 10^5$	$-8,01 \cdot 10^5 \pm 4,72 \cdot 10^5$	$-8,38 \cdot 10^3 \pm 6,18 \cdot 10^4$	$1,25 \cdot 10^6 \pm 7,48 \cdot 10^5$
Blau 2024 eb	$-4,45 \cdot 10^5 \pm 2,85 \cdot 10^5$	$-8,23 \cdot 10^5 \pm 4,49 \cdot 10^5$	$7,02 \cdot 10^3 \pm 5,81 \cdot 10^4$	$1,27 \cdot 10^6 \pm 7,14 \cdot 10^5$
Infrarot 2024 eb	$-2,60 \cdot 10^5 \pm 2,16 \cdot 10^5$	$-4,78 \cdot 10^5 \pm 3,43 \cdot 10^5$	$-2,52 \cdot 10^4 \pm 4,59 \cdot 10^4$	$7,49 \cdot 10^5 \pm 5,43 \cdot 10^5$
Rot 2024 eb	$-3,07 \cdot 10^5 \pm 1,85 \cdot 10^5$	$-5,45 \cdot 10^5 \pm 2,90 \cdot 10^5$	$8,87 \cdot 10^3 \pm 3,72 \cdot 10^4$	$8,50 \cdot 10^5 \pm 4,61 \cdot 10^5$
Gelb 2024 eb	$-4,44 \cdot 10^5 \pm 2,98 \cdot 10^5$	$-8,03 \cdot 10^5 \pm 4,72 \cdot 10^5$	$-8,16 \cdot 10^3 \pm 6,18 \cdot 10^4$	$1,25 \cdot 10^6 \pm 7,48 \cdot 10^5$

Die Fitparameter unterscheiden sich im Allgemeinen zum Teil in ihrer Größenordnung. Es kann jedoch keine klare Dominanz, wie beispielsweise für schlechtes Wetter starke Dominanz des Terms abhängig der Sonnendistanz festgestellt werden. Dies liegt möglicherweise an der höheren Komplexität eines zweidimensionalen Fits, wodurch Abschätzungen der Formel nicht mehr ganz klar formuliert werden können. Hier könnte man nun versuchen, den multivariaten Fit mit dem eines univariaten (nur Zenithwinkel oder Sonnendistanz) zu vergleichen. Hiermit könnte man abschätzen, ob diese Vereinfachungen für die gegebenen Daten immer noch gute Ergebnisse liefern. Dies wurde für diesen Bericht aus Zeitmangel nicht mehr gemacht.

In Anbetracht der zweidimensionalen Eingabewerte ($\cos(\text{Zenithwinkel})$, Sonnendistanz) wäre ein dreidimensionaler Plot auch sinnvoll, konnte aber ebenfalls aufgrund von Zeitmangel nicht zusätzlich in der Auswertung hinzugefügt werden. Die Randeffekte, die in Abbildung (7) bei $\cos(z)$ nahe 1 den Fit verzerren, entstehen wahrscheinlich aufgrund der Trennung von Ost- und Westwinkeln. Ein Fit mit den kombinierten Daten würde also eine schönere, kontinuierliche Kurve geben.

4.5 Messung von Molekularen Absorptionen

Um die Unterschiede in der Atmosphärenzusammensetzung genauer zu untersuchen, wurden Absorptionslinien von Sauerstoff und Wasser in Abhängigkeit des Zenithwinkels vermessen und so die relative Intensität der Absorptionslinie bestimmt. Es wurden vier Absorptionslinien ausgewählt (Tabelle (5)).

Tabelle 5: Wellenlängenbereiche der ausgewählten Absorptionslinien.

Linie	Wellenlängenbereich in nm
O ₂ stark	755 - 780
O ₂ schwach	686 - 692
H ₂ O stark	880 - 1000
H ₂ O schwach	790 - 860

Fehler aufgrund der möglicherweise ungenauen Wahl der Absorptionsränder wurden als 0,01 angenommen.

