

Ableitung von atomarem Sauerstoff  
und Wasserstoff aus Satellitendaten  
und deren Abhängigkeit vom solaren  
Zyklus

Dissertation  
von  
Catrin Lehmann

BERGISCHE UNIVERSITÄT WUPPERTAL  
FACHBEREICH C - MATHEMATIK UND NATURWISSENSCHAFTEN



**BERGISCHE  
UNIVERSITÄT  
WUPPERTAL**

Wuppertal, August 2009

Diese Dissertation kann wie folgt zitiert werden:

**urn:nbn:de:hbz:468-20101026-114429-9**

**[<http://nbn-resolving.de/urn/resolver.pl?urn=urn%3Anbn%3Ade%3A468-20101026-114429-9>]**

# Inhaltsverzeichnis

<b>1</b>	<b>Einleitung</b>	<b>1</b>
<b>2</b>	<b>Die Bedeutung von atomarem Sauerstoff und atomarem Wasserstoff in der oberen Atmosphäre</b>	<b>5</b>
2.1	Die obere Atmosphäre . . . . .	5
2.2	Methoden zur Messung von atomarem Sauerstoff und atomarem Wasserstoff . . . . .	10
<b>3</b>	<b>ENVISAT Messungen</b>	<b>13</b>
3.1	Der Envisat Satellit . . . . .	13
3.2	Das GOMOS Instrument . . . . .	14
3.2.1	Messprinzip und Datenprozessing . . . . .	14
3.3	Das SCIAMACHY Instrument . . . . .	15
3.3.1	Das Messprinzip . . . . .	15
3.3.2	Charakterisierung der Messdaten . . . . .	16
3.3.3	Datenprozessing und Instrumenteneffekte . . . . .	20
3.4	Validierung der Strahlungsdaten mit SABER . . . . .	24
<b>4</b>	<b>Das Vorwärtsmodell</b>	<b>31</b>
4.1	Das OH-Molekül . . . . .	31
4.2	Die Modellierung von OH Strahlungsemissionen . . . . .	37
4.2.1	Einstein Koeffizienten . . . . .	39

4.2.2	Berücksichtigung von verschiedenen Kollisionsrelaxationsmodellen . . . . .	41
4.2.3	Spektralbereich für das Retrieval . . . . .	42
4.3	Strahlungstransport in Limb Beobachtungsgeometrie . . . . .	43
4.4	Vergleich zwischen Vorwärtsmodell und Messung . . . . .	45
<b>5</b>	<b>Retrieval</b>	<b>47</b>
5.1	Beschreibung der Retrievalmethode . . . . .	47
5.2	Bestimmung von atomarem Wasserstoff . . . . .	50
5.3	Bestimmung von atomarem Sauerstoff . . . . .	52
5.4	Ableitung der Heizungsrate . . . . .	53
5.4.1	Mögliche Fehlerquellen . . . . .	54
5.4.2	Fehlerabschätzung des Retrievals . . . . .	56
5.4.3	Fehlerabschätzung des non-LTE Modells . . . . .	60
<b>6</b>	<b>Retrievalergebnisse</b>	<b>63</b>
6.1	Chemische Heizungsrate, atomarer Sauerstoff und Wasserstoff . . .	63
6.2	Validierung der Ergebnisse . . . . .	66
6.3	Saisonale und räumliche Variationen . . . . .	70
<b>7</b>	<b>Langzeitliche Variationen</b>	<b>77</b>
7.1	Trend in SCIAMACHY Daten . . . . .	79
7.2	Solare Variationen in verschiedenen Atmosphärenmodellen . . . .	90
<b>8</b>	<b>Wellenanalyse</b>	<b>93</b>
8.1	Beschreibung der Methode . . . . .	94
8.2	Wellen in SCIAMACHY und SABER-Daten . . . . .	96
8.3	Wellen in SABER mit dem SCIAMACHY Messgitter . . . . .	105
<b>9</b>	<b>Zusammenfassung</b>	<b>111</b>
	<b>Literatur</b>	<b>115</b>



**Danksagung**

**129**



# Abbildungsverzeichnis

2.1	OH*-Airglow . . . . .	6
2.2	Tagesmittel der globalen Heizungsrate aufgrund von strahlungsbedingten und chemischen Prozessen . . . . .	8
3.1	Das Messprinzip von GOMOS . . . . .	15
3.2	Die verschiedenen Messgeometrien von SCIAMACHY . . . . .	16
3.3	Vergleich zwischen einem Tag- und Nachtspektrum von SCIAMACHY in 88 km Höhe in Kanal 6 . . . . .	17
3.4	Zeitreihe des überdeckten Breitenbereichs gemeinsamer SCIAMACHY und GOMOS Messungen . . . . .	19
3.5	Breitenabhängigkeit der Lokalzeit von SCIAMACHY Messungen für den aufsteigenden Teil des Satellitenorbits . . . . .	19
3.6	Einfluss der Korrektur des Dunkelstromes . . . . .	21
3.7	Einfluss des Entspikens auf das Spektrum . . . . .	22
3.8	Degradierung des SCIAMACHY Instrumentes in Kanal 6 . . . . .	24
3.9	Spektrale Filterfunktionen von SABER und Messkanäle von SCIAMACHY . . . . .	26
3.10	Längen-Breiten Verteilung der SCIAMACHY und SABER Messpunkte . . . . .	27
3.11	Breiten-Lokalzeit Verteilung der SCIAMACHY und SABER Messpunkte . . . . .	27

3.12	Vergleich der Strahlungsprofile von SCIAMACHY und SABER bei 20° N . . . . .	28
3.13	Vergleich der Strahlungsprofile von SCIAMACHY und SABER bei 60° N . . . . .	28
4.1	Übergang vom Hundschen Kopplungsfall a zum Fall b für ein in- vertiertes Doublett-System (Gerndt (1986)) . . . . .	34
4.2	Rotations-Schwingungs-Übergänge des OH( $X^2\Pi_{\Omega}$ ) (Gerndt (1986))	35
4.3	Airglow-Spektrum im Bereich von 1,2 $\mu\text{m}$ bis 1,7 $\mu\text{m}$ (Gerndt (1986))	36
4.4	Mittleres Höhenprofil der OH Emissionen für mittlere Breiten im November 2005 . . . . .	39
4.5	Darstellung der Einsteinkoeffizienten für den Übergang $\Delta v = 2$ . .	40
4.6	Vergleich nächtlicher Limb OH Emissionsspektren zwischen non- LTE Modell und SCIAMACHY Messungen . . . . .	46
5.1	Einfluss eines konstanten Offsets in der Strahlungsdichte auf die Heizungsrate . . . . .	57
5.2	Einfluss eines Gainfehlers in der Strahlungsdichte auf die Hei- zungsrate . . . . .	58
5.3	Einfluss eines konstanten Offsets in der Tangentenhöhe auf die Heizungsrate . . . . .	59
5.4	Einfluss eines konstanten Offsets in der Temperatur auf die Hei- zungsrate . . . . .	59
5.5	Einfluss eines konstanten Offsets im Ozon auf den atomaren Was- serstoff . . . . .	60
6.1	Strahlungsdichtespektren von SCIAMACHY für den 17.03.2007 . .	64
6.2	Tagesmittel vom 17.03.2007 des Höhenprofils der Heizungsrate in- klusive Standardabweichung . . . . .	64
6.3	Tagesmittel vom 17.03.2007 des Höhenprofils von atomarem Was- serstoff inklusive Standardabweichung . . . . .	65

---

6.4	Tagesmittel vom 17.03.2007 des Höhenprofils von atomarem Sauerstoff inklusive Standardabweichung . . . . .	65
6.5	Vergleich verschiedener Messungen für Höhenprofile von atomarem Wasserstoff . . . . .	67
6.6	Vergleich verschiedener Messungen für Höhenprofile von atomarem Sauerstoff . . . . .	69
6.7	Zeitreihe der integrierten OH Emissionen aus SCIAMACHY Kanal 6 am Äquator . . . . .	71
6.8	Saisonaler Zyklus der Heizungsrate über den analysierten Messzeitraum von August 2002 bis April 2009 . . . . .	74
6.9	Saisonaler Zyklus von atomarem Wasserstoff über den analysierten Messzeitraum von August 2002 bis April 2009 . . . . .	75
6.10	Saisonaler Zyklus von atomarem Sauerstoff über den analysierten Messzeitraum von August 2002 bis April 2009 . . . . .	76
7.1	Messung und Vorhersage der Sonnenflecken für den 23sten und 24sten solaren Zyklus . . . . .	78
7.2	Zeitliche Entwicklung des Trends in der Strahlungsdichte . . . . .	82
7.3	Breiten-Höhen-Querschnitt des Trends in der Strahlungsdichte über den Zeitraum von 2002 - 2009 . . . . .	82
7.4	Zeitliche Entwicklung des Trends in der Ozondichte . . . . .	84
7.5	Breiten-Höhen-Querschnitt des Trends in der Ozondichte über den Zeitraum von 2002 - 2009 . . . . .	84
7.6	Zeitliche Entwicklung des Trends in der atomaren Wasserstoffdichte	87
7.7	Breiten-Höhen-Querschnitt des Trends in der atomaren Wasserstoffdichte über den Zeitraum von 2002 - 2009 . . . . .	87
7.8	Zeitliche Entwicklung des Trends in der Heizungsrate . . . . .	88
7.9	Breiten-Höhen-Querschnitt des Trends in der Heizungsrate über den Zeitraum von 2002 - 2009 . . . . .	88
7.10	Zeitliche Entwicklung des Trends in der atomaren Sauerstoffdichte	89

7.11	Breiten-Höhen-Querschnitt des Trends in der atomaren Sauerstoffdichte über den Zeitraum von 2002 - 2009 . . . . .	89
7.12	Langfristige Variationen im atomaren Wasserstoff simuliert mit HAMMONIA . . . . .	92
7.13	Langfristige Variationen im Ozon simuliert mit HAMMONIA . . . . .	92
8.1	Gemittelte Raum-Zeit-Spektren über den Zeitraum 2002 - 2006 von SCIAMACHY Heizungsraten und SABER Temperaturen in 87 km Höhe am Äquator . . . . .	99
8.2	Varianzen durch Kelvinwellen abgeleitet aus Raum-Zeit-Spektren der SCIAMACHY Heizungsraten in $K^2/\text{Tag}^2$ (rechts) und SABER Temperaturen in $K^2$ (links) in 87 km . . . . .	100
8.3	Gemittelte Raum-Zeit-Spektren über den Zeitraum 2002 - 2006 von SCIAMACHY Heizungsraten und SABER Temperaturen in 87 km Höhe bei $20^\circ$ N . . . . .	101
8.4	Varianzen durch Rossby-Schwerewellen abgeleitet aus Raum-Zeit-Spektren der SCIAMACHY Heizungsraten in $K^2/\text{Tag}^2$ (links) und SABER Temperaturen in $K^2$ (rechts) in 87 km . . . . .	102
8.5	Varianzen in Bezug auf Rossbywellen von SCIAMACHY (links) und SABER (rechts) in 87 km . . . . .	103
8.6	Gemittelte Raum-Zeit-Spektren über den Zeitraum 2002 - 2006 von SCIAMACHY Heizungsraten und SABER Temperaturen in 87 km Höhe bei $40^\circ$ N . . . . .	104
8.7	Varianzen durch Quasi-2-Tageswellen abgeleitet aus Raum-Zeit-Spektren der SCIAMACHY Heizungsraten in $K^2/\text{Tag}^2$ (links) und SABER Temperaturen in $K^2$ (rechts) in 87 km . . . . .	105
8.8	Gemittelte Raum-Zeit-Spektren über den Zeitraum 2002 - 2006 von SCIAMACHY Heizungsraten und auf das SCIAMACHY Messgitter interpolierte SABER Temperaturen in 87 km Höhe am Äquator und bei $20^\circ$ N . . . . .	107

- 
- 8.9 Gemittelte Raum-Zeit-Spektren über den Zeitraum 2002 - 2006 von  
SCIAMACHY Heizungsdaten und auf das SCIAMACHY Messgitter  
interpolierte SABER Temperaturen in 87 km Höhe bei 40° N . . . 108

# Tabellenverzeichnis

4.1	Ratenkonstantenmatrix nach Adler-Golden (1997) . . . . .	42
5.1	Abschätzung der verschiedenen Fehler im Retrieval und non-LTE Modell . . . . .	62



# Kurzfassung

Die globale Klimaänderung führt zu einem Anstieg der mittleren Oberflächentemperatur. Aber nicht nur die Troposphäre und Stratosphäre, sondern auch die Mesosphäre wird durch den Klimawandel beeinflusst. Die Mesosphäre ist vermutlich der empfindlichste Bereich der gesamten Atmosphäre im Hinblick auf die Identifizierung langfristiger Klimaänderungen, aufgrund der geringeren Luftdichte gegenüber dem Erdboden und der effektiven Kühlung durch Infrarotstrahlung.

Diese Arbeit befasst sich mit der Auswertung von Strahlungsemissionen des angeregten Hydroxylradikals ( $\text{OH}^*$ ), die von dem SCIAMACHY Instrument gemessen werden. SCIAMACHY ist eines von zehn Instrumenten auf dem Umweltsatelliten Envisat (Environmental Satellite), der im März 2002 gestartet wurde.

Im Rahmen dieser Arbeit wurden die  $\text{OH}^*$  Messungen mittels verbesserter Kalibrationsdaten und Filterung unrealistischer Datenpunkte so aufbereitet, dass eine weitergehende Analyse möglich war.

Die Anregung von OH erfolgt in der oberen Mesosphäre/ unteren Thermosphäre über eine Kette von Sauerstoff-Wasserstoff Reaktionen. Im Bereich zwischen 83 und 95 km Höhe ist die chemische Reaktion von Ozon mit atomarem Wasserstoff, bei der  $\text{OH}^*$  gebildet wird, eine der wichtigsten Energiequellen. In diesem Bereich kann die Erwärmung der Atmosphäre direkt aus den gemessenen  $\text{OH}^*$  Strahlungsemissionen abgeleitet werden.

In dieser Arbeit werden chemische Heizungsraten, atomarer Wasserstoff und atomarer Sauerstoff aus den Messungen abgeleitet. Für die Ableitung von atomarem

Wasserstoff wird zusätzlich noch die Messung von Ozon benötigt. Diese erfolgt durch das GOMOS Instrument, welches sich ebenfalls auf dem Envisat Satelliten befindet.

Die Analyse erfordert die Entwicklung eines komplexen non-LTE Modells, in dem alle Produktions- und Verlustmechanismen der einzelnen Vibrationszustände von OH berücksichtigt werden. Mittels inverser Modellierung wird OH\* direkt aus den SCIAMACHY Emissionsmessungen abgeleitet.

Für die abgeleiteten Größen wurden saisonale und räumliche Variationen betrachtet. Es findet sich in allen Größen eine halbjährliche Schwingung mit dem Maximum am Äquator im Frühjahr und Herbst, die mit der unterschiedlichen Anregung der täglichen Gezeitenwelle zusammenhängt. Eine globale Wellenanalyse zeigt, dass in dem Datensatz die wesentlichen atmosphärischen Wellensignaturen, wie Kelvinwellen, Rossby-Schwerewellen und Rossbywellen, identifiziert werden können.

Außerdem wurde der Einfluss der solaren Einstrahlung, insbesondere des solaren 11-Jahres Zyklus auf die abgeleiteten Parameter untersucht. In der von SCIAMACHY gemessenen Strahlungsdichte wird über die analysierten 5,5 Jahre, diese entsprechen einem halben solaren Zyklus vom solaren Maximum bis zum solaren Minimum, eine Abnahme von ungefähr 15 % beobachtet. Innerhalb der analysierten 5,5 Jahre hat die Heizungsrate um ca. 1 K/Tag abgenommen. In der Ozondichte kann ein negativer Trend von ca. 20 % und in der atomaren Sauerstoffdichte ein negativer Trend von 10 % bis 15 % festgestellt werden. In der atomaren Wasserstoffdichte hingegen ist eine Zunahme über die letzten 5,5 Jahre festzustellen. Der Trend liegt in diesem Fall zwischen 20 % und 30 %. Ein Vergleich mit den Modelldaten von SOCRATES, HAMMONIA und WACCM3 zeigt, dass dieser Trend auf die unterschiedliche solare Einstrahlung zurückgeführt werden kann.

# Abstract

Man-made climate change causes the global mean surface temperature to rise. However, climate change also effects the upper altitudes of the Earth's atmosphere. Due to the low air density and due to the efficient infrared radiation cooling to space, temperature trends and other signals of climate change are much more pronounced in the mesosphere than at the ground.

This work deals with the analysis and interpretation of the emissions of excited hydroxyl radicals ( $\text{OH}^*$ ), measured by SCIAMACHY (Scanning Imaging Absorption Spectrometer for Atmospheric CHartographY). SCIAMACHY is one of the ten instruments aboard ESA's Envisat (Environmental Satellite) launched in March 2002.

In the upper mesosphere/ lower thermosphere excited  $\text{OH}^*$  is produced by oxygen-hydrogen-reactions. Between 83 and 95 km altitude the reaction of ozone and atomic hydrogen, which produces  $\text{OH}^*$ , is the most important heat source. The heating efficiency of the atmosphere in this region is directly proportional to the measured emission by  $\text{OH}^*$ .

In this work chemical heating rate, as well as concentrations of atomic hydrogen and atomic oxygen are derived from the measurements. The determination of atomic hydrogen requires ozone measurements. These are provided by GOMOS (Global Ozone Monitoring by Occultation of Stars), which is another experiment aboard Envisat.

The analysis required the development of a complex non-LTE model, which takes into account all production and loss mechanism of the various vibrational states

of OH. The abundance of OH\* is inferred from the SCIAMACHY emission measurements by means of inverse modelling techniques.

For all parameters seasonal and spatial variations were investigated. A semi-annual cycle at the equator with the maximum during equinox was found, this is related to the different excitation of the diurnal tide. A global scale wave analysis shows that the main wave patterns of the atmosphere, like Kelvinwaves, Rossby-Gravitywaves and Rossbywaves, can also be found in the data.

Additionally the influence of the solar cycle was analyzed. The results show a heating rate trend of 1 K/day over 5.5 years. Ozone has a negative trend of 20 % and atomic oxygen of 10 - 15 %. Atomic hydrogen shows an increase over the last 5.5 years of 20 - 30 %. Comparisons with atmospheric models like SOCRATES, HAMMONIA and WACCM3 show similar results. The observed trend can be allocated to the solar cycle.

# Kapitel 1

## Einleitung

Im Zusammenhang mit der globalen Klimaänderung gerät der Zustand der Erdatmosphäre verstärkt in den Blickpunkt der Öffentlichkeit. So wird der Klimawandel zumindest zum Teil der Zunahme von Kohlendioxid und anderer atmosphärischer Treibhausgase wie z.B. Methan oder Wasserdampf in der Atmosphäre zugeschrieben. Der Fokus des allgemeinen Interesses liegt dabei vorwiegend auf der Erwärmung der Erdoberfläche und den damit verbundenen Auswirkungen auf die Troposphäre und deren unmittelbaren Konsequenzen für den Menschen.

Außerdem wird zunehmend klar, dass auch Änderungen der Zusammensetzung der Stratosphäre signifikanten Einfluss auf das Klima haben. Der Anstieg der atmosphärischen Treibhausgase betrifft allerdings nicht nur die Troposphäre und die Stratosphäre, sondern hat auch einen erheblichen Einfluss auf die Energiebilanz der Mesosphäre (Beig et al. (2003)). Außerdem ist die Mesosphäre vermutlich der empfindlichste Bereich der gesamten Atmosphäre im Hinblick auf die Identifizierung langzeitlicher Klimaänderungen (Portmann et al. (1995), Thomas (1996), Berger (2005)). Klimasignale sind hier ausgeprägter und damit in kürzerer Zeit statistisch signifikant nachzuweisen als im Bereich der Stratosphäre oder der Troposphäre. Dies ist der Fall, da die Luftdichte im Bereich der Mesosphäre um etwa 5 bis 6 Größenordnungen geringer ist als am Erdboden. Außerdem ist in die-

sem Höhenbereich die Kühlung durch Infrarotabstrahlung insbesondere durch CO<sub>2</sub> besonders effektiv. Dies wurde erstmals von Roble und Dickinson (1989) mit Modellrechnung vorhergesagt. Damit wird die Mesosphäre zunehmend als Frühindikator für Klimasignale betrachtet. In den letzten zwei Jahrzehnten haben Forschungsergebnisse die Bedeutung dieser Höhenschicht für das Verständnis der Erdatmosphäre bzw. des Erdsystems als Ganzes aufgezeigt (Johnson und Killeen (1995), Shepherd et al. (2002)). So ist heute bekannt, dass sich in diesem Bereich wesentliche Prozesse für die Energiebilanz der Atmosphäre insgesamt, sowie für ihre globale Zirkulationsstruktur abspielen. Dem Einfluss der solaren Einstrahlung und den Kopplungsmechanismen mit den unteren Atmosphärenschichten kommt eine große Bedeutung zu.

Die Mesosphäre wird durch Schwerewellen und Gezeiten, die hauptsächlich in der Troposphäre angeregt werden, an die Troposphäre gekoppelt. Die Windfelder der Stratosphäre, die durch das thermische Gleichgewicht bestimmt sind und damit von der Ozondichte und deren Einfluss auf die Temperaturstruktur abhängen, fungieren als Wellenfilter und lassen nur bestimmte Wellen passieren. Sobald die Schwerewellen die Mesosphäre erreicht haben, ist ihre Amplitude so groß, dass sie brechen. Das Brechen ist mit einem Impulsübertrag verbunden und treibt die globale Zirkulation in der Mesosphäre und unteren Thermosphäre an (Fritts und Alexander (2003)).

Bei der Analyse von Klimaschwankungen in der Atmosphäre müssen auch die Wechselwirkungen zwischen Sonne und Erde berücksichtigt werden. Zuerst muss der natürliche Anteil an den Klimaänderungen ausreichend quantifiziert werden, um eine zuverlässige Aussage über den antropogenen Einfluss auf das Klima und die Temperaturänderungen in der Atmosphäre zu treffen. Dazu gibt es verschiedene Modellrechnungen (z.B. Schmidt et al. (2006), Marsh et al. (2007)). Die Messdichte in der Mesosphäre ist nicht vergleichbar mit der in der Troposphäre oder Stratosphäre. Routinemessungen in der Mesosphäre existieren nur in stark begrenztem Umfang, da diese Region der Atmosphäre messtechnisch nur

---

schwer zugänglich ist. Mit Flugzeugen oder Ballonen kann diese Höhengschicht nicht erreicht werden. So werden zur Messung vor allem Spektrometer auf Satelliten, Raketen getragene Instrumente sowie bodengebundene Lidar- und Radargeräte eingesetzt.

In dieser Arbeit wurden Strahlungsemissionen des angeregten Hydroxylradikals ( $\text{OH}^*$ ) ausgewertet, die durch das SCIAMACHY Instrument gemessen wurden. SCIAMACHY befindet sich auf dem europäischen Umweltsatelliten Envisat und liefert seit 2002 Messungen der oberen Mesosphäre und unteren Thermosphäre. Das genaue Messprinzip und die zu berücksichtigenden Instrumenteneffekte bei der Datenauswertung werden in Kapitel 3 näher erläutert. Die Anregung von OH erfolgt in der oberen Mesosphäre/unteren Thermosphäre über eine Kette von Sauerstoff-Wasserstoff Reaktionen. Im Bereich zwischen 83 und 95 km Höhe ist die chemische Reaktion von Ozon mit atomarem Wasserstoff eine der wichtigsten Energiequellen. Die Erwärmung der Atmosphäre kann in diesem Bereich direkt aus den gemessenen OH Strahlungsemissionen abgeleitet werden. Um atomaren Wasserstoff zu bestimmen ist noch zusätzlich die Messung von Ozon nötig. Diese erfolgt durch das GOMOS Instrument, welches sich ebenfalls auf Envisat befindet. Die Ableitung von atomarem Wasserstoff und Sauerstoff erfolgt hier mit Hilfe des Retrievalverfahrens. Dazu wurde zuerst ein neues Vorwärtsmodell entwickelt, welches die verschiedenen Wechselwirkungen der Molekülzustände berücksichtigt. Mit diesem Vorwärtsmodell können dann die Strahlungsemissionen der Atmosphäre simuliert werden. Die Details des Vorwärtsmodells werden in Kapitel 4 erläutert. Aus den simulierten Strahlungsemissionen lassen sich dann im Retrieval Heizungsrate, atomarer Wasserstoff und atomarer Sauerstoff ableiten. Die Theorie des Retrievals, sowie die Fehlerbetrachtung des Retrievalverfahrens und des Vorwärtsmodells sind in Kapitel 5 zu finden. Kapitel 6 befasst sich mit den saisonalen und räumlichen Variationen der Retrievalergebnisse. Außerdem werden in diesem Kapitel die Ergebnisse mit anderen Messungen verglichen. Der Einfluss des solaren Zyklus auf die Messdaten wird in Kapitel 7 un-

tersucht. Dabei wurden die beobachteten langzeitlichen Variationen in den Daten mit Atmosphärenmodellen verglichen, um Hinweise auf den solaren Einfluss festzustellen. Kapitel 8 befasst sich zum Schluss noch mit den globalskaligen Wellen. Diese spielen in der Atmosphäre neben den saisonalen oder noch längerfristigen Variationen der Atmosphäre ebenfalls eine wichtige Rolle. So ist der neue Datensatz auch zur Analyse von globalskaligen Wellen in der Atmosphäre hervorragend geeignet.



# Kapitel 2

## Die Bedeutung von atomarem Sauerstoff und atomarem Wasserstoff in der oberen Atmosphäre

### 2.1 Die obere Atmosphäre

In der oberen Mesosphäre/ unteren Thermosphäre (engl. upper mesosphere/ lower thermosphere, UMLT), in einem Höhenbereich zwischen 70 und 120 km, existiert eine leuchtende Atmosphärenschicht, die im englischen "Airglow" genannt wird. Unter bestimmten Bedingungen ist sie mit bloßem Auge, z.B. von einem Space Shuttle oder von der Internationalen Raumstation, sichtbar. Abbildung 2.1 zeigt eine Aufnahme vom Satelliten, in der diese Schicht als eine dünne blaue Linie zu sehen ist. Das Airglowspektrum reicht vom ultravioletten Wellenlängenbereich, von ca. 75 nm, über das sichtbare Licht bis in den infraroten Bereich, bis ca. 9  $\mu\text{m}$ . Die Airglowschicht kann über verschiedene Emissionslinien unterschiedlicher Moleküle beobachtet werden, wobei die emittierte Strahlung aus unterschiedlichen Höhenschichten in der UMLT-Region kommt. In der Mesopausenregion, zwischen 80 und 100 km Höhe, treten Airglowemissionen von angeregtem atomarem ( $\text{O}^*$ ) sowie angeregtem molekularem Sauerstoff ( $\text{O}_2^*$ )

oder angeregten Hydroxylmolekülen ( $\text{OH}^*$ ) auf. Messdaten zeigen, dass sich die  $\text{O}_2^*$ -Schicht in einer Höhe von ungefähr 95 km befindet, während die  $\text{OH}^*$ -Schicht bei etwa 87 km liegt (Zhao et al. (2005)). Diese Arbeit konzentriert sich ausschließlich auf die Schicht angeregter OH-Moleküle.



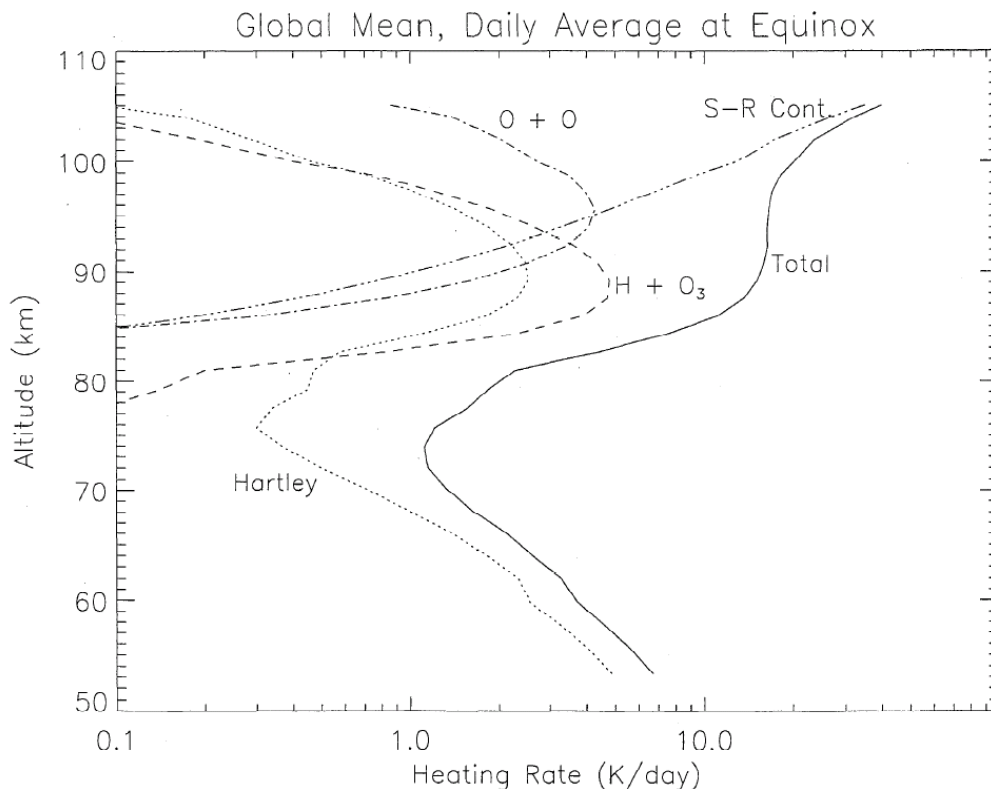
**Abbildung 2.1:**  $\text{OH}^*$ -Airglow, im Falschfarbenbild sichtbar als dünne blaue Linie, aufgenommen mit der NIR-Kamera ( $0,9\text{-}3,1 \mu\text{m}$ ) von Bord des Satelliten Clementine (Quelle:<http://www.solarviews.com/cap/earth/earthlim.htm>)

Meinel (1950) identifizierte erstmals angeregte  $\text{OH}^*$ -Moleküle in der UMLT-Region. Die  $\text{OH}^*$ -Schicht hat eine vertikale Ausdehnung von 8 - 9 km, wobei ihr Schwerpunkt in der Mesopausenregion bei 87 km liegt. Ursache der  $\text{OH}^*$ -Emissionen sind Strahlungsübergänge aus verschiedenen Vibrations-Rotationsbanden (siehe Kapitel 4.1). Je nach Energieübergang wird die Strahlung im Sichtbaren ab ca.  $0,52 \mu\text{m}$  bis in den nahen infraroten Wellenlängenbereich bis ca.  $4 \mu\text{m}$  emittiert. Die Anregung des Hydroxyls wird durch eine Kette von Sauerstoff-Wasserstoff-Reaktionen in der UMLT-Region verursacht (Kapitel 5.2). Die Energiebilanz der oberen Atmosphäre wird wesentlich durch Strahlungspro-

zesse beeinflusst (Beig et al. (2003)). Dabei wird die Sonnenenergie hauptsächlich von Ozon und molekularem Sauerstoff im ultravioletten Wellenlängenbereich (z.B. Strobel (1978)) sowie von Kohlendioxid im mittleren Infrarot absorbiert. Zusätzlich zu den Strahlungsprozessen wird die Energiebilanz der UMLT maßgeblich durch chemische und dynamische Prozesse bestimmt (Crutzen (1971), Brasseur und Offermann (1986), Mlynczak und Solomon (1993), Riese et al. (1994)). Bei den chemischen Prozessen handelt es sich um die Abgabe von Sonnenenergie durch exotherme chemische Reaktionen. Oberhalb der Mesopause wird durch  $O_2$ -Photolyse bei Wellenlängen kleiner 240 nm in den Schumann-Runge-Banden und im Schumann-Runge-Kontinuum atomarer Sauerstoff produziert. Mehr als 70 % der bei der Photolyse absorbierten Sonnenenergie wird im chemischen Potential von atomarem Sauerstoff gespeichert und geht nur zu einem kleinen Teil in die Anregung der Reaktionsprodukte  $O(^1D)$  und  $O(^1S)$  oder in die lokale Erwärmung der Atmosphäre.

In der Thermosphäre hat atomarer Sauerstoff eine vergleichsweise hohe Lebenszeit (ca. 1 Woche bei 90 km und 6 Monate bei 100 km) (Allen et al. (1984)), so dass durch atomaren Sauerstoff große Energiemengen über planetare Skalen transportiert werden können. Eine Senke von atomarem Sauerstoff stellt der Abwärtstransport in der Mesosphäre dar. Dort wird der atomare Sauerstoff zu Ozon bzw. molekularem Sauerstoff rekombiniert. Im Bereich zwischen 83 und 95 km Höhe ist die chemische Reaktion von Ozon mit atomarem Wasserstoff eine der wichtigsten Energiequellen. Die chemische Aufheizung ist in diesen Höhen sogar größer als die direkte Aufheizung durch Absorption der Sonnenstrahlung. Dies ist in Abbildung 2.2 (Mlynczak (1999)) dargestellt. Dabei ist die Erwärmung der Atmosphäre aufgrund der verschiedenen Heizquellen in den einzelnen Höhenschichten als globales Tagesmittel aufgetragen. Die einzelnen Heizquellen sind die Absorption von ultravioletter Strahlung durch Ozon in den Hartley Banden (200 - 300 nm) und durch molekularen Sauerstoff im Schumann-Runge-Kontinuum (135 - 175 nm). Zusätzlich ist die Aufheizung der Atmosphäre aufgrund der chemischen

Reaktionen  $H + O_3 \rightarrow OH + O_2$  und  $O + O + M \rightarrow O_2 + M$  dargestellt. Die mit "Total" bezeichnete Kurve gibt die Summe dieser vier Prozesse wieder. Außerdem tragen die dynamischen Prozesse, wie das Brechen von Schwerewellen und die damit verbundene Abgabe von Energie an die Umgebung in Form von lokaler Aufheizung zur Energiebilanz der UMLT-Region bei.



**Abbildung 2.2:** Tagesmittel der globalen Heizungsrate aufgrund von Absorption durch solare Strahlung im  $O_2$  Schumann-Runge Kontinuum und in den  $O_3$  Hartley Banden und durch exotherme chemische Reaktionen, die mit Total bezeichnete Kurve gibt die Summe aller Prozesse an (Mlynczak (1999))

Die Energiebilanz wird jedoch nicht nur durch Aufheizung durch strahlungsbedingte, chemische und dynamische Prozesse bestimmt, sondern eine ebenso entscheidende Rolle spielt Strahlungsabkühlung. So ist die Abstrahlung von Wärme in den Weltraum besonders durch  $CO_2$  im infraroten Bereich bei  $15 \mu m$  die wesentliche Ursache für die Abnahme der Temperatur in der Mesosphäre. Durch

Stoßwechselwirkungen überträgt atomarer Sauerstoff kinetische Energie an  $\text{CO}_2$  und regt dieses Molekül zu Schwingungen an. Bei der nachfolgenden Abregung des Moleküls wird Energie in Form von Strahlung bei  $15 \mu\text{m}$  abgestrahlt. Außerdem können in der Thermosphäre thermisch angeregte Sauerstoffatome Infrarotstrahlung bei  $63 \mu\text{m}$  emittieren und tragen somit zu einer weiteren Kühlung der Atmosphäre bei (Bates (1951), Craig und Gille (1969), Kockarts und Peetermans (1970)). In der Region der Mesopause herrscht ein ausgeprägter Jahresgang der Temperatur, der dem am Erdboden entgegengesetzt ist. So sind die Temperaturen im Bereich der Mesopause über dem Winterpol etwa  $60 - 80 \text{ K}$  höher als über dem Sommerpol. Dieses Verhalten tritt auf, da sich die Mesopausenregion nicht im Strahlungsgleichgewicht befindet. Dies wiederum liegt an der mit brechenden Schwerewellen verbundenen Meridionalströmung. Aufgrund der brechenden Schwerewellen kann kein Temperatur- und Druckausgleich zwischen dem Sommerpol und dem Winterpol stattfinden. Die Verletzung des Kräftegleichgewichts aufgrund des Energie- und Impulsübertrags brechender Schwerewellen führt jedoch zu einer Abbremsung bzw. Beschleunigung der großräumigen zonalen Windströmung und damit zur Ablenkung des vorherrschenden geostrophischen Windes, d. h. zur Ausbildung meridionaler Strömungskomponenten. Infolgedessen erfolgt netto ein Druckausgleich zwischen dem Sommerpol und dem Winterpol. Die Strömung vom Sommerpol zum Winterpol ist charakterisiert durch aufsteigende warme Luftmassen über dem Sommerpol, die dann zum Winterpol strömen und hier wieder absteigen. Das Aufsteigen der Luft ist verbunden mit adiabatischer Expansion und damit mit einer Abkühlung der Luft über dem Sommerpol. Die absteigenden Luftmassen haben Kompression zu Folge, es kommt zur Erwärmung der Luft über dem Winterpol.

Für die Verteilung der Gase in der mittleren Atmosphäre sind sowohl die chemischen als auch die dynamischen Prozesse wichtig. Atomarer Sauerstoff wird polwärts transportiert und sinkt dort wieder ab (Kellogg (1961)). Bei niedrigen und mittleren Breiten wird der Transport einzelner Sauerstoffmoleküle durch

vertikale Diffusion aufgrund von kleinskaligem Brechen von Schwerewellen dominiert, was zu einer halbjährlichen Variation im atomaren Sauerstoff führt. Bei hohen Breiten erreicht die vertikale Advektion ihr Maximum bei 85 - 90 km, was zu einem jährlichen Zyklus, mit einem Minimum im Sommer und einem Maximum im Winter, führt.

Das Mischungsverhältnis von atomarem Sauerstoff beträgt einige ppm in der Mesosphäre und steigt dann mit der Höhe auf einige Prozent in der Mesopause. Oberhalb 170 km ist atomarer Sauerstoff der Hauptbestandteil der Atmosphäre.

## **2.2 Methoden zur Messung von atomarem Sauerstoff und atomarem Wasserstoff**

Die in-situ Messung von atomarem Sauerstoff fand in den 60er und 70er häufig mit Massenspektrometern statt. Diese wurden zum einen auf Forschungsraketen (Offermann et al. (1981)) und zum anderen auf verschiedenen Satelliten (Hedin et al. (1974)) eingesetzt.

Die Messung der Resonanz-Fluoreszenz oder Absorption des Übergangs  $O(^3S) \rightarrow O(^3P)$  bei 130 nm (Dickinson et al. (1974), Thomas et al. (1979)) ist eine weitere Methode zur Ableitung von atomarem Sauerstoff.

In der Fernerkundung von atomarem Sauerstoff wird häufig die Methode der Messung des Tag- oder Nachtleuchtens (Wasser und Donahue (1979), Thomas und Young (1981), McDade et al. (1986)) angewendet. Für die Ableitung von atomarem Sauerstoff aus diesen Emissionen wird ein photochemisches Modell benötigt. Zusätzlich wird die Präzision der abgeleiteten Sauerstoffprofile durch die beschränkte Kenntnis der verwendeten Ratenkonstanten stark limitiert.

Eine Technik zur Ableitung von atomarem Sauerstoff während einer Aurora ist die Messung der Verdan-Kaplan-Banden von Stickstoff (Strickland et al. (1989)).

Die einzige Fernerkundungsmethode, die ohne aufwendige Modellierung der Anregungszustände auskommt, ist die Messung des 63  $\mu\text{m}$  Feinstruktur-Über-

gangs von atomarem Sauerstoff. Mit dieser Methode wurde thermosphärischer Sauerstoff von einem Ballon (Lin et al. (1987)) und von mehreren Forschungsraketen mit verschiedenen Instrumenten (z.B. Grossmann und Offermann (1978), Grossmann et al. (1983), Grossmann und Vollmann (1997)) gemessen. Die ersten globalen Messungen mit dieser Methode wurden mit CRISTA (Cryogenic Infrared Spectrometers and Telescopes for the Atmosphere) durchgeführt (Grossmann et al. (2000), Kaufmann et al. (2003)).

Atomarer Wasserstoff gehört zu den am schwersten zu messenden Größen in der oberen Atmosphäre. So wurden die ersten und einzigen in situ Messungen von atomarem Wasserstoff in der oberen Atmosphäre von Sharp und Kita (1987) durchgeführt. Dabei wurde das Prinzip der Resonanzfluoreszenz von einem raketengetragenem Instrument mit eigener Lichtquelle verwendet.

Ansonsten wurde hier wieder die Methode der Messung des Tag- oder Nachtlichts angewendet. Hierzu wird genauso wie beim atomaren Sauerstoff ein photochemisches Modell benötigt. Evans und Llewellyn (1973) haben Höhenprofile von atomarem Wasserstoff aus Raketenmessungen der OH Meinel Banden und der  $O_2(^1\Delta_g)$  Emissionen bei  $1,27 \mu\text{m}$  abgeleitet.

Die erste Klimatologie von atomarem Wasserstoff wurde von Thomas (1990) erstellt. Dabei wurden Messungen von Ozon und OH Emissionen von SME (Solar Mesospheric Explorer) berücksichtigt und sowohl atomarer Sauerstoff als auch atomarer Wasserstoff abgeleitet. Allerdings gab es keine Nachtmessungen von Ozon, so dass zwischen den einzelnen Messungen eine zeitliche Diskrepanz herrscht. In dieser Arbeit werden atomarer Wasserstoff und Sauerstoff aus den OH Emissionen, die von SCIAMACHY gemessen werden, abgeleitet. Zusätzlich werden Ozonmessungen des GOMOS Instrumentes berücksichtigt. Damit können zum einen Nachtmessungen von Ozon benutzt werden und außerdem befindet sich das Instrument ebenfalls auf dem Envisat Satelliten, so dass sich gute Übereinstimmungen in den Geolokationen und Lokalzeiten ergeben.





# Kapitel 3

## ENVISAT Messungen

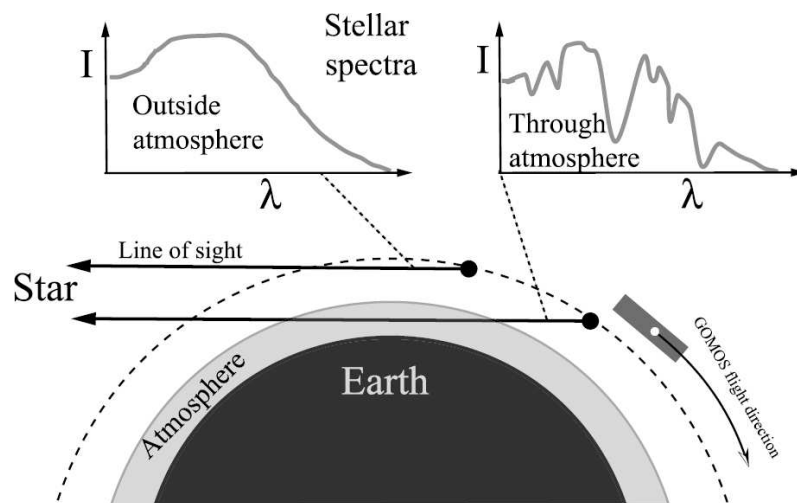
### 3.1 Der Envisat Satellit

Am 1. März 2002 wurde der Umweltsatellit Envisat (Environmental Satellite) (Dubock et al. (2001), Louet (2001)) vom Weltraumbahnhof Kourou, Französisch Guyana in eine 800 km hohe nahezu polare sonnensynchrone Umlaufbahn gebracht. Die Orbitinklination beträgt  $98^\circ$ . Die Umlaufdauer des Satelliten beträgt ca. 100 min. Damit kann global täglich während 14 Orbits gemessen werden. An Bord des Satelliten befinden sich 10 Experimente, die verschiedene Aspekte des Erdsystems und der Atmosphäre untersuchen sollen. Drei dieser Experimente dienen vor allem der Atmosphärenforschung (Nett et al. (2001)). Dies sind SCIAMACHY, GOMOS und MIPAS. Alle drei Experimente beruhen auf unterschiedlichen Messprinzipien und messen die emittierte, absorbierte und gestreute Strahlung in unterschiedlichen Wellenlängenbereichen, so dass sie sich gut ergänzen.

## 3.2 Das GOMOS Instrument

### 3.2.1 Messprinzip und Datenprozessing

Bei GOMOS (Global Ozone Monitoring by Occultation of Stars) handelt es sich um ein Sternenokkultationsspektrometer (Bertaux et al. (1991), Bertaux et al. (2004), Kyrölä et al. (2004)). Dabei wird die Absorption von Sternspektren in der Erdatmosphäre im ultravioletten, sichtbaren und nahen infraroten (250 - 950 nm) Wellenlängenbereich während des Sternenunterganges gemessen. Aus den Absorptionsmessungen können dann die Konzentrationen verschiedener Spurengase sowie die Temperatur abgeleitet werden. Die Messungen überdecken einen Höhenbereich von 20 bis 100 km mit einer vertikalen Abtastung von 1,7 km. Abbildung 3.1 zeigt schematisch das Messprinzip von GOMOS. Es wird das Spektrum eines Sternes einmal innerhalb der Atmosphäre und einmal außerhalb gemessen. Der Vorteil dieser Messmethode ist die Selbstkalibration, denn durch die Division des Spektrums innerhalb der Atmosphäre durch das außerhalb ergibt sich ein nahezu kalibrationsfehlerfreies Transmissionsspektrum. Aus dem Spektrum können Spurengasprofile mit hoher Absolutgenauigkeit abgeleitet werden. In dieser Studie werden die Ozonmessungen von GOMOS berücksichtigt, da für die Ableitung von atomarem Wasserstoff und Sauerstoff zusätzlich zu den OH Emissionen aus SCIAMACHY Messungen noch die Ozondichten benötigt werden (Kapitel 5.2 und 5.3). Aufgrund der Charakteristik der GOMOS-Messmethode müssen die Daten gefiltert werden, um unsichere Messungen zu eliminieren (Meijer et al. (2004)). Die Filterkriterien in dieser Studie basieren auf den Kriterien von Smith et al. (2008). Die Autoren beschränken sich in ihren Studien auf die heißen und hellen Sterne, da das Signal von diesen deutlich stärker ist und sich besser gegen den Hintergrund abhebt. Somit wird das Signal zu Rausch Verhältnis verbessert. Dies bedeutet im Detail, dass sowohl Sterne deren Temperatur kleiner 7000 K ist und gleichzeitig eine scheinbare Helligkeit über 1,9 mag haben als auch alle Sterne mit einer Temperatur kleiner 6000 K eliminiert



**Abbildung 3.1:** schematische Darstellung des Messprinzips von GOMOS (Sternenokkultation), welches auf der Änderung des Spektrums einer Lichtquelle innerhalb und außerhalb der Atmosphäre beruht (Meijer et al. (2004))

werden. Für die gleichzeitige Berücksichtigung von GOMOS Ozondaten und SCIAMACHY OH Emissionen müssen nahezu simultane Messungen vorliegen. Deshalb werden die GOMOS Messungen anhand ihrer Geolokation ausgewählt und mit dem Abstand gewichtet auf das SCIAMACHY Messgitter interpoliert.