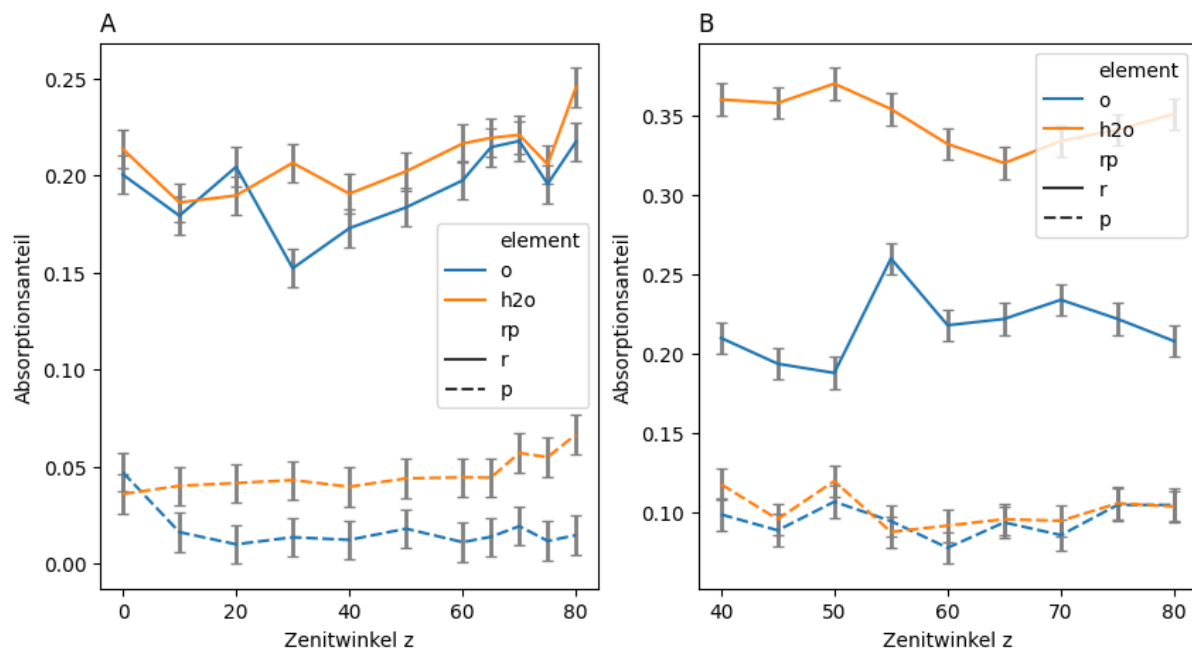


Abbildung 9: Verlauf der relativen Absorptionsintensität für ausgewählte Linien des O₂- und H₂O Spektrums (Tab. (5)). A zeigt die Ergebnisse der Archivdaten von 2022 (Richtung Osten, erster Durchgang), B die Ergebnisse der eigenen Messungen 2024 (Richtung Osten, erster Durchgang). Farben unterscheiden die Moleküle (element), Linienstil die Stärke der Absorptionslinie (rp: r - tendenziell schwache Bande, p - tendenziell starke Bande).

Abbildung (9) zeigt die Verläufe der relativen Absorptionsintensität der gewählten Linien in Abhängigkeit des Zenithwinkels. Es ist bemerkbar, dass die relative Absorptionsintensität von Wassersowohl für die schwache als auch die starke Absorptionslinie in unseren Daten deutlich höher ausfallen, als in den Archivdaten. Dies ist nicht verwunderlich, da an unserem Versuchstag eben schlechte Wetterbedingungen herrschten und dadurch die Luftfeuchtigkeit viel höher war. Die starke Sauerstofflinie liegt in beiden Datensätzen im gleichen Wertebereich, während die schwache Sauerstofflinie in unseren Daten wieder deutlich höher ausfällt. Es ist kein klarer Trend

für die Absorption in Abhängigkeit des Zenithwinkels erkennbar.

4.6 Messungen der Kurzzeitvariation

Um ebenfalls eine Aussage über die Variation der Messungen über kurze Zeiträume treffen zu können, wurden für zehn aufeinanderfolgende Aufnahmen der eigenen Messung bei einem Zenithwinkel von 65 Grad für die absorptionsfreien Wellenlängen aus Tabelle (3) die Mittelwerte und Standardabweichung bestimmt. Ebenfalls wurde so Mittelwert und Standardabweichung für die Fraunhofer A-Bande von O₂ bestimmt (Tabelle (6)).