## 3.3 Das SCIAMACHY Instrument

### 3.3.1 Das Messprinzip

SCIAMACHY (Scanning Imaging Absorption Spectrometer for Atmospheric CHartography) misst das von der Atmosphäre oder dem Boden gestreute, transmittierte, emittierte und reflektierte Sonnenlicht mit acht Kanälen im ultravioletten, sichtbaren und nahem infraroten Wellenlängenbereich (240 - 2380 nm) mit einer spektralen Auflösung von 0,2 - 1,5 nm (Bovensmann et al. (1999)). Das Instrument kann in drei verschiedenen Blickrichtungen messen: Nadir, Limb (Horizontsondierung) und Sonnen/Mond Okkultation (Abbildung 3.2). Die OH Emis-

sionen werden von SCIAMACHY lediglich im Limbmodus gemessen, deshalb erfolgt hier nur die Berücksichtigung dieser Messgeometrie. Die Auswertung in dieser Arbeit konzentriert sich auf den Messkanal 6 von SCIAMACHY. Dieser Kanal ist sehr stabil und die Strahlungsemissionen für  $\text{OH}(\Delta v = 2)$ , die in diesem Kanal liegen, haben die maximale Intensität.

Bei der Horizontsondierung (Limbmodus) beträgt das Gesichtsfeld ca. 110 km quer zur Flugrichtung und 2,6 km vertikal. Ein kompletter Höhenscan dauert ca. 60 s. Die Abtastung der Atmosphäre erfolgt vom Erdboden bis in 150 km Höhe mit einer vertikalen Schrittweite von 3 km.

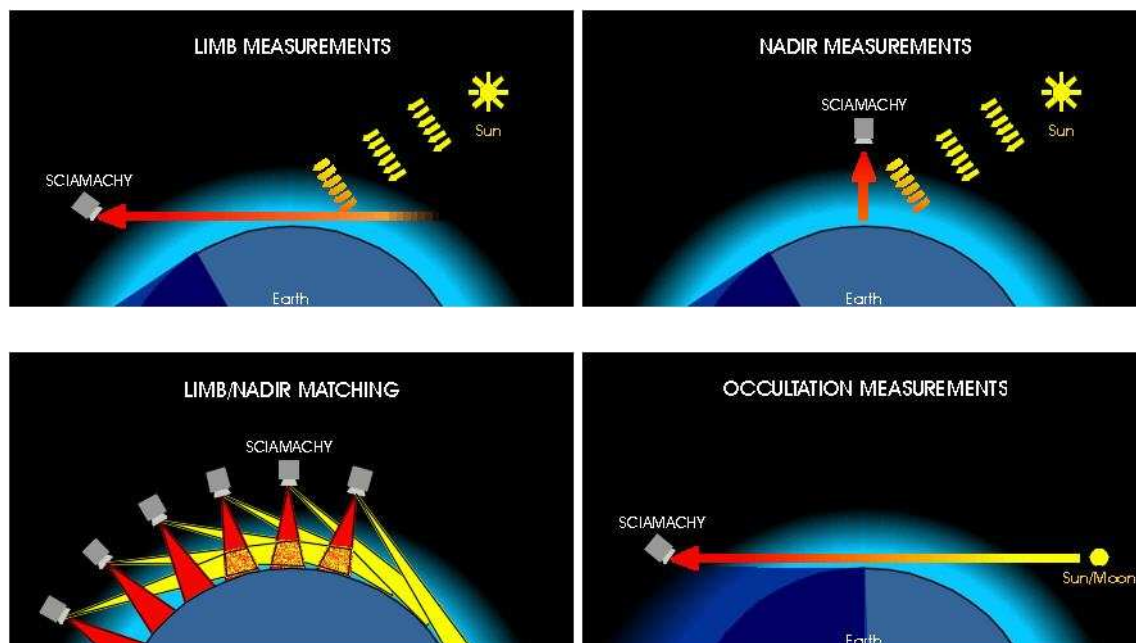


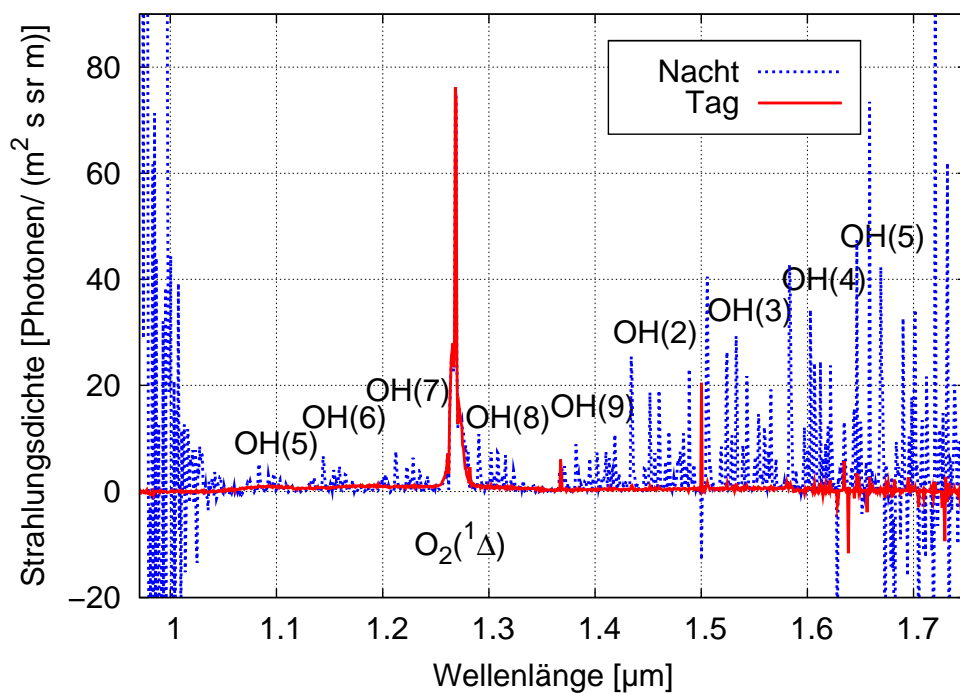
Abbildung 3.2: Die verschiedenen Messgeometrien von SCIAMACHY: Limb, Nadir, Limb/Nadir und Okkultation, (Bovensmann et al. (1999))

### 3.3.2 Charakterisierung der Messdaten

Die OH Emissionen werden sowohl tagsüber als auch nachts von SCIAMACHY gemessen. In Abbildung 3.3 sind zwei Spektren der gemessenen Emission für Kanal 6 dargestellt. Beide Spektren wurden in 88 km Höhe gemessen, das rote

tagsüber und das blaue nachts. Die Beschriftungen an den Kurven bezeichnen die Vibrationsbanden des OH Moleküls, die den einzelnen Emissionen zugrunde liegen. Außerdem liegt bei  $1,27 \mu\text{m}$  die  $\text{O}_2(^1\Delta)$  Emission. Am Anfang und am Ende des Kanals tritt erhöhtes Rauschen aufgrund der Eigenschaften des Detektors auf (Kaiser et al. (2004)).

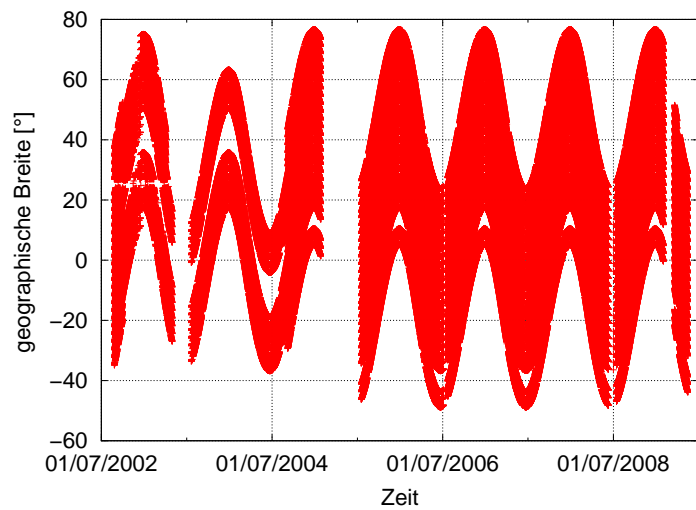
Beim Vergleich der Spektren fällt auf, dass die Strahlungsemissivitäten nachts deutlich höher sind (siehe Kapitel 5.2). In dem nächtlichen Spektrum können die Emissionslinien der einzelnen Vibrationsübergänge des OH Moleküls klar identifiziert und zugeordnet werden. Die Auswertung der SCIAMACHY OH Emissionen wird deshalb in dieser Arbeit auf die Nachtmessungen beschränkt.



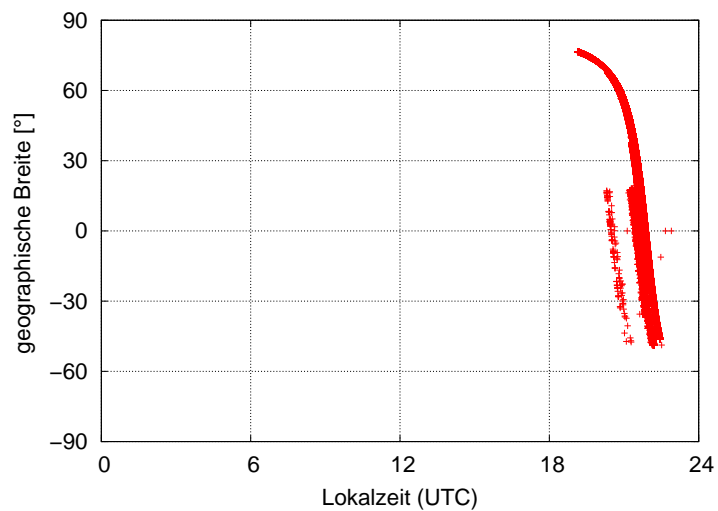
**Abbildung 3.3:** Dargestellt ist die Strahlungsemission eines einzelnen Spektrums von SCIAMACHY tagsüber (rote Kurve) und nachts (blaue Kurve) gegen die Wellenlänge, bezeichnet sind außerdem die einzelnen Vibrationsbanden, die den Emissionen zugrunde liegen

Abbildung 3.4 zeigt die Breitenüberdeckung über den gesamten Messzeitraum, in dem Messungen zur Auswertung zur Verfügung stehen, d. h. an diesen Punkten liegen sowohl SCIAMACHY OH Emissionsmessungen als auch GOMOS Ozonmessungen vor. Dargestellt ist die Breitenabhängigkeit der Messungen bezogen auf den Messzeitpunkt. Seit Ende August 2002 messen beide Instrumente kontinuierlich. Die Messungen überdecken einen Breitenbereich von  $50^{\circ}$  S bis  $80^{\circ}$  N. Auffällig sind zwei größere Datenlücken in dem gesamten Zeitraum. Bei der ersten, im Juni/Juli 2003, lag eine fehlerhafte Instrumentenkonfiguration vor, so dass das SCIAMACHY Instrument in einem falschen Höhenbereich gemessen hat. Die zweite Datenlücke, Anfang 2005, entstand aufgrund eines Messausfalls des GOMOS Instrumentes. Desweiteren ist auffällig, dass sich ab Anfang 2004 die Datendichte deutlich erhöht hat und ein größerer Breitenbereich abgedeckt wird, d. h. ab diesem Zeitpunkt messen beide Instrumente stabil ohne nennenswerte Ausfälle.

Aufgrund der Orbitinklination von Envisat wird jeder Ort auf der Erde von SCIAMACHY zu zwei nahezu festen Lokalzeiten überflogen und zwar einmal mit dem aufsteigenden Orbitteil des Satelliten (von Süden nach Norden) und einmal im absteigenden Orbitteil des Satelliten (von Norden nach Süden). Für SCIAMACHY finden diese Überflüge jeweils um ca. 10 und 22 Uhr Lokalzeit statt. Abbildung 3.5 zeigt die Breitenabhängigkeit der Lokalzeit. Dargestellt ist nur der aufsteigende Knoten, da eine sinnvolle Auswertung der OH Emissionen sich auf die Nachtmessungen beschränkt. Die Lokalzeit weicht über den gesamten Breitenbereich bis auf einzelne Messungen, die im Bereich zwischen  $50^{\circ}$  S und  $20^{\circ}$  N eine zweite nahezu parallele Spur bilden, nur wenig von 22 Uhr ab. Lediglich bei hohen Breiten erfolgt aufgrund der Satellitenbahn eine Verschiebung des Messzeitpunktes zu früheren Lokalzeiten.



**Abbildung 3.4:** Zeitreihe des überdeckten Breitenbereichs gemeinsamer SCIAMACHY und GOMOS Messungen, die Lücke 2003 entstand aufgrund einer fehlerhaften Einstellung des SCIAMACHY Instrumentes. Anfang 2005 ist GOMOS ausgefallen.



**Abbildung 3.5:** Breitenabhängigkeit der Lokalzeit von SCIAMACHY Messungen für den aufsteigenden Teil des Satellitenorbits

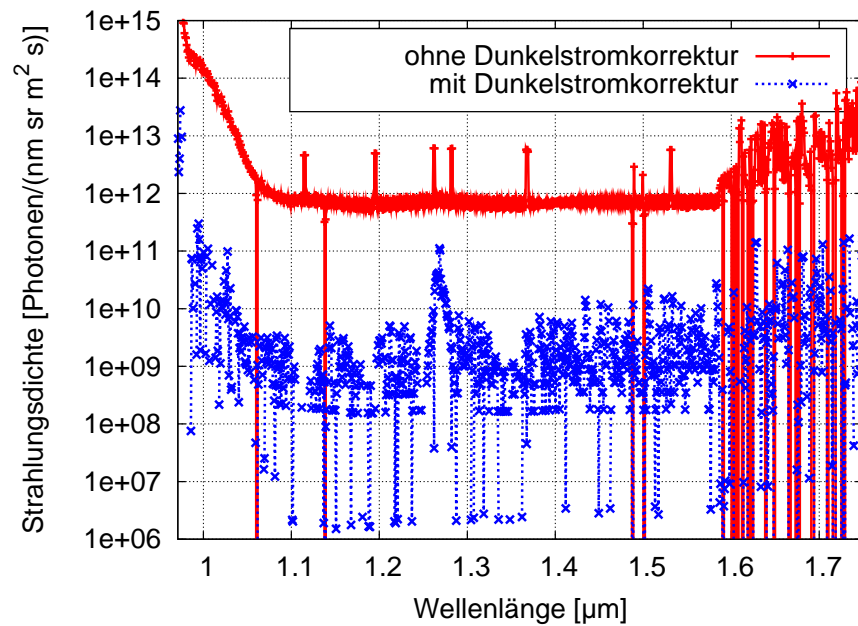
### 3.3.3 Datenprozessing und Instrumenteneffekte

Die SCIAMACHY Strahlungsdichten werden von der ESA (European Space Agency) als nahezu unkalibrierte L1B Daten bereitgestellt. Diese Daten enthalten zusätzlich zu den Messwerten Kalibrationsparameter, Orbit und rekonstruierte Lagedaten (Tangentenpunkte), allerdings noch keine Strahlungsdichten. Die Strahlungsdichten entstehen durch eine Kalibrierung der L1B Daten. Es ergeben sich die sogenannten kalibrierten L1C Daten. Für die Kalibrierung wird ein Softwarepaket der ESA genutzt, welches verschiedene Kalibrationsoptionen zur Verfügung stellt (Frerick (2006)). In dieser Studie wurden die Daten nur mit der Wellenlängenkalibration und der Strahlungsdichtekalibration behandelt, um radiometrische Werte auf einer Wellenlängenskala zu erhalten. Die übrigen Kalibrierungen haben im für diese Arbeit relevanten Wellenlängenbereich keinerlei Auswirkungen auf das Ergebnis.

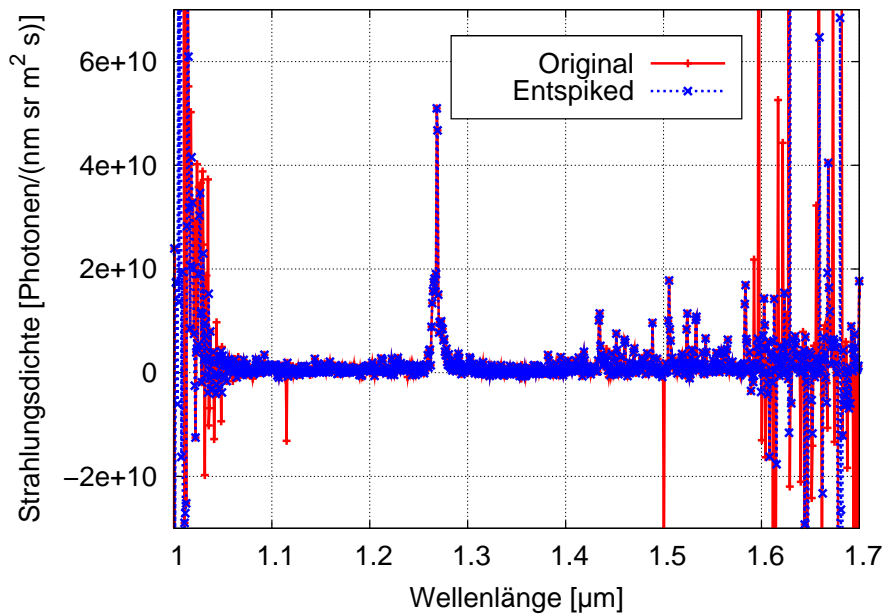
Lediglich eine Korrektur des Hintergrundes, d. h. eine Berücksichtigung des Dunkelstromes (engl.: dark current), ist noch nötig. Diese Korrektur wurde manuell durchgeführt. Dabei wurde von den einzelnen Spektren in den verschiedenen Höhen jeweils das Spektrum bei 150 km abgezogen. Abbildung 3.6 zeigt ein Spektrum vor (rote Kurve) und nach (blaue Kurve) der Korrektur. Auffällig ist, dass die gemessenen Werte fast um einen Faktor 1000 gesenkt werden, d. h. in diesem Wellenlängenbereich existiert ein großer Dunkelstrom bei SCIAMACHY. Ein weiteres Problem bei den Originalmessdaten stellen sogenannte Spikes aufgrund von hochenergetischen Partikeln dar, die auf den Detektor treffen. Diese sollten vor der Auswertung der Messdaten möglichst vollständig entfernt werden, um keine falschen Rückschlüsse zuzulassen. Die hier angewendete Methode basiert auf der Berechnung eines globalen Strahlungsmittelwertes für den gesamten Kanal als Referenzspektrum. In jedem aufgenommenen Spektrum werden die Messpunkte, die mehr als 5 Standardabweichungen abweichen eliminiert. Abbildung 3.7 zeigt ein Spektrum vor (rote Kurve) und nach (blaue Kurve) der Anwendung dieser Methode. Der Vergleich der beiden Spektren zeigt, dass die wesent-



lichen Spikes gefunden werden. Nur am Ende des Spektrums bleiben einzelne Spikes übrig. In diesem Bereich stoßen allerdings alle Methoden an ihre Grenzen, da dort das Spektrum stark rauscht. Im Rest des Spektrums, d.h. in dem für die Auswertung relevanten, werden Ausreißer dagegen zuverlässig identifiziert und entfernt.



**Abbildung 3.6:** Einfluss der Korrektur des Dunkelstromes, in rot ist das Spektrum vor der Korrektur gezeigt und in blau nach erfolgter Korrektur



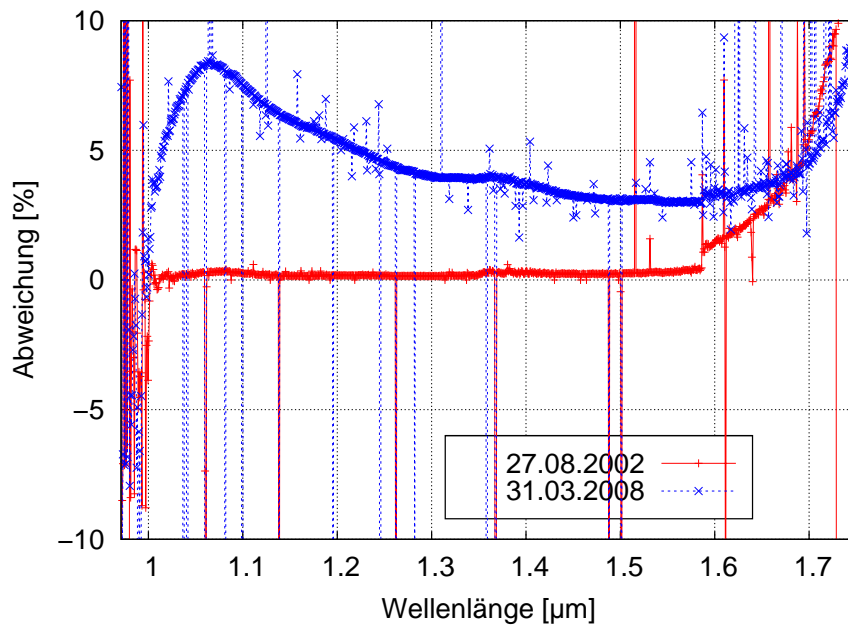
**Abbildung 3.7:** Einfluss des Entspikens auf das Spektrum, die rote Kurve zeigt das originale Spektrum, die blaue das Spektrum nach Entfernung der Ausreißer

Um die radiometrische Degradierung des SCIAMACHY Instrumentes, d.h. eine Verschlechterung des Detektors, kompensieren zu können, werden bei der Datenprozessierung von Level 0 nach Level 1 sogenannte M-Faktoren (Monitoring Factor) berücksichtigt (Noël et al. (2007)). Mit M-Faktor wird das Verhältnis zwischen einem Spektrum einer konstanten Lichtquelle zu einem bestimmten Zeitpunkt mit einem Spektrum durch die Atmosphäre zu einem Referenzzeitpunkt bezeichnet. Im infraroten Wellenlängenbereich wird als konstante Lichtquelle typischerweise die Sonne gewählt, da dort die Strahlung als konstant angesehen werden kann. Im ultravioletten Spektralbereich ist diese Bedingung nicht erfüllt, so dass eine andere konstante Lichtquelle gewählt werden müsste. M-Faktoren sind hier eine Korrektur der Degradierung für jeden individuellen Lichtpfad. M-Faktoren haben einen Einfluss auf die Korrektur der Polarisation und die absolute radiometrische Kalibration. Bei den Detektoren sind die M-Faktoren multiplikative Faktoren zur absoluten radiometrischen Kalibration (Bramstedt (2008)).

In Abbildung 3.8 ist der Einfluss der M-Faktoren und damit die Degradierung von SCIAMACHY im von uns verwendeten Kanal 6 dargestellt. Aufgetragen ist die relative Differenz zwischen einem Spektrum mit Berücksichtigung der M-Faktoren und einem ohne Berücksichtigung. Dabei wurde die Differenz einmal für den Anfang der Mission am 27.08.2002 (rote Kurve) und für einen Tag nach ungefähr 5,5 Jahren Messungen am 31.03.2008 (blaue Kurve) berechnet. Zu Beginn der Mission liegt die Differenz wie erwartet nahe Null. Lediglich im langwelligeren Bereich des Spektrums ergeben sich Abweichungen aufgrund eines anderen Detektormaterials (Kaiser et al. (2004)). Nach ca. 5,5 Jahren hat die Abweichung stark zugenommen und zeigt einen spektralen Verlauf über den gesamten Kanal. Die stärksten Abweichungen sind zwischen  $1\ \mu\text{m}$  und  $1,2\ \mu\text{m}$  ( $\leq 8\%$ ) und oberhalb von  $1,7\ \mu\text{m}$  zu finden. Diese Spektralbereiche sind allerdings für die Auswertung in dieser Arbeit nicht relevant. Im restlichen Kanal liegt die Differenz bei ungefähr  $4\%$ , d. h. das Instrument ist über die Jahre in diesem Kanal sehr stabil.

Für die Ableitung atmosphärischer Spurengase wird eine möglichst genaue Kenntnis der Tangentenhöhe während der Messung benötigt. Deshalb wird abschließend der Tangentenhöhenfehler betrachtet. Im Dezember 2003 gab es eine Korrektur des Envisat Orbitmodells und damit auch eine deutliche Reduzierung des Tangentenhöhenfehlers. Vor der Korrektur hatte die Tangentenhöhe einen konstanten Offset von  $2,5\ \text{km}$  und eine zusätzliche Schwingung mit einer Amplitude von  $800\ \text{m}$ . Nach der Korrektur des Orbitmodells reduziert sich der Offset auf  $1\ \text{km}$  und die Amplitude der saisonalen Schwingung auf  $220\ \text{m}$  (von Savigny et al. (2005)). Die Bestimmung des Tangentenhöhenfehlers erfolgt mit Hilfe der TRUE (Tangent height Retrieval by UV-B Exploitation) Methode (Kaiser et al. (2004)).

Um die Fehler aufgrund der Tangentenhöhe z.B. in Ozonprofilen kleiner  $5\%$  zu halten, muss die Tangentenhöhe auf  $250\ \text{m}$  genau bekannt sein (von Savigny et al. (2005)). Deshalb muss bei den älteren Datenversionen ( $< \text{Version } 6.03$ ) die no-



**Abbildung 3.8:** Dargestellt sind die Abweichungen eines Spektrums ohne Berücksichtigung der radiometrischen Degradierung zu einem mit Berücksichtigung für einen Zeitpunkt zu Beginn der Mission (rote Kurve) und einem im weiteren Verlauf der Mission (blaue Kurve), die Abweichungen entsprechen der radiometrischen Degradierung des Instrumentes in diesem Kanal

minale Tangentenhöhe um die oben angegebenen Werte korrigiert werden. Im August 2007 gab es eine neue Datenversion (Version 6.03) der SCIAMACHY L1B Daten, mit der auch die früheren Daten reprozessiert wurden. In dieser Version ist eine verbesserte Tangentenhöhe enthalten, so dass keine weiteren Korrekturen mehr benötigt werden.

### 3.4 Validierung der Strahlungsdaten mit SABER

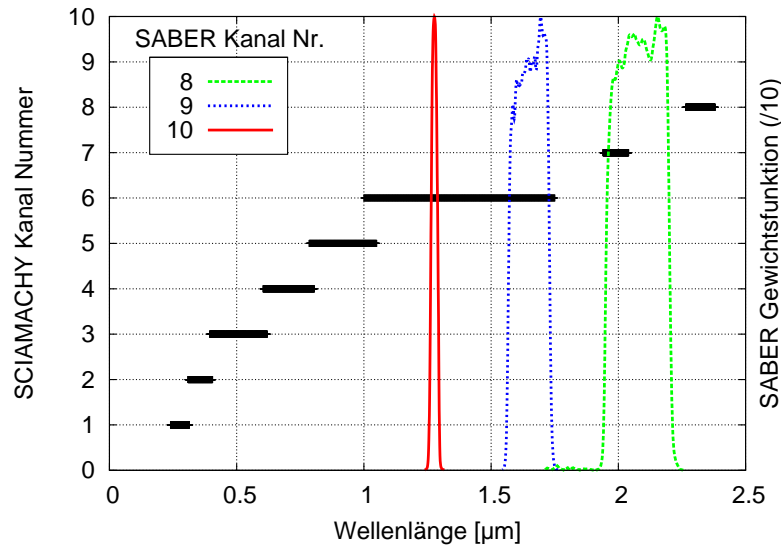
Um die auf die OH Emissionen von SCIAMACHY angewendeten Kalibrierungen und Korrekturen zu verifizieren, wurden integrierte Strahlungsdichten mit denen des SABER Instrumentes verglichen.

Bei SABER (Sounding of the Atmosphere using Broadband Emission Radiome-

try) handelt es sich um ein Radiometer mit 10 Kanälen, welches im Limbmodus im Infrarotbereich vom Erdboden bis in eine Höhe von 400 km misst (Mlynczak (1997), Russell III et al. (1999), Yee et al. (2003)). Das Experiment befindet sich auf dem TIMED (Thermosphere-Ionosphere-Mesosphere Energetics and Dynamics) Satelliten und wurde Ende 2001 in einen Orbit mit  $74^\circ$  Inklination bei einer Höhe von 625 km gebracht. Seine Aufgabe besteht darin, sowohl Messungen von Spurengasen als auch Messungen der Temperatur durchzuführen. Aufgrund der Orbit-Präzession des Instrumentes werden alle Lokalzeiten mit einer Periode von 60 Tagen abgedeckt. Zusätzlich ändert das Instrument alle 60 - 65 Tage seine Blickrichtung. Der überdeckte Breitenbereich erstreckt sich von  $50^\circ$  S -  $80^\circ$  N bzw. von  $80^\circ$  S -  $50^\circ$  N je nach Blickrichtung, wobei der Winterpol grundsätzlich nicht abgedeckt wird.

Die OH Emissionen in den Meinelbanden werden in zwei Spektralbereichen gemessen. Der erste (Kanal 8 von SABER) liegt bei  $2 \mu\text{m}$  und misst die Emission von vibrationsangeregten Zuständen, die nahe dem Dissoziationslimit liegen ( $v = 7, 8$  und  $9$ ). Der andere (Kanal 9 von SABER) befindet sich bei  $1.6 \mu\text{m}$  und misst die Emissionen der mittleren Vibrationszustände, hauptsächlich  $v = 4, 5$  und  $6$  (Mlynczak (1997)).

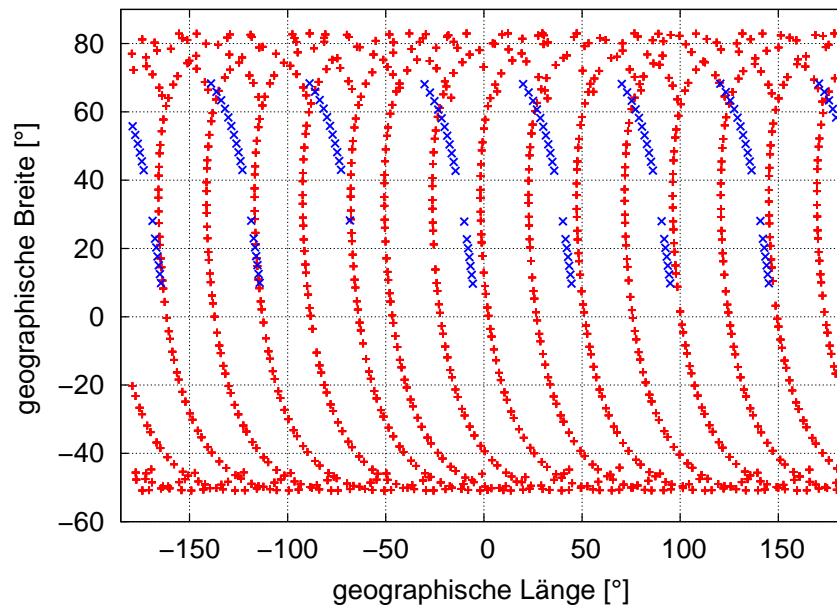
In Abbildung 3.9 sind die einzelnen SCIAMACHY Kanäle, als schwarze Balken, gegen die Wellenlänge dargestellt. Außerdem zeigen die farbigen Kurven die spektralen Filterfunktionen der Messkanäle von SABER, die in dem gleichen Wellenlängenbereich messen. Für den Vergleich der OH Emissionen der beiden Instrumente kann nur Kanal 9 von SABER und Kanal 6 von SCIAMACHY genutzt werden, da Kanal 8 von SABER einen größeren Bereich überdeckt als der entsprechende SCIAMACHY Messkanal. Die Strahlung wird bei SABER über einen Bereich integriert, der von SCIAMACHY nicht abgedeckt ist und daher auch nicht durch Faltung mit der Filterfunktion für den Vergleich simuliert werden kann. In Kanal 10 von SABER werden im wesentlichen keine OH Emissionen, sondern  $\text{O}_2$  Emissionen gemessen.



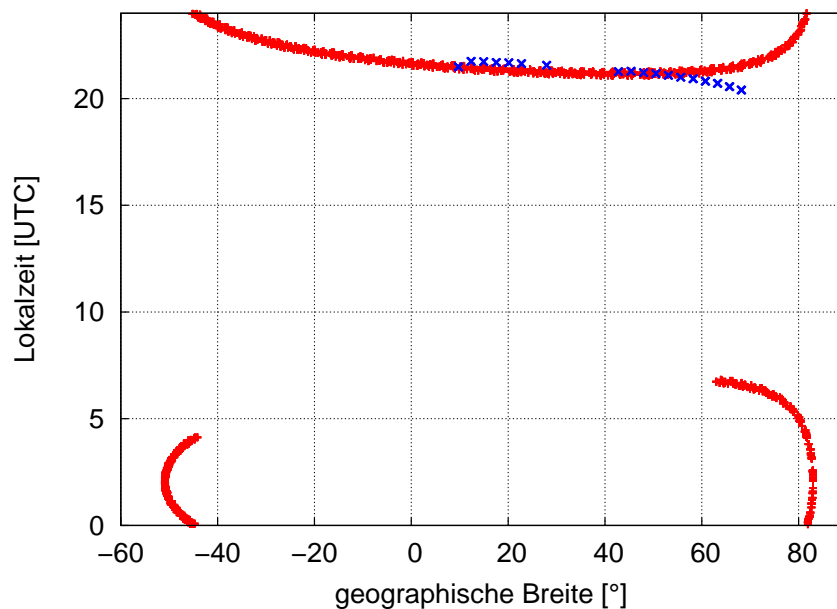
**Abbildung 3.9:** Dargestellt sind die spektralen Filterfunktionen von SABER als farbige Linien für die Kanäle 8, 9 und 10, sowie als schwarze Balken die Wellenlängenüberdeckung der einzelnen SCIAMACHY Kanäle

Der Vergleich der Strahlungsdichten der beiden Instrumente soll hier exemplarisch für einen Tag gezeigt werden. Gewählt wurde der 07.02.2003. Zuerst müssen die Geolokationen der beiden Instrumente miteinander verglichen werden, damit gewährleistet ist, dass zur gleichen Zeit dasselbe Atmosphärenvolumen gemessen wird. In Abbildung 3.10 ist ein Längen-Breiten Querschnitt der einzelnen Messpunkte dieses Tages dargestellt. Die blauen Symbole geben die Messorte der SCIAMACHY Beobachtungen an und die roten Punkte die von SABER. Bei einer Breite von 20° N und 60° N haben die Messorte eine maximale Abweichung in der geographischen Länge von 10°.

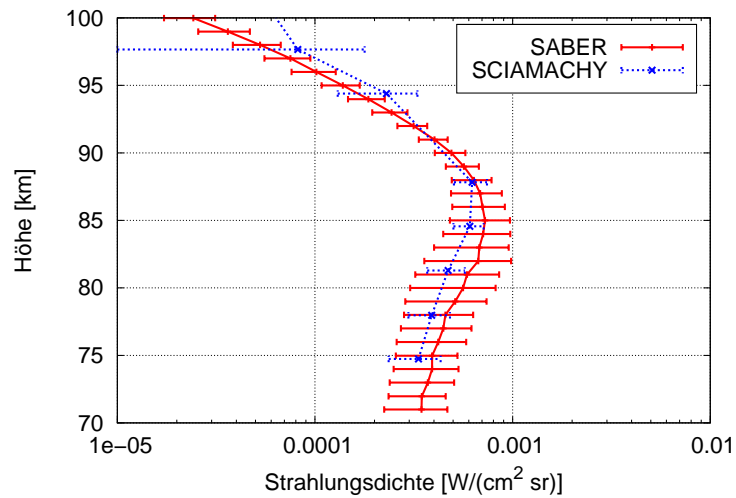
Die Abbildung 3.11 zeigt die Lokalzeit der Messungen in Abhängigkeit von der Breite, wieder SABER in rot und SCIAMACHY in blau. Die Messungen von SABER und SCIAMACHY liegen bei den Breiten 20° N und 60° N auch zeitlich nah beieinander. Die maximale Abweichung beträgt 1 Stunde in der Lokalzeit. Damit kann für diese Messpunkte ein Vergleich der Strahlungsdichten vorgenommen werden.



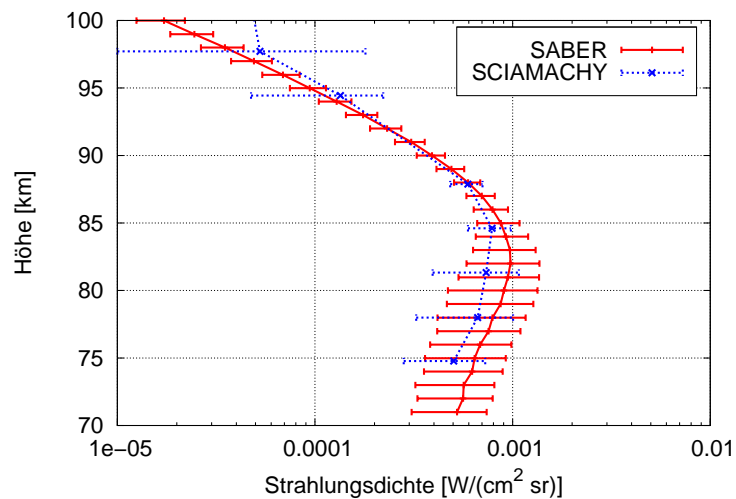
**Abbildung 3.10:** Längen-Breiten Verteilung der SCIAMACHY (blau) und SABER (rot) Messpunkte für den 07.02.2003



**Abbildung 3.11:** Breiten-Lokalzeit Verteilung der SCIAMACHY (blau) und SABER (rot) Messpunkte für den 07.02.2003



**Abbildung 3.12:** Dargestellt ist der Vergleich eines mittleren Strahlungsprofils von SCIAMACHY (blaue Kurve) mit einem mittleren Strahlungsprofil von SABER (rote Kurve) bei  $20^\circ \text{ N}$ , jeweils inklusive Standardabweichung



**Abbildung 3.13:** Dargestellt ist der Vergleich eines mittleren Strahlungsprofils von SCIAMACHY (blaue Kurve) mit einem mittleren Strahlungsprofil von SABER (rote Kurve) bei  $60^\circ \text{ N}$ , jeweils inklusive Standardabweichung



In Abbildung 3.12 sind die Strahlungsprofile von SCIAMACHY (blau) und SABER (rot), inklusive ihrer Standardabweichung, bei  $20^\circ$  N dargestellt. Die Strahlungsdichte von SCIAMACHY liegt über den gesamten Höhenbereich innerhalb der Standardabweichung von SABER. Lediglich in der obersten Höhe gibt es kleinere Abweichungen. Das gleiche Verhalten kann auch in Abbildung 3.13, für eine Breite von  $60^\circ$  N, beobachtet werden. Insgesamt stimmen die Messungen von SCIAMACHY innerhalb der Standardabweichung mit denen von SABER überein.



# Kapitel 4

## Das Vorwärtsmodell

Für die Auswertung von Fernerkundungsmessungen wird ein Vorwärtsmodell benötigt. Mit dem Vorwärtsmodell werden die Messungen eines Instrumentes für einen gegebenen Atmosphärenzustand simuliert. Dabei erfolgt zum einen die Berechnung des Strahlungstransports innerhalb der Atmosphäre und zum anderen eine Nachbildung des physikalischen Messvorgangs des Instrumentes. Bei der Berechnung des Strahlungstransports müssen die verschiedenen Prozesse, die beim Übergang zwischen den verschiedenen angeregten Zuständen des OH Moleküls auftreten berücksichtigt werden. In diesem Kapitel werden deshalb zuerst die Eigenschaften des OH Moleküls beschrieben und anschließend auf die Modellierung eingegangen.

### 4.1 Das OH-Molekül

In Molekülen treten durch die Bewegungen der Elektronen und der Kerne elektromagnetische Momente auf, die in verschiedener Weise wechselwirken. Die Rotation der Kerne bewirkt in zweiatomigen Molekülen einen Drehimpuls  $N$ . Durch den Bahndrehimpuls der einzelnen Elektronen ergibt sich der Gesamtbahndrehimpuls  $L$  und die Spins der Elektronen koppeln zum Gesamtspin  $S$ . Für die Physik des Moleküls sind die Komponenten des Gesamtspins und des Ge-

sambahndrehimpulses entlang der die Kerne verbindenden molekularen Vorzugsachse wichtig. Diese werden mit  $\Sigma$  und  $\Lambda$  bezeichnet. Die Form der magnetischen Kopplung der Drehimpulse  $N$ ,  $\Sigma$  und  $\Lambda$  untereinander ist von den speziellen Eigenschaften der Moleküle abhängig. Es werden mehrere typische Kopplungsfälle unterschieden, die als Hundsche Kopplungsfälle bekannt sind. Die wichtigsten Fälle sind die Hundschen Fälle a und b (Herzberg (1974)).

Im Fall a koppeln die elektronischen Drehimpulse zunächst zum totalen elektronischen Drehimpuls

$$\Omega = \Lambda + \Sigma \quad (4.1)$$

und dieser mit  $N$  zum totalen Drehimpuls des Moleküls

$$J = \Omega + N \quad (4.2)$$

$J$  kann die Werte  $\Omega$ ,  $\Omega + 1, \dots$  annehmen. Aufgrund der  $2S+1$  möglichen Werte für  $\Sigma$  treten für feste  $\Lambda$  ( $2S+1$ )  $\Omega$ -Werte auf. Der Grundzustand des OH ist ein  ${}^2\Pi_{\Omega}$ -Zustand mit  $\Lambda=1$  und  $\Sigma = \pm 1/2$  (Herzberg (1974)).  $\Omega$  nimmt aufgrund der beiden Einstellungen des Spins die beiden Werte  $3/2$  und  $1/2$  an. Damit gibt es zwei durch den Spin unterschiedene und als Spindoublets bezeichnete Zustände  ${}^2\Pi_{3/2}$  und  ${}^2\Pi_{1/2}$  mit zwei Sätzen Rotationsniveaus verschiedener Energie.

Beim Hundschen Kopplungsfall b koppelt nur der Bahndrehimpuls  $L$  an die Kernverbindungsachse.  $\Sigma$  ist wegen der schwachen Ankopplung nicht definiert. Daher wechselwirken zunächst  $\Lambda$  und  $N$  zum totalen Drehimpuls ohne Spin

$$K = N + \Lambda \quad (4.3)$$

$K$  nimmt die Werte  $\Lambda$ ,  $\Lambda + 1, \dots$  an. Der totale Drehimpuls mit Spin ist im Fall b

$$J = K + S \quad (4.4)$$

Obwohl die Quantenzahl  $K$  im Hundschen Fall a physikalisch nicht sinnvoll ist, lässt sie sich hierfür formal definieren:

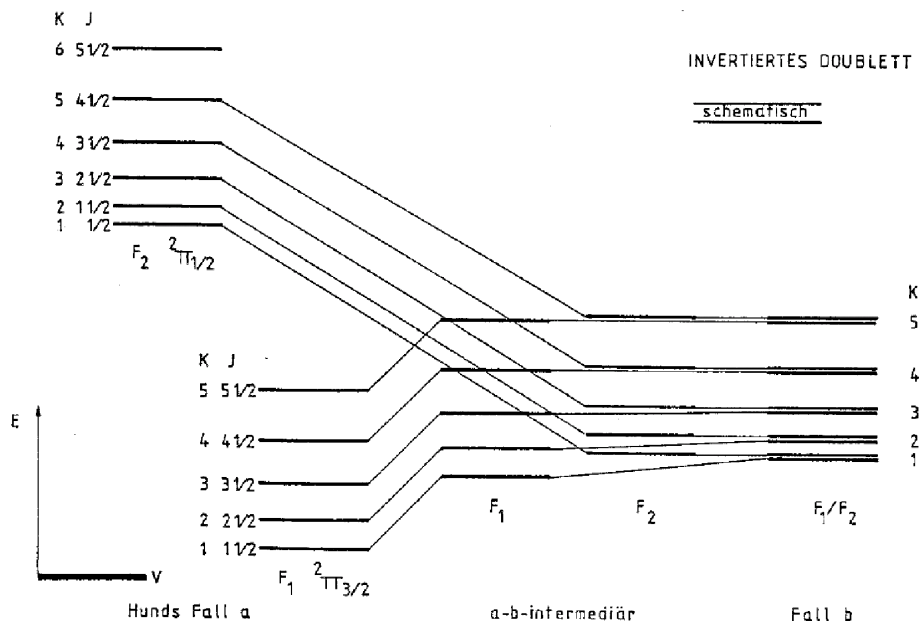
$$J = K + \Sigma \quad (\text{Fall a}) \quad (4.5)$$

Die Praktikabilität dieser Definition zeigt sich bei der Beschreibung des OH\*-Moleküls.

Wegen der beiden möglichen Ausrichtungen der Komponente  $\Lambda$  des Bahndrehimpulses  $L$  ist der damit verbundene Energiezustand zweifach entartet. Wird bei den beiden Kopplungsfällen noch die Wechselwirkung des Gesamtbahndrehimpulses  $L$  mit dem Drehimpuls  $N$ , die mit zunehmender Rotationsenergie (große  $J$ ) an Bedeutung gewinnt, berücksichtigt, kommt es zur Aufhebung der Entartung und zu einer Aufspaltung der  $J$ -Niveaus in jeweils zwei Komponenten. Dieser Effekt ist als  $\Lambda$ -Verdopplung bekannt. Die  $\Lambda$ -Verdopplung beträgt beim OH weniger als  $1 \text{ cm}^{-1}$  (Gerndt (1986)).

OH( $X \ ^2\Pi_{\Omega}$ ) kann nur für niedrige Rotationsniveaus durch den Kopplungsfall a beschrieben werden. Die Kopplung des Drehimpulses beim OH erfolgt in einer Weise, die einen Zwischenfall der Hundschen Kopplungsfälle a und b darstellt. Bei diesem intermediären Kopplungsfall entkoppelt der elektronische Spin mit zunehmendem Drehimpuls  $N$  von der Kernverbindungsachse. Bei hohen Rotationsniveaus ist der Hundsche Fall b die beste Beschreibung des Molekülzustandes. Dies ist schematisch in Abbildung 4.1 dargestellt. Dort sind die Termschemata zweier Spindoubletts für die Hundschen Kopplungsfälle a, a-b-intermediär und b nebeneinander gestellt.  $F_1$  und  $F_2$  sind die Energien der Zustände der beiden Doubletts. Bei der intermediären Kopplung liegen die Energieniveaus der beiden Doubletts bei gleicher  $K$ -Quantenzahl enger beieinander als im Fall der Hundschen Kopplung a. Jedoch ist die Energiedifferenz der  $K$ -Niveaus erst bei hohen Rotationsniveaus ähnlich gering wie beim Hundschen Fall b. Im Falle des OH-Moleküls muss für alle Rotationsniveaus die intermediäre Kopplung der Drehimpulse berücksichtigt werden.