Tabelle 6: Kurzzeitvariation der Intensität verschiedener Bereiche für zehn Messungen bei $z = 65$.

Messung	Ergebnis
Blau[460:480nm]	$6,6(2) \cdot 10^4$
Infrarot[740:755nm]	$5,11(14) \cdot 10^4$
Rot[665:680nm]	$3,80(2) \cdot 10^4$
Gelb[565:585nm]	$6,8(2) \cdot 10^4$
A-Band O ₂	$4(1) \cdot 10^4$

Es ist zu bemerken, dass die Kurzzeitvariation der Sauerstoff A-Linie viel größer ist als die der absorptionsfreien Bereiche. Dies könnte auch zum Teil durch die Form der Absorptionslinie und die dadurch automatische Variation des Mittelwerts beeinflusst sein. Im blauen und gelben Wellenlängenbereich (absorptionsfrei) ist die Variation größer im Vergleich zu den Bereichen im roten/infraroten.

4.7 Messungen mit molecfit

Abschließend wurden Werte der O₂ und H₂O Konzentration der Atmosphäre auf Basis der Messungen durch Verwendung des Programms `molecfit` ermittelt. Hierfür wurden Absorptionslinien ausgewählt und dem Fitprogramm übergeben (Abb. (10)). Als Ergebniss erhält man unter anderem die Sauerstoff und Wasserkonzentration in ppmv, sowie die Wassersäule in mm (Tab. (7)).

Tabelle 7: Fit Daten ausgerechnet mit Hilfe des Programms `molecfit`.

Messung	Gassäule H ₂ O in ppmv	Wassersäule in mm	Gassäule O ₂ in ppmv
2022 West 00	$1,05(5) \cdot 10^3$	6(3)	$4,80(5) \cdot 10^5$
2022 Ost 00	$4,7(6) \cdot 10^3$	29(3)	$5,23(5) \cdot 10^5$
2024 Ost 70	$9,0(1) \cdot 10^3$	55(1)	$3,71(3) \cdot 10^5$

In diesen Ergebnissen ist ebenfalls die Wetterlage des jeweiligen Versuchstages ersichtlich. Die höheren Werte für Wasser in der Messung West 2022 könnten möglicherweise von leichten Wolkenzügen stammen.