Das OH\*-Molekül besitzt ein invertiertes Doublett-System. Die invertierten Doubletts  $^2\Pi_{1/2}$  haben höhere Rotationsenergien bei gleichem  $K$  als die invertierten  $^2\Pi_{3/2}$ . Die  $^2\Pi_{3/2}$ -Rotationsenergien werden durch  $F_1(J)$  beschrieben ( $J = K + 1/2$ ). Nur für Werte von  $J$  zwischen Null und vier liegen auch bei invertierten



**Abbildung 4.1:** Übergang vom Hundschen Kopplungsfall a zum Fall b für ein invertiertes Doublett-System (Gerndt (1986))

$^2\Pi_{1/2}$ -Doubletts die Energien niedriger als bei  $^2\Pi_{3/2}$ .

Die Rotationsniveaus sind jeweils den verschiedenen Vibrationsniveaus überlagert. Die Terme  $F_i(J)$  geben die Rotationsenergien relativ zur Lage des vom Molekül eingenommenen Vibrationsniveaus an. Im Gesamtbild ergeben sich dann die Rotations-Schwingungs-Zustände eines Moleküls (Abbildung 4.1 und 4.2).

Durch spontane oder angeregte Strahlungsübergänge geht das Molekül in einen Rotations-Vibrations-Zustand anderer Energie über. Strahlungsübergänge müssen bestimmten Regeln gehorchen. Die Rotationsquantenzahl  $J$  darf sich nur um  $+1$  und  $-1$  oder gar nicht ändern. Der Spin darf sich nicht ändern, so dass der Doublett-Zustand des Moleküls beim Übergang unverändert bleibt. In dem bei den Rotations-Schwingungs-Übergängen emittierten Linienspektrum der Moleküle werden die Linien nach der erfolgten Änderung von  $J$  klassifiziert:

$$P - \text{Linien} : J_{\text{oben}} - J_{\text{unten}} = J' - J'' = -1 \quad (4.6)$$

$$Q - \text{Linien} : J' - J'' = 0 \quad (4.7)$$

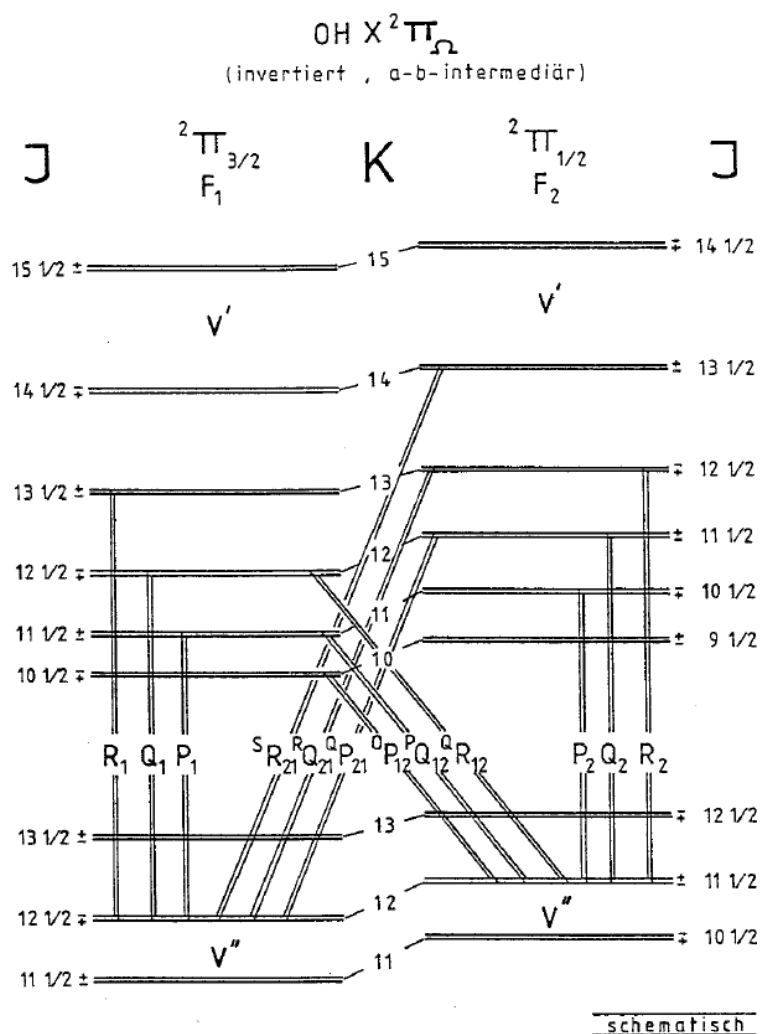


Abbildung 4.2: Rotations-Schwingungs-Übergänge des  $\text{OH}(X^2\Pi_{\Omega})$  (Gerndt (1986))

$$R - \text{Linien:} \quad J' - J'' = +1 \quad (4.8)$$

Die Quantenzahlen des energetisch höheren Ausgangszustandes sind mit einem Strich gekennzeichnet. Zur Unterscheidung der Spin-Doublets erhalten die P, Q und R bei  $^2\Pi_{3/2}$  den Index 1 und bei  $^2\Pi_{1/2}$  den Index 2. Da die Rotationsniveaus nicht äquidistant sind, können die P-, Q- und R-Linien, die von verschiedenen  $J'$  ausgehen, weiter durch  $K'' = J'' - 1/2$  bei  $^2\Pi_{3/2}$  und durch  $K'' = J'' + 1/2$  bei  $^2\Pi_{1/2}$  unterschieden werden. Die Gesamtheit der P-, Q- und R-Linien, die bei einem Übergang von bestimmten  $v'$  zu  $v''$  auftreten, werden Bande genannt. Beim OH

sind die Banden mit  $v'-v'' = 2$  die intensivsten.

Die Anregung von OH erfolgt durch die Reaktion von atomarem Wasserstoff mit Ozon. Dabei werden die Vibrationszustände bis  $v = 9$  angeregt.

Das angeregte Molekül gibt beim sukzessiven Übergang von hohen energetischen Niveaus zu einem energetisch günstigeren Zustand Energie in Form von elektromagnetischer Strahlung ab. So emittieren angeregte OH-Moleküle im sichtbaren und infraroten Wellenlängenbereich, wobei der Bereich im elektromagnetischen Spektrum von den jeweiligen Übergängen abhängt. In Abbildung 4.3 sind die Übergänge der  $\text{OH}^*(7,4)$ -,  $\text{OH}^*(8,5)$ -,  $\text{OH}^*(2,0)$ -,  $\text{OH}^*(3,1)$ -,  $\text{OH}^*(4,2)$ - und  $\text{OH}^*(5,3)$ -Vibrations-Rotationsbanden dargestellt im Wellenlängenbereich von  $1,2 \mu\text{m}$  bis  $1,7 \mu\text{m}$ . Die Position jeder Emissionslinie im Spektrum ist bekannt.

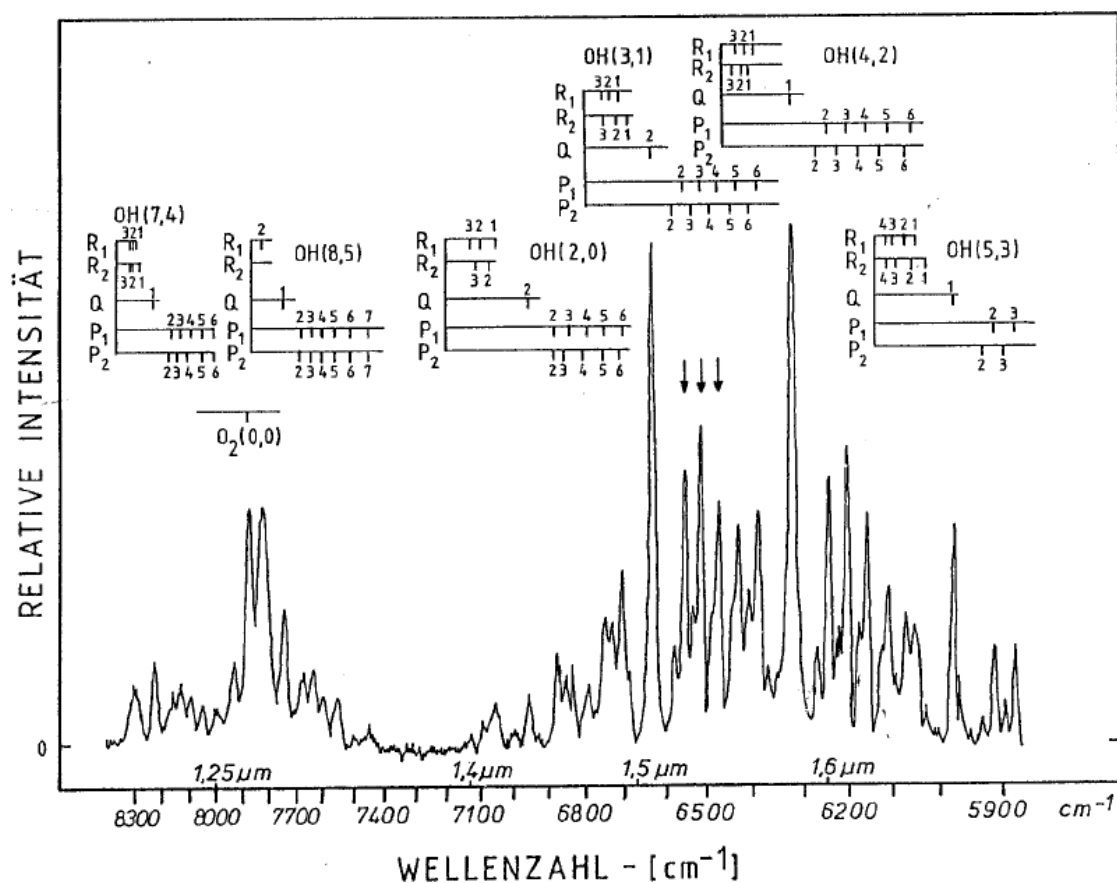


Abbildung 4.3: Airglow-Spektrum im Bereich von  $1,2 \mu\text{m}$  bis  $1,7 \mu\text{m}$  (Gerndt (1986))



## 4.2 Die Modellierung von OH Strahlungsemissionen

Mit Hilfe der Strahlungstransportgleichung können aus den gemessenen Strahlungsdichten die Zahl der angeregten Moleküle bzw. das Besetzungszahl-Verhältnis der beteiligten Niveaus bestimmt werden. In atmosphärischen Anwendungen interessiert allerdings eher die Gesamtzahl oder die Zahl der Moleküle im Grundzustand.

Im lokalen thermodynamischen Gleichgewicht (engl. local thermodynamic equilibrium, LTE) folgt die Anregung eines Moleküls der Boltzmann-Verteilung und kann für alle Zustände durch die kinetische Temperatur beschrieben werden. Dabei muss vorausgesetzt werden, dass die Stoßfrequenz der Moleküle einige Größenordnungen höher ist als alle anderen Anregungsmechanismen.

In der Mesosphäre und unteren Thermosphäre ist die Stoßfrequenz der Vibrationszustände häufig zu klein, um alle anderen Anregungsprozesse zu kompensieren (Pendleton et al. (1993)). Die Anregung kann dann nicht mehr einheitlich durch die kinetische Temperatur beschrieben werden, sondern jedes Niveau und jeder Anregungszustand besitzt seine eigene Vibrationstemperatur. Man spricht dann von nicht lokalem thermodynamischen Gleichgewicht oder kurz non-LTE. Für die Rotationszustände können LTE Bedingungen verwendet werden.

Die Modellierung der OH Emissionen erfolgt mit einem kinetischen Modell, welches die verschiedenen Produktions- und Verlustmechanismen der einzelnen Vibrationszustände berücksichtigt. Unter der Annahme von statistischem Gleichgewicht ergeben sich eine Reihe von Termen zur Berechnung der Dichte der OH Vibrationszustände.

$$[\text{OH}(\nu)] = \frac{\overbrace{f_{\nu} P_C + \sum_{\nu'} A_{\nu',\nu} [\text{OH}(\nu')] + \sum_{\nu'} k_{\nu',\nu} [\text{M}] [\text{OH}(\nu')]}^{\text{Produktion}}}{\underbrace{\sum_{\nu'} A_{\nu',\nu} + \sum_{\nu'} k_{\nu',\nu} [\text{M}] + k'_c [\text{O}]}_{\text{Verlust}}} \quad (4.9)$$

$$P_C = k_{\text{O}_3\text{H}} [\text{O}_3] [\text{H}] \quad (4.10)$$

$P_C$  ist die Produktionsrate für vibrationsangeregtes OH, unter Berücksichtigung der Reaktionsrate  $k_{O_3H}$  für die Reaktion  $O_3 + H$  und  $f_\nu$  der Anteil der Produktion von Zustand  $\nu$ . Die anderen beiden Terme im Zähler sind indirekte Quellen für  $OH(\nu)$ . Einmal durch spontane Emission, wobei  $A_{\nu',\nu}$  der Einsteinkoeffizient ist (siehe Kapitel 4.2.1) und zum anderen durch Kollisionsprozesse ( $k_{\nu',\nu}$  ist die Reaktionsratenkonstante) von Vibrationszuständen mit höherer Vibrationsenergie. Im Nenner sind die Senken für  $OH(\nu)$  dargestellt. Dabei handelt es sich um strahlungsbedingten Verlust durch spontane Emission, Verlust infolge von Kollisionsprozessen verschiedener Vibrationszustände und um chemischen Verlust infolge der Reaktion mit atomarem Sauerstoff. Die Dichte der beteiligten Spezies ist durch eckige Klammern gekennzeichnet.  $[M]$  bezeichnet die totale Dichte.

Dem Modell liegt eine Eingangsverteilung zu Grunde, die die statistische Verteilung der Energie beschreibt. Für die Eingangsverteilung werden die Verhältnisse 0,40; 0,29; 0,21; 0,10 für  $\nu = 9, 8, 7, 6$  benutzt (Mlynczak und Solomon (1993)). Niedrigere Vibrationslevel sind anfangs nicht bevölkert.

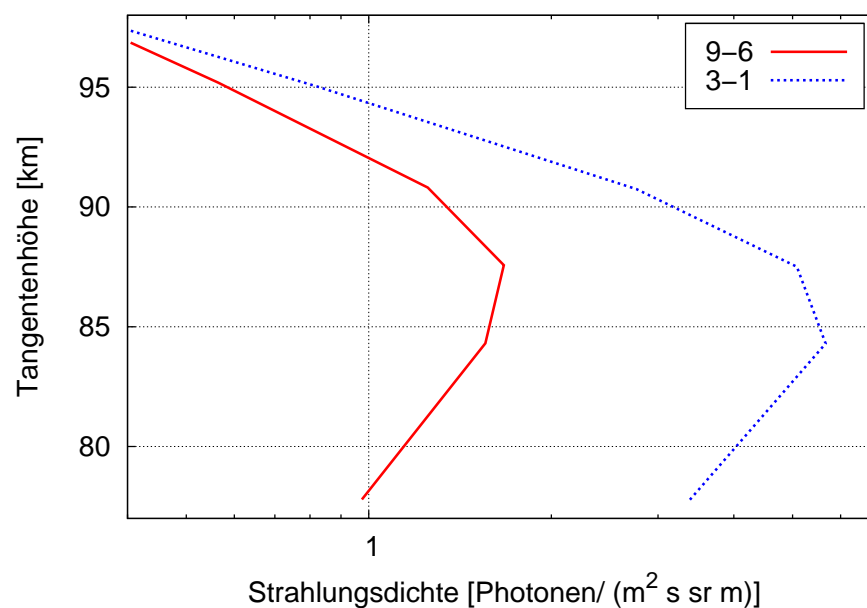
Des weiteren müssen die Lebenszeiten aller Strahlungsübergänge und die Stoßraten mit den verschiedenen Kollisionspartnern ( $N_2$ ,  $O_2$  und  $O$ ) bekannt sein. Außerdem wird die Reaktion von vibrationsangeregtem OH mit atomarem Sauerstoff berücksichtigt.

Für den chemischen Verlust von  $OH(\nu)$  durch die Reaktion mit  $O_2$  wird analog zu Adler-Golden (1997) und Copeland (2002) eine Ratenkonstante von  $2 \cdot 10^{-10} \text{cm}^3 \text{s}^{-1}$  für alle Vibrationszustände angenommen.

Die Spin-Temperatur kann hier durch die kinetische Temperatur beschrieben werden. Die weiteren Parameter, wie Einsteinkoeffizienten und Kollisionsmodell werden in den folgenden Unterkapiteln näher erläutert.

In Abbildung 4.4 sind die Höhenprofile der OH Emissionen für zwei verschiedene Wellenlängenbereiche dargestellt. Für die OH(3-1) Bande, zwischen 1515 nm und 1545 nm, ist ein Maximum bei 85 km sichtbar. Für die OH(9-6) Bande, zwischen 1375 und 1400 nm, verschiebt es sich zu größeren Höhen und liegt bei

ungefähr 88 km. Diese Verschiebung resultiert aus dem Gleichgewicht zwischen der chemischen Energieabgabe und der Kollisionsfrequenz. Die chemische Energieabgabe erfolgt hauptsächlich bei hoch angeregten Vibrationszuständen und in größeren Höhen. Die Kollisionsfrequenz transportiert diese freigesetzte Energie dann zu niedriger angeregten Vibrationszuständen. Sie nimmt in Richtung niedrigerer Höhen zu.



**Abbildung 4.4:** Mittleres Höhenprofil der OH Emissionen aus SCIAMACHY für mittlere Breiten im November 2005 für verschiedene Wellenlängenbereiche und Vibrationsbanden von OH, OH(3-1): 1515 - 1545 nm, OH(9-6): 1375 - 1400 nm

### 4.2.1 Einstein Koeffizienten

Der Übergang eines Moleküls von einem höheren in ein niedrigeres Energieniveau kann spontan, d.h. ohne äußeres Feld, durch spontane Lichtemission erfolgen. Das dabei freigesetzte Photon kann in beliebiger Richtung emittiert werden. Die Wahrscheinlichkeit pro Zeiteinheit für die spontane Emission ist unabhängig von einem äußeren Strahlungsfeld und wird als Einsteinkoeffizient der sponta-

nen Emission bezeichnet. Er hängt nur von den Wellenfunktionen der am Übergang beteiligten Zustände ab. Da solche Vorgänge zufällig auftreten, gibt es nur eine Aussage darüber, wie viele Moleküle im Mittel den Energieübergang vollziehen, aber nicht welche im Detail daran beteiligt sind. D.h. der Einsteinkoeffizient beschreibt die mittlere Verweildauer bzw. die mittlere Strahlungslebensdauer der Moleküle im angeregten Zustand. Er bestimmt damit die natürliche Linienbreite der mit dem Energieübergang verbundenen Strahlung. Die mittlere Strahlungslebensdauer und damit der Einsteinkoeffizient können experimentell bestimmt werden. Die Einsteinkoeffizienten für diese Studie wurden der HITRAN (high-resolution transmission) 2004 Datenbank (Rothman et al. (2005)) entnommen und basieren auf den Berechnungen von Goldman et al. (1998). In Abbildung 4.5 sind die Einsteinkoeffizienten gegen die Wellenzahl exemplarisch für den Übergang  $\Delta v = 2$  dargestellt.

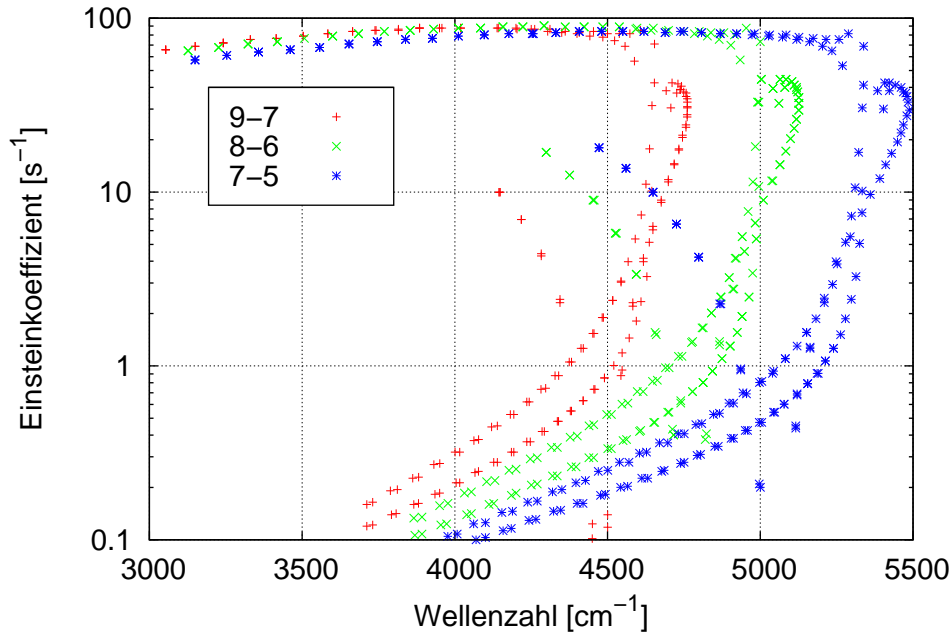


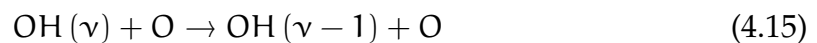
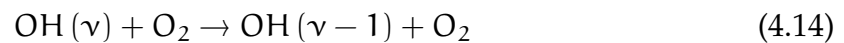
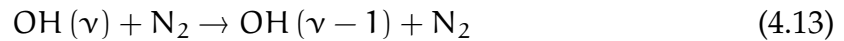
Abbildung 4.5: Darstellung der Einsteinkoeffizienten für den Übergang  $\Delta v = 2$

### 4.2.2 Berücksichtigung von verschiedenen Kollisionsrelaxationsmodellen

Bei der Modellierung der OH Emissionen werden zwei chemische Reaktionen



berücksichtigt. Außerdem müssen noch die Kollisionsprozesse der verschiedenen Zustände berücksichtigt werden. Dabei handelt es sich um folgende Reaktionen:



Für die Modellierung der Kollisionsprozesse stehen verschiedene Kollisionsrelaxationsmodelle zur Verfügung (McDade und Llewellyn (1987), Adler-Golden (1997)). Dabei gibt es einmal die Möglichkeit des "sudden-death" Modells, d.h. alle angeregten Zustände  $\text{OH}(\nu)$  werden durch eine Kollision in den Grundzustand  $\text{OH}(\nu=0)$  gebracht, und als entgegengesetztes Extrem das "step ladder single quantum" Modell, d.h. jeder angeregte Vibrationszustand  $\text{OH}(\nu)$  geht in den Vibrationszustand  $\text{OH}(\nu-1)$  über. Einen Mittelweg stellt das Kaskaden Modell von Adler-Golden (1997) dar.

$\text{O}_2$  ist ein effizienter Stoßparameter für OH, so dass er durch Übergänge mehrerer Quantenzahlen simuliert werden kann. Die Relaxationsratenkonstanten von  $\text{OH}(\nu)$  durch  $\text{O}_2$  werden dabei durch

$$k(\nu', \nu'') = C P_{\nu'} \exp(\nu' - \nu'') \quad (4.16)$$

berechnet.  $C$  ist eine Konstante für das Gesamtsystem (hier:  $C = 4,4 \cdot 10^{-12} \text{ cm}^3$  (Moleküle s) $^{-1}$ ) und  $P_{\nu'}$  ein Wahrscheinlichkeitsfaktor für die Übergänge als Funktion von  $\nu'$ . Damit ergibt sich folgende Ratenkonstantenmatrix:

	$v''$									
	0	1	2	3	4	5	6	7	8	
$v'$ 1	2									
2	0	4								
3	0	1	7							
4	0	1	2	10						
5	0	1	2	6	16					
6	1	1	3	6	11	22				
7	4	6	9	12	16	23	32			
8	4	6	8	10	14	19	25	33		
9	28	29	31	32	34	36	38	40	42	

**Tabelle 4.1:** Ratenkonstantenmatrix nach Adler-Golden (1997)

Die Einheiten betragen  $10^{-13} \text{ cm}^3 (\text{Moleküle s})^{-1}$ .

Bei  $\text{N}_2$  handelt es sich um einen sehr ineffektiven Stoßpartner. Deshalb wird dieser durch Übergänge einzelner Quantenzahlen simuliert. Die Ratenkonstanten sind in diesem Fall: 0,58; 1,0; 1,7; 3,0; 5,2; 9,1; 16; 27; 48; 60 für  $v' = 1 - 9$ . Die Einheiten lauten diesmal  $10^{-14} \text{ cm}^3 (\text{Moleküle s})^{-1}$ .

### 4.2.3 Spektralbereich für das Retrieval

Aus den Strahlungsdichtemessungen kann direkt die durch die Reaktion  $\text{H} + \text{O}_3$  freigesetzte Wärme abgeleitet werden, wenn die Teilchendichte eines Vibrationszustandes bekannt ist. Für die Ableitung der Emissionen eignen sich die oberen Vibrationszustände besser, da ihre Anregung hauptsächlich von der chemischen Produktion abhängt und das Quenching Modell wenig Einfluss hat (Mlynczak (1999)).

Abgesehen von der Berechnung der Zustandssumme, ist die Population des Vibrationszustandes  $v = 9$  unabhängig von der Population der übrigen Vi-

brationszustände. Das Retrieval der Heizungsrate basiert für diesen Zustand hauptsächlich auf drei Non-LTE Effekten. Einmal auf der Anzahl der Moleküle, die durch die Reaktion  $H + O_3$  in  $OH(v = 9)$  produziert werden. Dieses Modell benutzt die Ratenkonstante (Sander et al. (2002))

$$1,4 \cdot 10^{-10} \cdot \exp(-470K/T) \text{ cm}^3\text{s}^{-1} \quad (4.17)$$

mit einem Verhältnis von 0,40 für die Produktion von OH im Vibrationszustand 9 (Charters et al. (1971)).

Der gesamte Strahlungsverlust dieses Zustandes ergibt sich mit:

$$A_9 = \sum_{v' < 9} A_{v',9} = 141 \text{ s}^{-1} \quad (4.18)$$

Dabei wurden die Einsteinkoeffizienten aus der HITRAN 2004 Datenbank (Rothman et al. (2005)) verwendet.

Der gesamte Verlust dieses Zustandes, d.h. die Summe aller Auslöschungsprozesse, ist:

$$k_9 = \sum_{v' < 9} k_{v',9} = 3,1 \cdot 10^{-11} \text{ cm}^3\text{s}^{-1} \quad (4.19)$$

Der Wert entspricht dem von Modell 1 von Adler-Golden (1997).

Für die Ableitung der Heizungsrate aus der Reaktion  $H + O_3$  wird aufgrund dieser Vereinfachungen der Spektralbereich des Vibrationszustandes  $v = 9$  gewählt. Konkret handelt es sich dabei um den Wellenlängenbereich zwischen 1380 und 1400 nm.

### 4.3 Strahlungstransport in Limb Beobachtungsgeometrie

Die von einem Instrument gemessene Strahlungsdichte ist gegeben durch das Produkt aus emittierter Strahlung und Instrumentenfunktion  $F(\nu)$  integriert über das Frequenzintervall  $\Delta\nu$ , das die spektrale Breite des Kanals angibt.

$$L(x_{\text{obs}}) = \int_{\Delta\nu} L_\nu(x_{\text{obs}}) F(\nu) d\nu \quad (4.20)$$

$L_\nu(x_{\text{obs}})$  ist die monochromatische Strahlungsdichte an einem gegebenen Beobachtungspunkt  $x_{\text{obs}}$ . Für den Fall der Limb Beobachtungsgeometrie berechnet sich die monochromatische Strahlungsdichte nach:

$$L_\nu(x_{\text{obs}}) = \int_{x_s}^{x_{\text{obs}}} J_\nu(x) \frac{d\tau(\nu)}{dx} dx \quad (4.21)$$

Die Größe  $x$  bezeichnet die Position entlang des Limbpfades. Die Integration erfolgt vom weitest entfernten Punkt der Atmosphäre  $x_s$  über den Tangentenpunkt  $z$  bis zur Position des Beobachters  $x_{\text{obs}}$ . In der oberen Atmosphäre sind viele Linien optisch dünn, so dass hier non-LTE Prozesse wichtig werden. Deshalb wird der einzelne Beitrag einer spektralen Linie zur Limb Strahlungsdichte bestimmt. Die Ergebnisse können auf komplette Vibrationsbanden ausgebaut werden, indem jede Linie einzeln betrachtet wird. Die monochromatische Transmissivität kann dann folgendermaßen angegeben werden.

$$\tau_\nu(x, x_{\text{obs}}) = 1 - \int_x^{x_{\text{obs}}} k(x') n(x') dx' \quad (4.22)$$

und damit

$$\frac{d\tau_\nu(x)}{dx} = k_\nu(x) n(x) \quad (4.23)$$

Die Größe  $k$  ist der molekulare Emissionskoeffizient und  $n$  die Anzahldichte der emittierenden Moleküle. Damit ergibt sich für die monochromatische Strahlungsdichte

$$L_\nu(x_{\text{obs}}) = \int_{x_s}^{x_{\text{obs}}} J_\nu(x) k_\nu(x) n(x) dx \quad (4.24)$$

Die Quellfunktion  $J_\nu(x)$  wird durch die Beziehung der Quellfunktion im non-LTE und der Planckfunktion (Quellfunktion unter LTE Bedingungen) ersetzt.

$$J_\nu = B_\nu \frac{n_2 \bar{k}_\nu}{\bar{n}_2 k_\nu} \quad (4.25)$$

Somit ergibt sich die Strahlungsdichte

$$L_\nu(x_{\text{obs}}) = \int_{x_s}^{x_{\text{obs}}} B_\nu(x) \exp\left[-\frac{E_2}{k} \left(\frac{1}{T_2} - \frac{1}{T}\right)\right] \frac{\bar{Q}_{\text{vib}}}{Q_{\text{vib}}} \bar{k}_\nu(x) n(x) dx \quad (4.26)$$



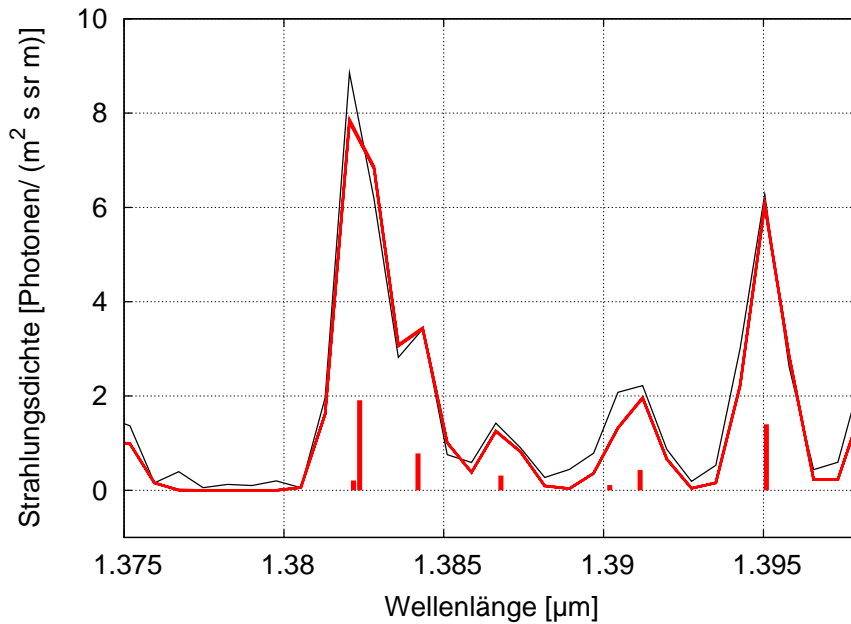
$B_\nu(x)$  ist die Planckfunktion und  $Q_{\text{vib}}$  die Vibrationszustandssumme. Größen mit einem Strich darüber kennzeichnen LTE Bedingungen. Der Ausdruck zeigt, dass unter optisch dünnen Bedingungen die Limb Strahlungsdichte hauptsächlich von der Vibrationstemperatur  $T_2$  des oberen Zustandes abhängt.

## 4.4 Vergleich zwischen Vorwärtsmodell und Messung

Die Abbildung 4.6 zeigt einen Vergleich der mit dem eingangs beschriebenen non-LTE Modell simulierten Strahlungsspektren und der SCIAMACHY Messung. Die Daten beziehen sich auf ein mittleres Spektrum in einer Höhe von 87 km bei mittleren Breiten im November 2005.

Die SCIAMACHY Messung ist die dicke schwarze Linie und die Modellrechnung die farbige Kurve. Die Balken zeigen die Position einzelner Vibrationslinien an. Dargestellt ist das Spektrum für den OH(9-6) Übergang. In diesem Wellenlängenbereich wurde die atomare Wasserstoffdichte so angepasst, dass die mittlere Strahlungsdichte zwischen Modellrechnung und Messung übereinstimmt. Die benötigten Atmosphärendaten im Modell, die nicht von SCIAMACHY bzw. GOMOS gemessen wurden, basieren auf dem NCAR ROSE Modell (Rose und Brasseur (1989), Marsh et al. (2001), Smith und Marsh (2005)).

In der Abbildung stimmt der Verlauf der Modellkurve gut mit der Messung überein. So werden die wesentlichen Banden in der Form richtig wiedergegeben und auch die Absolutwerte der Strahlungsintensität entsprechen der Messung.



**Abbildung 4.6:** Nächtliche Limb OH Emissionsspektren in 87 km Höhe bei mittleren Breiten im November 2005. Die SCIAMACHY Messung ist durch die schwarze dicke Linie dargestellt. Die rote Kurve zeigt die Strahlungsdichte, die mit Hilfe des non-LTE Modells berechnet wurde. Die Balken zeigen die Position einzelner Vibrationslinien. Dies sind von links nach rechts folgende Übergänge: 0900F2e-QQ-0600F2e, 0901F1e-QQ-0601F1e, 0902F1e-QQ-0602F1e, 0903F1e-QQ-0603F1e, 0904F1e-QQ-0604F1e, 0900F2e-PP-0601F2e, 0901F1e-PP-0602F1e (Format: AABBCCD-EE-FFHGGHHI: AA(FF): oberer (unterer) Vibrationsmode, BB(GG): Rotationsquantenzahl minus 0.5, CC(HH): Spin State, D(I):  $\Lambda$ -type Dopplung, EE: Verzweigungssymbol mit/ohne Kernspin)

# Kapitel 5

## Retrieval

### 5.1 Beschreibung der Retrievalmethode

Bei der Fernerkundung werden die Strahlungsemissionen einzelner Gase gemessen. Daraus werden Spurengaskonzentrationen abgeleitet. Dabei handelt es sich mathematisch um ein sogenanntes Inversionsproblem (engl.: Retrievalproblem). Mit Hilfe von Vorwärtsrechnungen (Kapitel 4) kann für einen gegebenen Atmosphärenzustand die Strahlung in der Atmosphäre berechnet und der Messvorgang eines Instrumentes simuliert werden. Allerdings wird gerade umgekehrt der Atmosphärenzustand gesucht, der die gegebene Messung hervorgerufen hat. Das Problem wird durch eine iterative Anpassung des Atmosphärenzustandes gelöst, um mit dem Vorwärtsmodell simulierte Beobachtungen und tatsächliche Messungen in Übereinstimmung zu bringen. In dieser Arbeit wird die sogenannte "optimal estimation" Methode verwendet, die hier erläutert wird (Rodgers (2000)).

Für die mathematische Beschreibung wird der Atmosphärenzustand, d.h. die Spurengasdichten, im Zustandsvektor  $\mathbf{x} = (x_1, \dots, x_n)$  und die Messgröße, d.h. die Strahlungsdichten, im Messvektor  $\mathbf{y} = (y_1, \dots, y_m)$  zusammengefasst. Der Zusammenhang zwischen  $\mathbf{x}$  und  $\mathbf{y}$  wird durch das Vorwärtsmodell  $\mathbf{F}$  beschrieben.

$$\mathbf{y} = \mathbf{F}(\mathbf{x}) + \epsilon \quad (5.1)$$

Diese Gleichung beschreibt mathematisch den Messvorgang, mit  $\epsilon$  als Messfehler. Der Ausgangspunkt für die weiteren Betrachtungen ist ein lineares Vorwärtsmodell.

$$\mathbf{F}(\mathbf{x}) = \mathbf{y}_0 + \mathbf{K}(\mathbf{x} - \mathbf{x}_0) \quad (5.2)$$

Die  $m \times n$  Kernel-Matrix  $\mathbf{K}$  beschreibt die lineare Abbildung einer Referenz  $(\mathbf{x}_0, \mathbf{y}_0)$  nach  $(\mathbf{x}, \mathbf{y})$ . Sie gibt die Empfindlichkeit an, mit der die Komponenten des Messvektors bzw. des Vorwärtsmodells auf Änderungen des Zustandsvektors reagieren.

$$\mathbf{K} = \frac{\partial \mathbf{y}}{\partial \mathbf{x}} = \frac{\partial \mathbf{F}(\mathbf{x})}{\partial \mathbf{x}} \quad (5.3)$$

Beim Umkehrproblem werden die Linearfaktoren für die Spalten von  $\mathbf{K}$  gesucht, die die in  $\mathbf{y}$  zusammengefassten Messungen am Besten wiedergeben. Die triviale Lösung lautet für den linearen Fall unter Vernachlässigung der Messfehler:

$$\mathbf{x} = \mathbf{x}_0 + \mathbf{K}^{-1}(\mathbf{y} - \mathbf{y}_0) \quad (5.4)$$

Diese Lösung kann allerdings nur bestimmt werden, wenn die Inverse von  $\mathbf{K}$  existiert. Das ist der Fall, wenn die Zahl an Beobachtungen und Unbekannten gleich ist und  $\text{Rang}\mathbf{K} = m = n$ .

Eine allgemeine Lösung erhält man unter Berücksichtigung des Bayes-Theorems für multivariate Wahrscheinlichkeitsdichten.

$$P(\mathbf{x}|\mathbf{y}) = \frac{P(\mathbf{y}|\mathbf{x}) P(\mathbf{x})}{P(\mathbf{y})} \quad (5.5)$$

Das Wissen über den Zustand  $\mathbf{x}$  vor und nach Durchführung einer Messung  $\mathbf{y}$  wird durch die a priori Dichte  $P(\mathbf{x})$  und die a posteriori Dichte  $P(\mathbf{x}|\mathbf{y})$  beschrieben.  $P(\mathbf{y})$  beschreibt die Wahrscheinlichkeit der Messung vor ihrer Realisierung und die Likelihood-Dichte  $P(\mathbf{y}|\mathbf{x})$  die Wahrscheinlichkeit der Messung von  $\mathbf{y}$  unter der Bedingung, dass der Zustand  $\mathbf{x}$  vorliegt.

Die Likelihood-Dichte ergibt sich unter der Annahme normalverteilter Messfehler aus dem Vorwärtsmodell.

$$-2\ln P(\mathbf{y}|\mathbf{x}) = (\mathbf{y} - \mathbf{K}\mathbf{x})^T \mathbf{S}_\epsilon^{-1} (\mathbf{y} - \mathbf{K}\mathbf{x}) + \text{const} \quad (5.6)$$

Die Angaben über die Messfehler stehen in der Kovarianzmatrix  $\mathbf{S}_e$ . Das Vorwissen über den Atmosphärenzustand kann ebenfalls durch eine Normalverteilung beschrieben werden.

$$-2\ln P(\mathbf{x}) = (\mathbf{x} - \mathbf{x}_a)^T \mathbf{S}_a^{-1} (\mathbf{x} - \mathbf{x}_a) + \text{const} \quad (5.7)$$

$\mathbf{x}_a$  und  $\mathbf{S}_a$  können aus Klimatologien genommen werden oder müssen geschätzt werden. Die Normierung  $P(\mathbf{y})$  hat nur eine untergeordnete Rolle, da nur die Stelle  $\hat{\mathbf{x}}$  interessiert, an der die a posteriori Dichte ihr Maximum hat. Damit ergibt sich die Forderung:

$$(\mathbf{y} - \mathbf{K}\mathbf{x})^T \mathbf{S}_e^{-1} (\mathbf{y} - \mathbf{K}\mathbf{x}) + (\mathbf{x} - \mathbf{x}_a)^T \mathbf{S}_a^{-1} (\mathbf{x} - \mathbf{x}_a) = \text{Min} \quad (5.8)$$

Die Lösung dieser Gleichung wird als maximum a posteriori Schätzung (MAP-Schätzung) des Atmosphärenzustandes bezeichnet. Sie kann im linearen Fall analytisch bestimmt werden.

$$\hat{\mathbf{x}} = \mathbf{x}_a + (\mathbf{K}^T \mathbf{S}_e^{-1} \mathbf{K} + \mathbf{S}_a^{-1})^{-1} \mathbf{K}^T \mathbf{S}_e^{-1} (\mathbf{y} - \mathbf{K}\mathbf{x}_a) \quad (5.9)$$

$$\hat{\mathbf{S}}^{-1} = \mathbf{K}^T \mathbf{S}_e^{-1} \mathbf{K} + \mathbf{S}_a^{-1} \quad (5.10)$$

Analog zum linearen Fall bestimmt sich die MAP-Schätzung des Atmosphärenzustands im nicht-linearen Fall durch Minimierung der Kostenfunktion  $J$

$$J(\mathbf{x}) = [\mathbf{y} - \mathbf{F}(\mathbf{x})]^T \mathbf{S}_e^{-1} [\mathbf{y} - \mathbf{F}(\mathbf{x})] + (\mathbf{x} - \mathbf{x}_a)^T \mathbf{S}_a^{-1} (\mathbf{x} - \mathbf{x}_a) = \text{Min} \quad (5.11)$$

Die Minimierung beliebiger Funktionen ist eine Standardaufgabe der Numerik, die durch Iterationsverfahren gelöst wird. Hier wird das Verfahren nach Gauss-Newton zur Ermittlung der Nullstellen des Gradienten der Kostenfunktion eingesetzt. Es ergibt sich dabei folgende Iterationsformel:

$$\mathbf{x}_{i+1} = \mathbf{x}_i + (\mathbf{S}_a^{-1} + \mathbf{K}_i^T \mathbf{S}_e^{-1} \mathbf{K}_i)^{-1} [\mathbf{K}_i^T \mathbf{S}_e^{-1} (\mathbf{y} - \mathbf{F}(\mathbf{x}_i)) - \mathbf{S}_a^{-1} (\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_a)] \quad (5.12)$$

Die numerische Berechnung der Kernelmatrix erfolgt hier mit Hilfe der Perturbationsmethode, d.h. durch Anwendung kleiner Störungen auf den Zustandsvektor

und Bestimmung der Differenzen zwischen den Vorwärtsrechnungen für den ungestörten und den gestörten Atmosphärenzustand. Von Bedeutung ist die Größe der Störung. Bei einer zu großen Störung wird der Bereich der Linearität verlassen. Eine zu kleine Störung kann aufgrund der Fehlerbehaftung des Vorwärtsmodells zu großen Unsicherheiten in den Ableitungswerten führen. In der Praxis hat sich eine Störung zwischen 1% und 5% als tauglich erwiesen. Die Störung ist auf einen zeitlichen und räumlichen Einflussbereich innerhalb der Atmosphäre begrenzt, der durch die Wahl des Sampling des Atmosphäregitter und das Interpolationsverfahren festgelegt wird. Bei Vergrößerung des Einflussbereiches nehmen die Absolutwerte der Strahlungsdichteableitungen zu. D.h. umgekehrt dass Aussagen über kleine Einflussbereiche Beobachtungsdaten mit immer geringer werdenden Messfehlern erforderlich machen.

Die Kovarianzmatrizen geben die Standardabweichungen und Korrelationen der Fehlerverteilungen an. Die Kovarianzmatrix  $S_e$  der Strahlungsdichtefehler wird diagonal und unkorreliert angenommen. Dabei betragen die absoluten Fehler  $2 \cdot 10^9$  photonen/(m<sup>2</sup> nm sr s) und die relativen 5 %. Für die Bestimmung der Kovarianzmatrix  $S_a$  wird auf ein auto-regressives Modell zurückgegriffen. Danach werden die einzelnen Elemente der Matrix durch

$$S_{ij} = \sigma_i \sigma_j \exp\left(-\frac{\Delta z}{c_z}\right) \quad (5.13)$$

gebildet. Mit  $\sigma_i$  wird die Standardabweichung und mit  $c_z$  die vertikale Korrelationslänge bezeichnet,  $\Delta z = |z_i - z_j|$  ist der Abstand der Höhenstufen. Im Hinblick auf geringe Korrelationen zwischen benachbarten Höhenstufen wird hier eine Korrelationslänge von  $c_z = 0,1$  km gewählt.

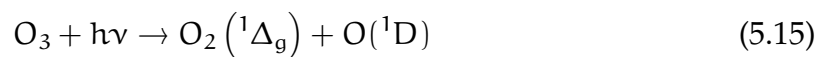
## 5.2 Bestimmung von atomarem Wasserstoff

Atomarer Wasserstoff gehört zu den am schwersten zu messenden Größen in der oberen Atmosphäre. Eine Möglichkeit besteht in der Messung von OH Emissio-

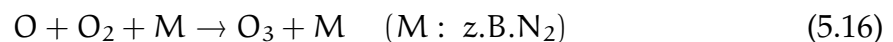
nen und gleichzeitiger Messung von Ozon. Das chemische Reaktionsschema in der oberen Atmosphäre sieht folgendermaßen aus (Evans und Llewellyn (1973)): Molekularer Sauerstoff wird durch energiereiche solare ultraviolette Strahlung bei Wellenlängen  $< 242,1$  nm in atomaren Sauerstoff aufgespalten. Dieser Prozess wird als Photolyse bezeichnet.



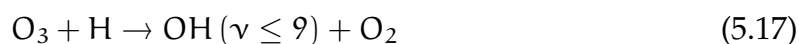
mit  $h$  = Planckkonstante und  $\nu$  = Frequenz eines Photons. Durch Photolyse von Ozon bei Wellenlängen  $< 310$  nm wird angeregter atomarer Sauerstoff produziert.



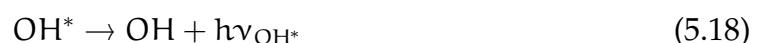
Ozon wird durch die Verbindung von atomarem und molekularem Sauerstoff erzeugt. Molekularer Stickstoff dient häufig als Stoßpartner bei dieser Reaktion, um den Impuls zu erhalten:



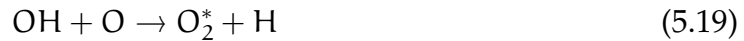
Ozon reagiert mit atomarem Wasserstoff und bildet angeregtes Hydroxyl und molekularen Sauerstoff:



Die bei der Reaktion von Ozon und atomarem Wasserstoff freiwerdende Energie von 76 kcal/mol reicht aus, um die entstandenen OH-Moleküle zu Vibrations- und Rotationsschwingungen anzuregen. Durch Abgabe von elektromagnetischer Strahlung geht das angeregte OH-Molekül dann in einen energetisch günstigeren Zustand über. Die Strahlung wird je nach Energieübergang in verschiedenen Wellenlängenbereichen emittiert.



Das Hydroxyl reagiert mit atomarem Sauerstoff zu molekularem Sauerstoff und gibt den atomaren Wasserstoff wieder frei. Es entsteht angeregter molekularer Sauerstoff:



Damit lassen sich mit diesen Reaktionsgleichungen die Konzentrationen von Ozon, atomarem Wasserstoff und Sauerstoff unter Annahme von photochemischem Gleichgewicht aus Messungen der OH-Banden ableiten.