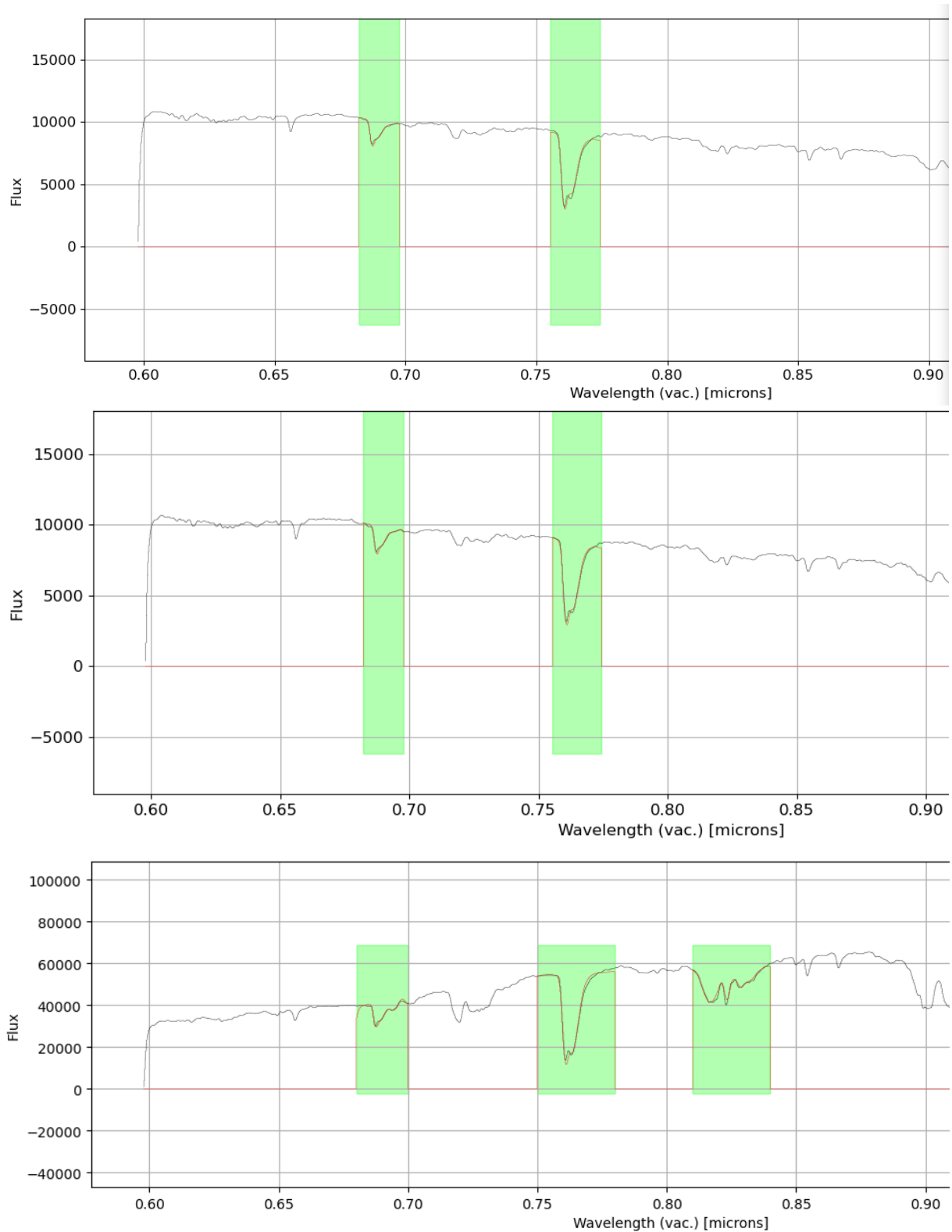


Abbildung 10: Darstellung der Auswahl der Absorptionslinien und der resultierenden Fitlinien (rot) durch `molecfit`. Von oben nach unten: z0 West - 2022, z0 - Ost 2022, z70 - Ost 2024.

5 Diskussion und Schlussfolgerung

Die verschiedenen Messungen und vor allem die verschiedenen Auswertungen liefern alle Informationen über die Atmosphärenkomposition. Die Ergebnisse der Analyse waren durchaus gut, aber zeigten auch Potential für weitere Verbesserung. So könnte die Analyse und Regression der Intensitätsverläufe noch besser bearbeitet werden.

Sowohl das Potential, wie auch potentielle Störungsquellen der DOAS Methodik wurden aufgezeigt. Mithilfe der Spektralanalyse konnten schließlich sogar Abschätzungen für die Sauerstoff und Wasserkonzentration der Atmosphäre berechnet werden. Die schlechte Wetterlage am Versuchstag limitierte leider die eigenen Messungen, aber ermöglichte auch einen interessanten Vergleich mit alten Ergebnissen bei idealen Wetterbedingungen. Insgesamt kann gesagt werden, dass sogar eine verhältnismäßig kleine Menge an Messungen zu einer Fülle an interessanten Auswertungs-, und Interpretationsmöglichkeiten führen kann.

Erklärung

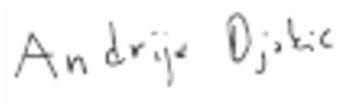
Hiermit versichern wir, dass der vorliegende Bericht selbständig verfasst wurde und alle notwendigen Quellen und Referenzen angegeben sind.