Bei der Reaktion 5.17 handelt es sich um die wichtigste Quelle für angeregtes OH in der oberen Atmosphäre. Unter Berücksichtigung aller Produktions- und Verlustterme der einzelnen Vibrationszuständen wird mit Hilfe dieser Reaktion die Dichte von OH( $\nu$ ) berechnet (siehe Kapitel 4).

### 5.3 Bestimmung von atomarem Sauerstoff

Für atomaren Sauerstoff in der oberen Mesosphäre und unteren Thermosphäre gibt es bislang so gut wie keine direkten Fernerkundungsmessungen von Satelliteninstrumenten. Lediglich Grossmann et al. (2000) hat aus Messungen der Feinstruktur von atomarem Sauerstoff bei 63  $\mu\text{m}$  diesen zwischen 130 und 180 km abgeleitet. Indirekte Fernerkundungsmessungen basieren auf den photochemischen Produkten von atomarem Sauerstoff und Ozon und den Emissionen von Ozon. Sowohl Ozon als auch atomarer Sauerstoff gehören zur Sauerstofffamilie. Tagsüber ergibt sich unter der Annahme von photochemischem Gleichgewicht folgende Beziehung.

$$(\text{J} + k_{\text{O}_3\text{H}})[\text{O}_3] = k_{\text{O}_2\text{O}}[\text{O}][\text{O}_2][\text{M}] \quad (5.20)$$

Damit ergibt sich tagsüber aus der Messung von Ozon direkt die atomare Sauerstoffdichte.



Nachts kann atomarer Sauerstoff von den angeregten OH Meinel Banden abgeleitet werden, ähnlich wie atomarer Wasserstoff. Voraussetzung für diese Methode ist die Annahme, dass der Verlust von Ozon ( $H + O_3$ ) durch den Produktionsterm ( $O + O_2 + M$ ) ausgeglichen wird. Diese Annahme gilt auf Zeitskalen, die größer sind als die Lebenszeit von Ozon, d.h. mehrere Minuten während der Nacht. D.h. atomarer Sauerstoff kann nachts nach folgender Formel berechnet werden:

$$[O_3] = \frac{k_{OO_2} [O] [O_2] [M]}{k_{HO_3} [H]} \quad (5.21)$$

$$\implies [O] = \frac{[O_3] k_{HO_3} [H]}{k_{OO_2} [O_2] [M]} \quad (5.22)$$

mit:  $k_{OO_2} = 6 \cdot 10^{-34} \cdot (300/T)^{2.3} \text{ cm}^6\text{s}^{-1}$  Riese et al. (1994)

## 5.4 Ableitung der Heizungsrate

Die Herleitung der Heizungsrate erfolgt nach Mlynczak (1991). Dabei setzt sich der gesamte Energieeintrag in ein System aus der kinetischen Energie ( $C_{in}$ ), der Strahlungsenergie ( $R_{in}$ ) und der potentiellen chemischen Energie ( $P$ ) zusammen.

$$E_{in} = C_{in} + R_{in} + P \quad (5.23)$$

Die gesamte Energie, die aus dem System herausgeht, setzt sich aus der kinetischen Energie ( $C_{out}$ ), der Strahlungsenergie ( $R_{out}$ ), der potentiellen chemischen Energie ( $C_r$ ) und der spezifischen Wärmekapazität bei konstantem Druck ( $C_p$ ) zusammen.

$$E_{out} = C_{out} + R_{out} + C_r + C_p \quad (5.24)$$

Aufgrund der Energieerhaltung gilt:  $E_{in} = E_{out}$ . Damit tritt eine Erwärmung der Atmosphäre auf, wenn infolge von Kollisionen ein Nettoverlust von innerer Energie eintritt oder die Atmosphäre direkt durch die freiwerdende Energie einer chemischen Reaktion erwärmt wird. Die Heizungsrate (HR) kann dann folgendermaßen geschrieben werden:

$$HR = E_{out} - E_{in} = (C_{out} - C_{in}) + C_p + C_r \quad (5.25)$$

Durch Einsetzen von  $E_{in}$  und  $E_{out}$  und Substitution von HR ergibt sich für die Heizungsrate auch folgende äquivalente Formel.

$$HR = P + R_{in} - R_{out} \quad (5.26)$$

Damit ist die Heizungsrate gleich der Differenz zwischen der Umwandlung von potentieller chemischer Energie ( $P + R_{in}$ ) und der Rate von Strahlungsemission ( $R_{out}$ ). Die potentielle chemische Energie, die nicht durch Strahlung verloren geht, erwärmt die Atmosphäre.

Die Umrechnung der Heizungsrate in die Form Heizungsrate in Kelvin pro Zeit erfolgt mit:

$$HR = \frac{[M] k_B}{R} K_p \frac{\partial \Theta}{\partial t} \quad (5.27)$$

$[M]$  ist die Totaldichte,  $K_p$  ist die Wärmekapazität bei konstantem Druck,  $R$  die allgemeine Gaskonstante,  $k_B$  die Boltzmannkonstante und  $\frac{\partial \Theta}{\partial t}$  die Heizungsrate. Das Verhältnis  $\frac{[M]k_B}{R}$  ist die atmosphärische Dichte in  $\text{kg cm}^{-3}$ . Durch Einsetzen des Verhältnisses der Gaskonstante zur Wärmekapazität ergibt sich:

$$\frac{\partial \Theta}{\partial t} = \frac{2}{7} \frac{HR}{k_B [M]} \quad [\text{K/s}] \quad (5.28)$$

Durch Substitution von HR ergibt sich dann die allgemeine Form:

$$\frac{d\Theta}{dt} = \frac{2}{7} \frac{1}{k_B} \Delta E P \epsilon f_\nu \quad (5.29)$$

$P$  ist die Produktionsrate für vibrationsangeregtes OH (siehe auch Formel 4.9),  $\epsilon$  ist die Wärmeeffizienz und  $\Delta E$  die Enthalpie der Reaktion  $\text{H} + \text{O}_3$  (76 kcal/mol).

### 5.4.1 Mögliche Fehlerquellen

Die erste berücksichtigte Fehlerquelle ist eine radiometrische Messungenauigkeit des Instrumentes. Diese beträgt nach Bovensmann et al. (1999) ca. 2 - 4 % absolut. Um atomaren Wasserstoff und Sauerstoff aus den SCIAMACHY Emissionen ableiten zu können, ist außerdem noch die Kenntnis der Atmosphärentemperatur

nötig. Diese kann aus dem Verhältnis der OH(3,1) Banden zueinander bestimmt werden.

Die Temperatur wird von von Savigny et al. (2005) für eine Tangentenhöhe von 86 km aus den SCIAMACHY OH Emissionen abgeleitet und für die Ableitung der Heizungsrate und Bestimmung von atomarem Wasserstoff und Sauerstoff in dieser Arbeit verwendet. Da von den OH Temperaturen allerdings keine globalen Höhenprofile vorliegen, werden die Temperaturen im Retrieval lediglich als Korrekturfaktor verwendet. Für die Vertikalverteilung der atmosphärischen Temperatur wird ein Profil des NCAR ROSE Modells (Rose und Brasseur (1989), Marsh et al. (2001), Smith und Marsh (2005)) genutzt und jeweils um die Differenz zu der abgeleiteten SCIAMACHY Temperatur bei 86 km verschoben. Ein Fehler in der Temperatur aufgrund ihrer Variabilität mit der Höhe und der Geolokation muss somit in den abgeleiteten Größen berücksichtigt werden.

Die Temperatur spielt bei der Berechnung der Ratenkonstanten der chemischen Reaktionen eine wichtige Rolle. So wird Ozon bei niedrigen Temperaturen zum einen langsamer über die Reaktion mit atomarem Wasserstoff und zum anderen langsamer über die Reaktion mit atomarem Sauerstoff abgebaut. Gleichzeitig erfolgt die Produktion von Ozon, durch die Reaktion von atomarem und molekularem Sauerstoff, bei tiefen Temperaturen schneller (Smith et al. (2008)). Während der Nacht herrscht photochemisches Gleichgewicht zwischen der Produktion von Ozon durch die Reaktion von atomarem und molekularem Sauerstoff und dem Abbau von Ozon durch die Reaktion mit atomarem Wasserstoff. Damit pflanzen sich Fehler im Ozon auch in den anderen Größen wie atomarer Sauerstoff und atomarer Wasserstoff fort. Erhöhtes Ozon tritt auf, wenn die Konzentration von atomarem Sauerstoff erhöht ist. Die Ozonkonzentration ist niedrig, wenn die Temperatur oder die Konzentration von atomarem Wasserstoff hoch ist (Smith et al. (2008)).

Der Einfluss der Tangentenhöhe auf die Genauigkeit des Retrievals wurde schon in Kapitel 3.3.3 erläutert.

Die letzte hier berücksichtigte Fehlerquelle ist die Messung der Ozonprofile von GOMOS.

### 5.4.2 Fehlerabschätzung des Retrievals

In diesem Kapitel wird der Einfluss der oben genannten Fehler auf die beim Retrieval abgeleiteten Größen untersucht. Dies geschieht mit Hilfe sogenannter End-to-End Tests, bei denen anhand synthetischer Daten überprüft wird, ob ein Retrievalsystem ordnungsgemäß funktioniert. Dabei wird für einen gegebenen Atmosphärenzustand eine Vorwärtsrechnung durchgeführt und dieser Vorwärtsrechnung dann Fehler überlagert. Anschließend wird mit den simulierten Beobachtungen ein Retrieval durchgeführt und dessen Ergebnis mit den Eingangsdaten verglichen.

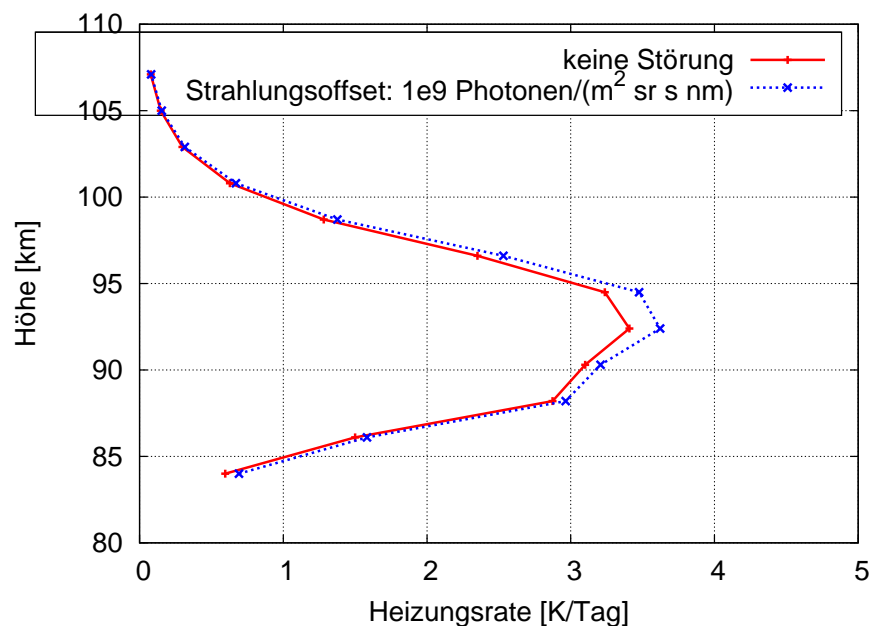
Zuerst wird mit dem sogenannten Biastest überprüft, ob das Retrievalsystem den a priori Zustand ohne Messfehler exakt reproduzieren kann. Wenn das ordnungsgemäß funktioniert, können durch die End-to-end Tests auch die Auswirkungen von Messfehlern auf die abgeleiteten Größen bestimmt werden.

Dazu werden den simulierten Beobachtungen unterschiedliche Messfehler aufgeprägt und mit diesen verrauschten Beobachtungen dann das Retrieval durchgeführt. Die Abweichungen zu dem fehlerfreien Fall geben dann die zu erwartenden Messfehler an.

Der Test des Retrievalsystems wurde einzeln für die in Kapitel 5.4.1 genannten möglichen Fehlerquellen durchgeführt und die Auswirkungen auf die Heizungsrate untersucht, da die Heizungsrate direkt proportional zur Strahlungsdichte ist. Die Auswirkungen auf atomaren Wasserstoff und Sauerstoff werden am Ende von Kapitel 5.4.3 noch einmal zusammengefasst.

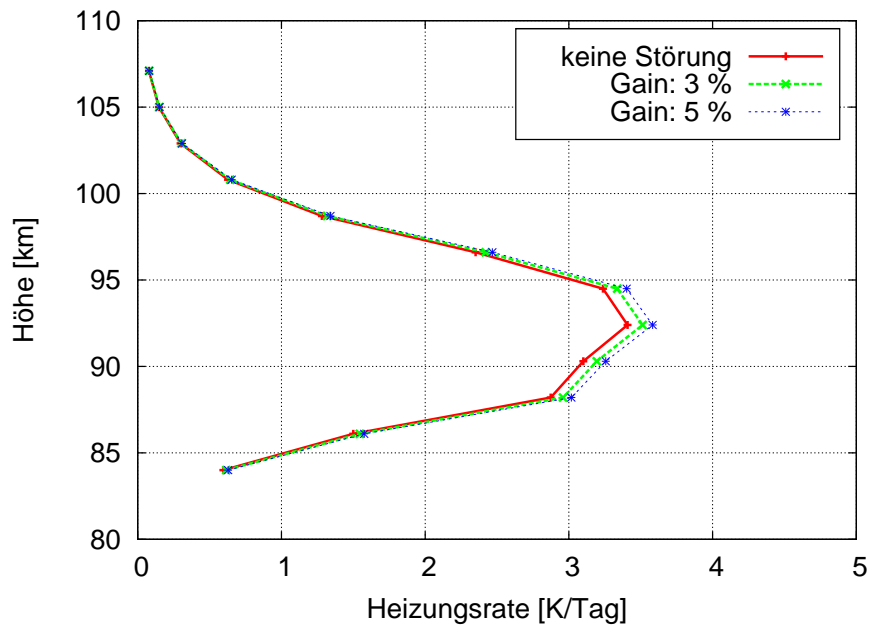
In den Abbildungen 5.1 - 5.4 ist jeweils die Heizungsrate gegen die Höhe aufgetragen. Die rote Kurve gibt den ungestörten Zustand wieder, d.h. mit der synthetisch durch Vorwärtsrechnung erzeugten Strahlungsdichte wurde das Retrieval ohne Messfehler durchgeführt.

In Abbildung 5.1 wurde der Strahlungsdichte ein fester Offset von  $1 \cdot 10^9$  Photonen/ $(\text{m}^2 \text{ sr s nm})$  vorgegeben. Dieser ergibt sich, indem die absolute radio-metrische Genauigkeit von 2 % auf mittlere gemessene Strahlungsdichten bezo-gen wird. Der stärkste Einfluss tritt im Bereich des Maximums der Heizungsrate bei 92 km auf. In dieser Höhe ergibt sich eine Differenz von ca. 0,2 K/Tag und damit ein Effekt von ca. 6 %.



**Abbildung 5.1:** Einfluss eines konstanten Offsets in der Strahlungsdichte auf die Heizungsrate

Weiterhin wurde in einem weiteren Test zu der gemessenen Strahlungsdichte ein prozentualer Gainfehler addiert, d.h. statt eines festen Offsets für alle Höhen wurde diesmal ein Offset, der sich prozentual aus dem Wert in der entsprechenden Höhe ergibt, addiert. Dieser orientiert sich an der angegebenen absoluten radio-metrischen Genauigkeit (Bovensmann et al. (1999)). Damit ergibt sich das Verhalten aus Abbildung 5.2. So ergeben 5 % Unsicherheit in der Strahlungsdichtemes-sung eine Abweichung von 0,2 K/Tag, dies entspricht ca. 6 % Unsicherheit in der Heizungsrate.



**Abbildung 5.2:** Einfluss eines Gainfehlers in der Strahlungsdichte auf die Heizungsrate

Die Auswirkungen einer ungenau bestimmten Tangentenhöhe auf die Ableitung der Heizungsrate sind in Abbildung 5.3 dargestellt. Dabei ergeben 200 m Höhenoffset einen Effekt von 0,2 K/Tag, d.h. 6 % in der Heizungsrate. Eine auf 500 m ungenaue Tangentenhöhe führt schon zu einer Unsicherheit in der Heizungsrate von 9 %. Die Tangentenhöhe von SCIAMACHY weist eine saisonale Schwingung mit einer Amplitude von 220 m und einen konstanten Offset von 1 km aufgrund des Orbitmodells auf (von Savigny et al. (2005)).

Die letzte unsichere Größe bei der Berechnung der Heizungsrate ist die Temperatur. Deren Einfluss wird in Abbildung 5.4 gezeigt. Dieser Effekt ist am geringsten. So führen 10 K Temperaturunsicherheit nur zu einer Änderung in der Heizungsrate von 0,1 K/Tag, d.h. 3 %.

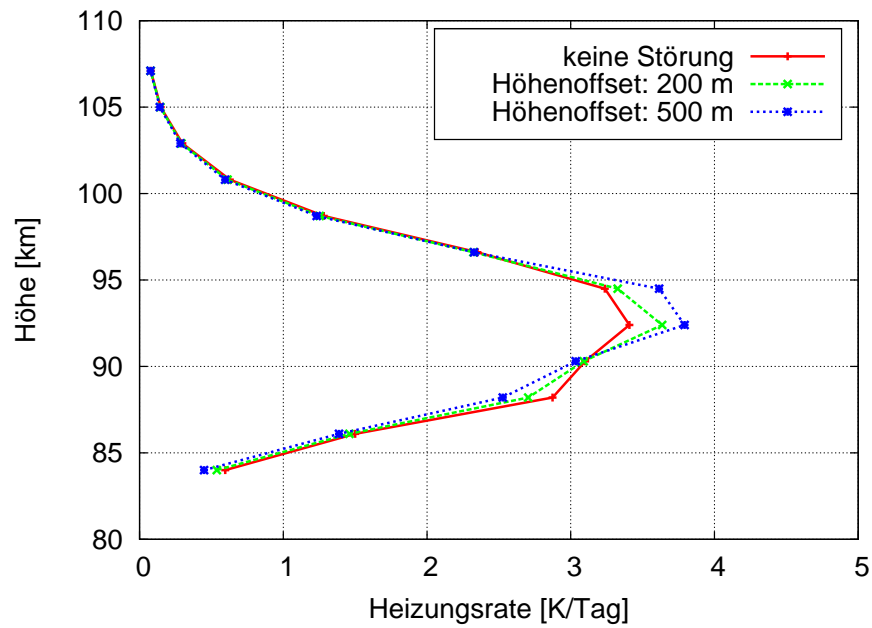


Abbildung 5.3: Einfluss eines konstanten Offsets in der Tangentenhöhe auf die Heizungsrate

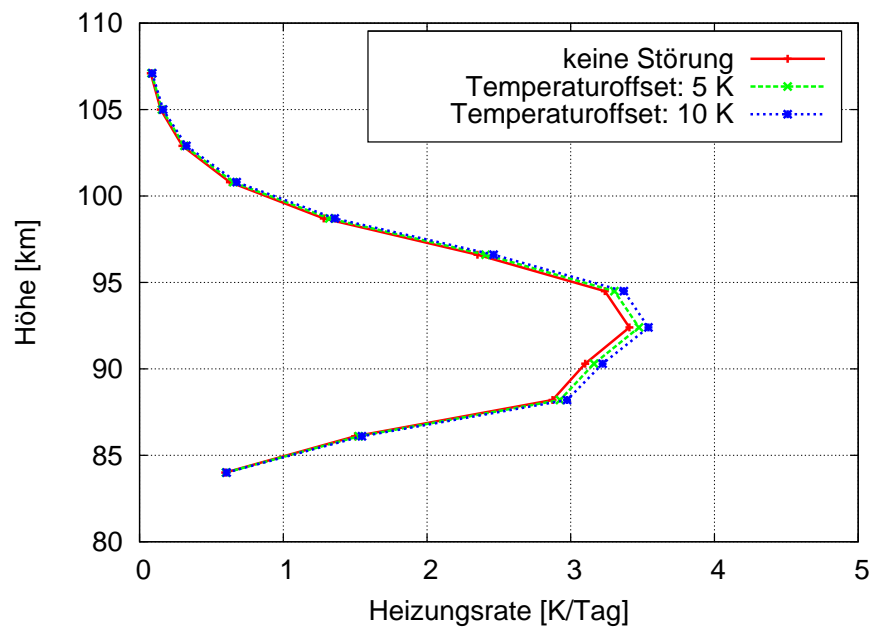
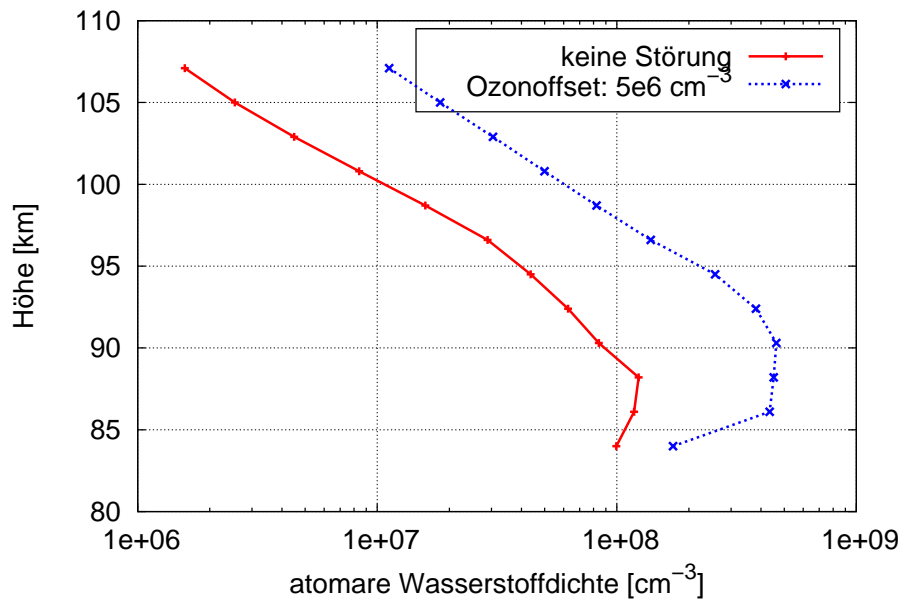


Abbildung 5.4: Einfluss eines konstanten Offsets in der Temperatur auf die Heizungsrate



**Abbildung 5.5:** Einfluss eines konstanten Offsets im Ozon auf den atomaren Wasserstoff

Bei der Bestimmung der Heizungsrate haben Fehler in der Ozonmessung keinen Einfluss. Diese können sich nur bei der Ableitung von atomarem Wasserstoff und atomarem Sauerstoff auswirken. Deshalb wird in diesem Fall bei dem End-to-end Test der Einfluss eines Ozonoffsets auf den atomaren Wasserstoff untersucht (Abbildung 5.5). Eine Erhöhung des Ozons um  $5 \cdot 10^6 \text{ cm}^{-3}$ , d.h. ca. 3 % gemessen an der mittleren Ozondichte, die in der Atmosphäre auftreten können, ergibt eine deutliche Erhöhung des atomaren Wasserstoffes.

### 5.4.3 Fehlerabschätzung des non-LTE Modells

Die systematischen Fehler der Heizungsrate, von atomarem Sauerstoff und atomarem Wasserstoff hängen auch von den Unsicherheiten im non-LTE Modell ab. Die Abschätzungen der verschiedenen Fehler des non-LTE Modells orientiert sich an den Werten von Mlynczak et al. (1998).