13. März 2024

Kemal Önen

Datum



13. März 2024

Andrija Djokic

Datum



13. März 2024

Lukas Prader

Datum

Literatur

- [1] “NASA: Übersicht über atmosphärische Forschung.” <https://www.nasa.gov/earth-science-at-ames/missions/atmospheric-composition/>. Zuletzt aufgerufen am 12.03.2024.
- [2] “Universität Bristol: Forschungsbereich Atmosphäre von Exoplaneten.” <https://www.bristol.ac.uk/physics/research/astrophysics/areas/exoplanet-atmospheres/>. Zuletzt aufgerufen am 12.03.2024.
- [3] R. L. Kurucz, “Model atmosphere codes: Atlas12 and atlas9,” *Determination of Atmospheric Parameters of B-, A-, F-and G-Type Stars: Lectures from the School of Spectroscopic Data Analyses*, pp. 39–51, 2014.
- [4] “IUP Bremen: MAXDOAS Instrument.” https://www.iup.uni-bremen.de/doas/maxdoas_instrument.htm. Zuletzt aufgerufen am 11.03.2024.
- [5] R.-W. Wang, P.-H. Xie, J. Xu, and A. Li, “Novel infrared differential optical absorption spectroscopy remote sensing system to measure carbon dioxide emission*,” *Chinese Physics B*, vol. 28, p. 013301, jan 2019.

Abbildungsverzeichnis

1	Optische Strahlgänge verschiedener Strahlen und Beziehung zwischen Zenith und Solarer Zenithwinkel (ZSA) [4].	3
2	Skizze für ein ähnliches experimentelles Setup für die DOAS [5].	4
3	Aufnahme des DARK Stroms für (von oben nach unten) Kanal 1, 2 und 3 eines Spektrographen.	5
4	Darstellung der Unterschiede zwischen zwei DARK Messungen desselben Kanals (rot erster Block zu Versuchsbeginn, schwarz zweiter Block am Ende des Versuchs) mit klaren unterschieden in den systematischen Fehlern (Spikes).	6
5	Plot der Intensitätsverläufe in der Achse des Cosinus der Zenithdistanz für die Wellenlängenbereiche aus Tabelle (3) und den zugehörigen Fits. A zeigt die Daten der ersten eigenen Messung 2024 (nur in Richtung Osten), B zeigt die Ergebnisse des zweiten Messdurchgangs.	7
6	Plot der Intensitätsverläufe in der Achse der Sonnendistanz für die Wellenlängenbereiche aus Tabelle (3) und den zugehörigen Fits. A zeigt die Daten der ersten eigenen Messung 2024 (nur in Richtung Osten), B zeigt die Ergebnisse des zweiten Messdurchgangs.	8
7	Plot der Intensitätsverläufe in der Achse des Cosinus der Zenithdistanz für die Wellenlängenbereiche aus Tabelle (3) und den zugehörigen Fits. A zeigt die Daten der ersten Messung 2022 in Richtung Osten, B zeigt die Ergebnisse in Richtung Westen.	8
8	Plot der Intensitätsverläufe in der Achse der Sonnendistanz für die Wellenlängenbereiche aus Tabelle (3) und den zugehörigen Fits. A zeigt die Daten der ersten Messung 2022 in Richtung Osten, B zeigt die Ergebnisse in Richtung Westen.	9
9	Verlauf der relativen Absorptionsintensität für ausgewählte Linien des O ₂ - und H ₂ O Spektrums (Tab. (5)). A zeigt die Ergebnisse der Archivdaten von 2022 (Richtung Osten, erster Durchgang), B die Ergebnisse der eigenen Messungen 2024 (Richtung Osten, erster Durchgang). Farben unterscheiden die Moleküle (element), Linienstil die Stärke der Absorptionslinie (rp: r - tendenziell schwache Bande, p - tendenziell starke Bande).	11
10	Darstellung der Auswahl der Absorptionslinien und der resultierenden Fitlinien (rot) durch <code>molecfit</code> . Von oben nach unten: z0 West - 2022, z0 - Ost 2022, z70 - Ost 2024.	13

Tabellenverzeichnis

1	Wellenlängenbereiche, Kanäle und Belichtungszeiten für die drei verwendeten Spektrographen.	4
2	Statistik des Rauschens für die drei Kanäle. In diesem Beispiel wurden, pro Kanal extra, die gemittelten DARK Frames vom ersten Frame abgezogen.	6
3	Absorptionsfreie Wellenlängebereiche für vier Farben.	7
4	Berechnete Fit Parameter der verschiedenen Datensets.	9
5	Wellenlängebereiche der ausgewählten Absorptionslinien.	11
6	Kurzzeitvariation der Intensität verschiedener Bereiche für zehn Messungen bei $z = 65$	12
7	Fit Daten ausgerechnet mit Hilfe des Programms <code>molecfits</code>	12