So besteht die größte Unsicherheit in der Reaktion von angeregtem OH mit atomarem Sauerstoff. Diese Reaktionsrate hat einen möglichen Fehler von 100 %, der



sich wiederum mit 5 % - 15 % in der Heizungsrate bei 88 km niederschlägt. Die nächstgrößere Unsicherheit findet sich bei den Kollisionsquenchingraten mit 25 %. Damit ergibt sich dann eine nur auf 12,6 % genaue Heizungsrate. Desweiteren kann die Eingangsverteilung der Energie nur auf 10 % genau spezifiziert werden und auch die Unsicherheit in der chemischen Anregung beträgt 10 %. Beide Ungenauigkeiten führen zu jeweils 6,5 % Abweichungen in der Heizungsrate. Außerdem sind auch die Einsteinkoeffizienten lediglich auf 10 % genau bekannt. Somit ergibt sich durch diesen Einfluss noch eine Unsicherheit in der Heizungsrate von 5,4 %. Damit ergibt sich ein gesamter Fehler des non-LTE Modells im Höhenbereich von 83 km - 97 km, der zwischen 19 % und 27 % liegt.

Laut Mlynczak et al. (1998) ist es erstrebenswert den Fehler in der Heizungsrate auf 15 % zu senken, um eine Übereinstimmung mit der Genauigkeit im Ozon zu erreichen (Mlynczak und Olander (1995), Mlynczak und Zhou (1998)). Eine Abweichung von 15 % in der Heizungsrate entspricht ungefähr 1 K/Tag bei 88 km (Mlynczak und Solomon (1993)).

Bei der Betrachtung der Fehler im atomaren Wasserstoff muss zusätzlich zu den vorher genannten noch die Unsicherheit in der chemischen Reaktionsratenkonstante für  $H + O_3$  berücksichtigt werden. Für eine Genauigkeit des atomaren Wasserstoffes auf ca. 28 % dürfte der Fehler in der Ratenkonstante nicht größer als 20 % sein (Mlynczak et al. (1998)). In der Realität weist diese Konstante allerdings noch einen Fehler von 74 % bei 200 K (JPL kinetics handbook) auf. Damit nimmt der Fehler im atomaren Wasserstoff um mehr als den Faktor 2 zu (Thomas (1990)). Desweiteren ist bei der Fehlerbetrachtung für den atomaren Wasserstoff eine Temperaturabhängigkeit für die Bildung bzw. Zerstörung des atomaren Wasserstoffes zu berücksichtigen. Dieser Einfluss ist allerdings vergleichsweise gering. So führt eine Temperaturabweichung von 10 % auch zu einer Unsicherheit von 10 % im atomaren Wasserstoff (Thomas (1990)).

Bei der Fehlerbetrachtung von atomarem Sauerstoff treten wieder die gleichen Fehlerquellen auf, wie bei atomarem Wasserstoff. Allerdings beträgt in diesem

	Heizungsrate	atomarer Wasserstoff	atomarer Sauerstoff
Offset Strahlungsdichte	6 %	9 %	30 %
Gain Strahlungsdichte	6 %	9 %	29 %
Höhenoffset	6 %	3 %	15 %
Temperaturoffset	3 %	1 %	37 %
Ozonoffset	/	50 %	37 %
non-LTE Modell	19 - 27 %	28 - 30 %	50 %
Gesamtfehler	25 %	59 %	~ Faktor 2

**Tabelle 5.1:** Abschätzung der verschiedenen Fehler im Retrieval und non-LTE Modell

Fall die Unsicherheit in der Ratenkonstante 45 % bei 200 K (Thomas (1990)). Hier ist der Einfluss der Temperatur dafür umso größer. Eine Änderung der Temperatur um 10 % führt zu einer Änderung im atomaren Sauerstoff von 50 % (Thomas (1990)).

Zusätzlich zu den hier genannten Fehlern müssen noch die Messfehler aus Kapitel 5.4.2 berücksichtigt werden. Damit ergeben sich die in Tabelle 5.1 zusammengefassten Fehler. Für die Heizungsrate ergibt sich die größte Unsicherheit aus den Fehlern des non-LTE Modells, für den atomaren Wasserstoff muss ein möglichst genaue Ozonmessung vorliegen und bei dem atomaren Sauerstoff ergeben sich für alle Fehlergrößen relativ große Unsicherheiten.

# Kapitel 6

## Retrievalergebnisse

### 6.1 Chemische Heizungsrate, atomarer Sauerstoff und Wasserstoff

In diesem Kapitel sollen die verschiedenen Größen, die sich aus den OH Emissionen von SCIAMACHY ableiten lassen, vorgestellt werden. Dies erfolgt exemplarisch anhand mittlere Profile vom 17.03.2007 für die verschiedenen Größen. Dargestellt ist zusätzlich noch die Standardabweichung der einzelnen Parameter. Abbildung 6.1 zeigt Tagesmittel der Strahlungsspektren für die im Retrieval berücksichtigten Höhen. Dargestellt ist nur der Wellenlängenbereich, der im Retrieval verwendet wird. Aus den Einzelmessungen wurden die im folgenden gezeigten Größen (Abbildung 6.2 - 6.4) abgeleitet und ebenfalls Mittelwert und Standardabweichung berechnet.

In Abbildung 6.2 wird zunächst das Höhenprofil der Heizungsrate gezeigt. Der typische Höhenverlauf ergibt eine Zunahme der Heizungsrate von 82 km bis 89 km. Danach nimmt die Heizungsrate wieder mit der Höhe ab. Das Maximum bei 89 km liegt in diesem Fall bei ungefähr 8 K/Tag. Die Variabilität über diesen einen Tag liegt bei ca. 3 K/Tag.

In Abbildung 6.3 ist das Höhenprofil der atomaren Wasserstoffdichte dargestellt. Das Profil zeigt eine kontinuierliche Abnahme mit der Höhe.

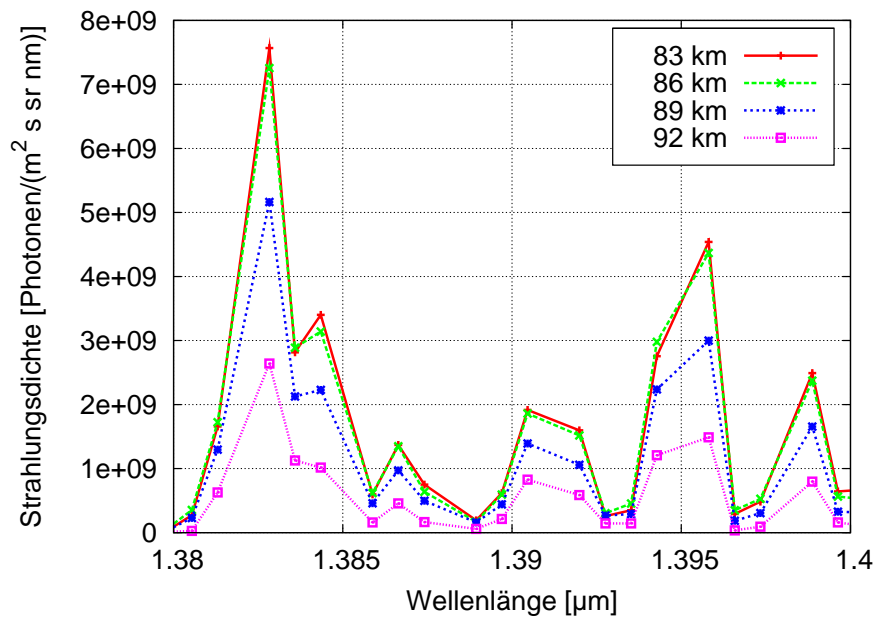


Abbildung 6.1: Strahlungsdichtespektren von SCIAMACHY für den 17.03.2007, gezeigt ist der für das Retrieval relevante Wellenlängenbereich und die berücksichtigten Höhen

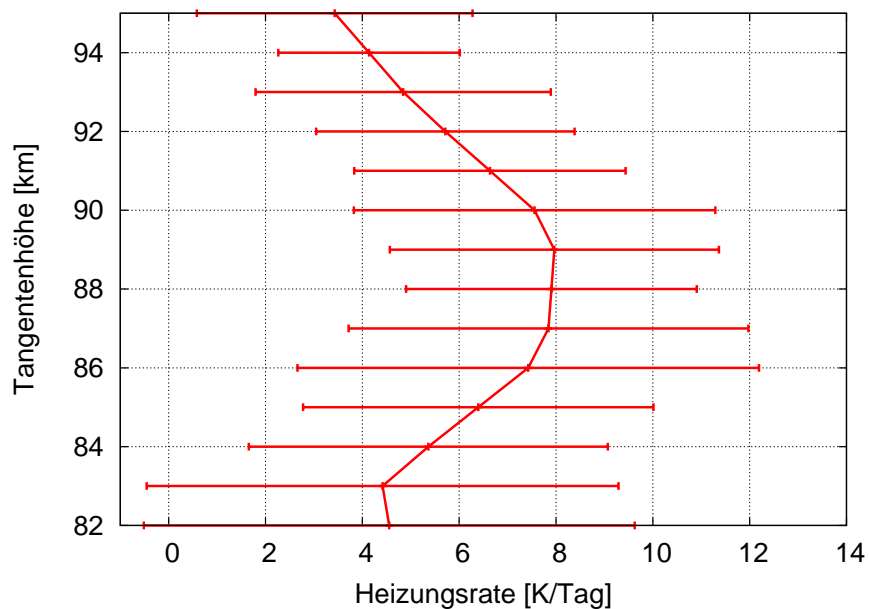


Abbildung 6.2: Dargestellt ist exemplarisch ein Tagesmittel vom 17.03.2007 des Höhenverlaufs der Heizungsrate inklusive Standardabweichung

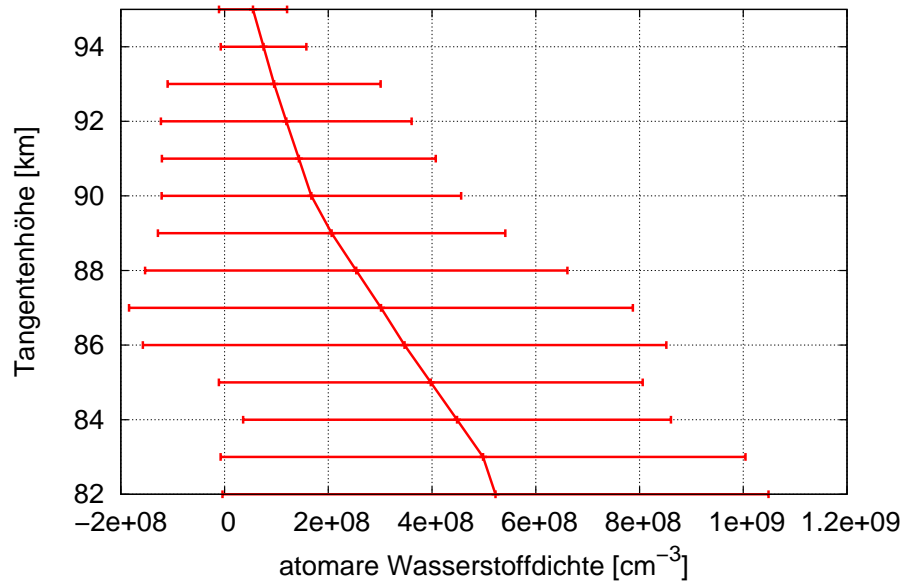


Abbildung 6.3: Dargestellt ist exemplarisch ein Tagesmittel vom 17.03.2007 des Höhenverlaufs von atomarem Wasserstoff inklusive Standardabweichung

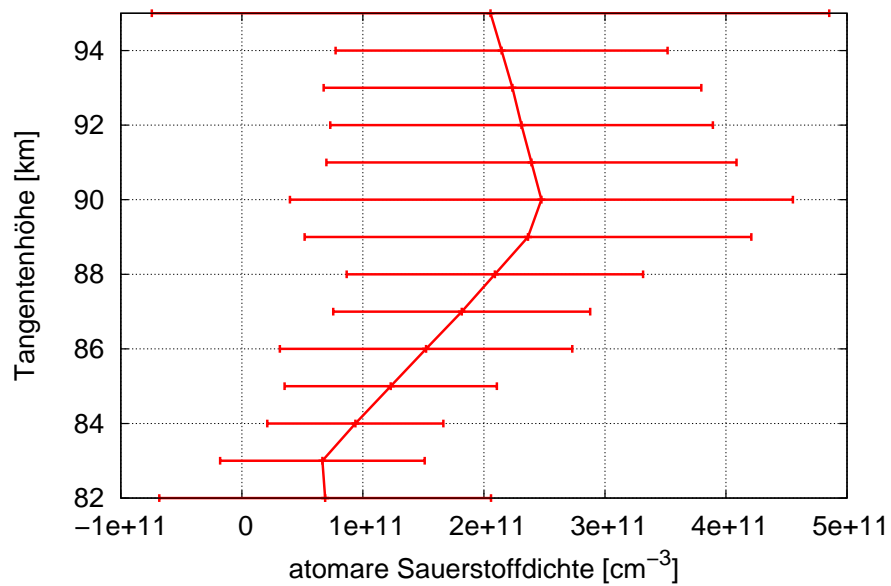


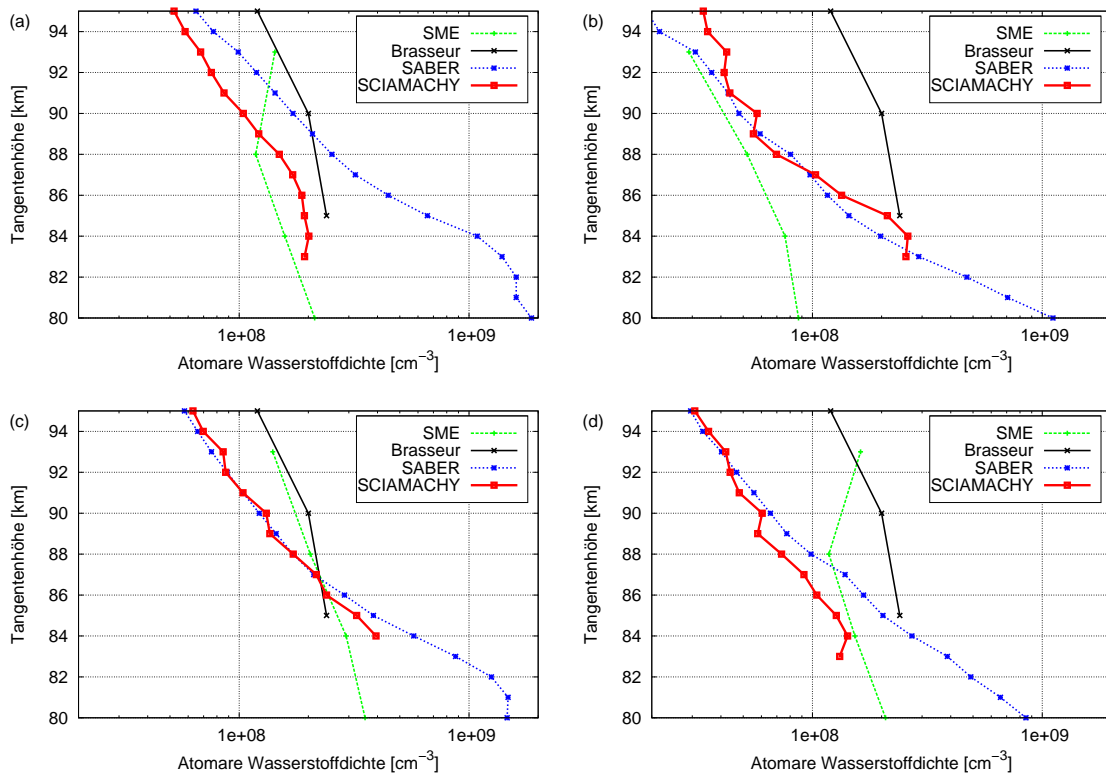
Abbildung 6.4: Dargestellt ist exemplarisch ein Tagesmittel vom 17.03.2007 des Höhenverlaufs von atomarem Sauerstoff inklusive Standardabweichung

Zuletzt wird in Abbildung 6.4 das Höhenprofil des atomaren Sauerstoffes betrachtet. Das Profil zeigt zunächst eine Zunahme der atomaren Sauerstoffdichte mit der Höhe, ab 90 km gibt es dann eine leichte Abnahme.

## 6.2 Validierung der Ergebnisse

In diesem Kapitel sollen die aus den SCIAMACHY Messungen abgeleiteten Parameter mit denen anderer Messinstrumente verglichen werden. Dazu werden Profile von Monatsmitteln von 2006 von atomarem Wasserstoff (in Abbildung 6.5) und atomarem Sauerstoff (in Abbildung 6.6) für verschiedene Monate bei 40° Breite verglichen. Im einzelnen werden dazu Monatsmitteln SCIAMACHY von 2006 (rote Kurven), monatliche Mittel der Messungen von SABER Version 1.07 für das Jahr 2006 (grüne Kurven), monatliche Mittel der SME (Solar Mesospheric Explorer) Daten von 1982 - 1985 (Thomas (1990)) (blaue Kurven) und ein global und zeitlich gemitteltes Profil des SOCRATES (Simulation of chemistry, radiation, and transport of environmentally important species) Modells (Brasseur et al. (1990)) (schwarze Kurve) verwendet. SME war eine unbemannte Raumsonde zur Untersuchung der Prozesse in der oberen Atmosphäre, bei denen Ozon gebildet und zerstört wird. Sie wurde 1981 gestartet und lieferte bis 1989 Daten. Bei dem SOCRATES Modell handelt es sich um ein zweidimensionales chemisches Strahlungstransportmodell der mittleren Atmosphäre.

Zuerst soll nun der atomare Wasserstoff betrachtet werden. Dieser ist in Abbildung 6.5 dargestellt. Im April und August gibt es eine gute Übereinstimmung zwischen SCIAMACHY und SABER. Die SME Daten und das SOCRATES Modell zeigen in allen vier Monaten keine so starke Zunahme mit abnehmender Höhe wie die anderen Satellitendaten. Im August stimmen SME und SOCRATES gut überein. Im November liegen die Werte von SCIAMACHY unterhalb von 89 km unter denen von SABER, oberhalb ergibt sich eine gute Übereinstimmung der beiden Profile. Im Januar weichen SABER und SCIAMACHY deutlich voneinan-



**Abbildung 6.5:** Vergleich verschiedener Messungen für Höhenprofile von atomarem Wasserstoff für vier verschiedene Monate, (a): Januar, (b): April, (c): August, (d): November, Monatsmittel von 2006 von SCIAMACHY (rote Kurve), monatliche Mittel der Messungen von SABER Version 1.07 für das Jahr 2006 (blaue Kurven), monatliche Mittel der SME Daten von 1982 - 1985 (Thomas (1990)) (grüne Kurven) und ein global und zeitlich gemittelttes Profil des SOCRATES (Simulation of chemistry, radiation, and transport of environmentally important species) Modells (Brasseur et al. (1990)) (schwarze Kurve)

der ab, so liegt SCIAMACHY über den gesamten Höhenbereich unterhalb von SABER.

Die Unterschiede zwischen den verschiedenen Messinstrumenten können mehrere Ursachen haben. So werden z.B. nicht alle Messungen zur selben Lokalzeit durchgeführt. Die SCIAMACHY Messungen finden immer um 22 Uhr statt, während bei SABER alle Nachtmessungen gemittelt wurden. Damit kann zwischen beiden Instrumenten eine maximale Differenz von ca. 6 h auftreten. Bei SME gab es keine Nachtmessungen von Ozon, die für die Ableitung von atoma-

rem Wasserstoff nötig sind (siehe Kapitel 5.2), deshalb wurde auf Tagmessungen zurückgegriffen.

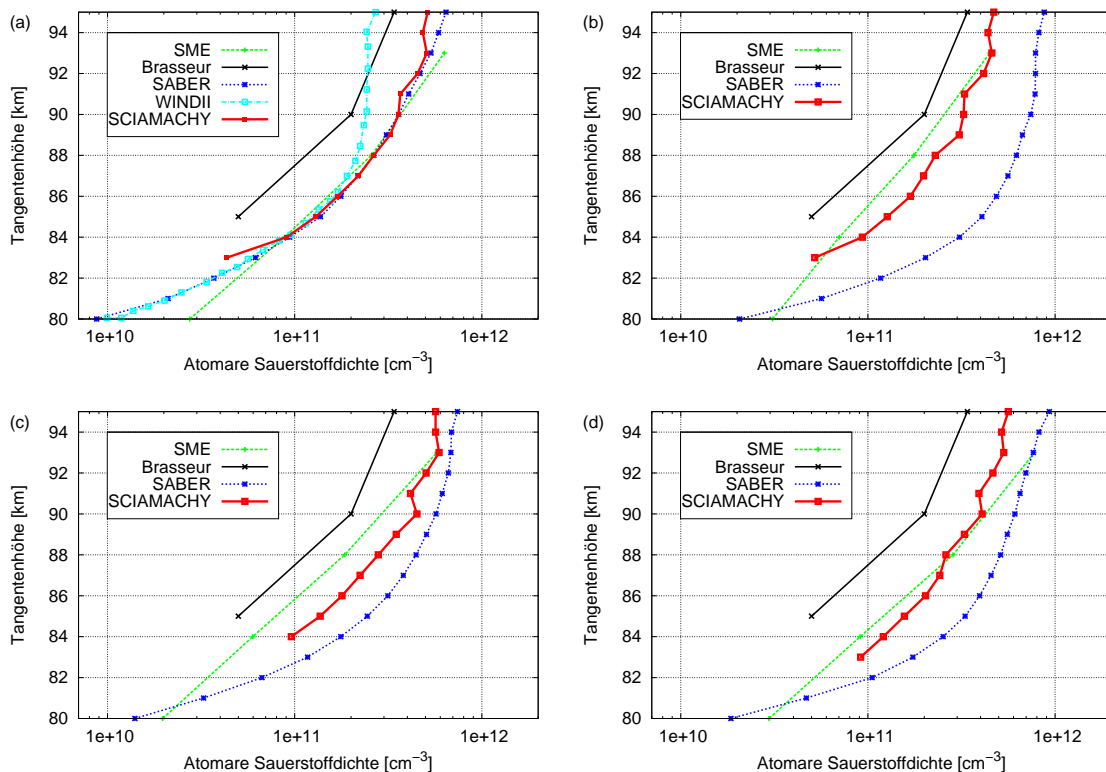
Zusätzlich müssen beim Vergleich der Datensätze die verschiedenen Emissionsbanden und Retrievalsetups berücksichtigt werden. Die Ableitung von atomarem Wasserstoff erfolgt bei SCIAMACHY aus der OH(9,6) Bande, bei SABER aus OH(5,3) und bei SME aus OH(7,5). Außerdem sind die Einsteinkoeffizienten von Goldman et al. (1998) im SCIAMACHY Retrieval ca. 30 % größer als die von van der Loo und Gronenboom (2007) im SABER Retrieval. Diese Unterschiede setzen sich nahezu linear in die abgeleiteten atomaren Wasserstoffdichten fort. So ergeben sich aufgrund größerer Einsteinkoeffizienten höhere Strahlungsdichten im Vorwärtsmodell und damit verbunden geringere Werte im atomaren Wasserstoff. Bei SME werden die Einsteinkoeffizienten von Mies (1974) verwendet. Diese liegen ebenfalls unterhalb derjenigen, die im SCIAMACHY Retrieval verwendet werden. Allerdings kann in diesen Abbildungen eine Abweichung der Profile aufgrund der Einsteinkoeffizienten nicht pauschal nachgewiesen werden, da die Messungen doch sehr gut übereinstimmen.

In Abbildung 6.6 ist der Vergleich der Profile der verschiedenen Messinstrumente für atomaren Sauerstoff gezeigt. Diesmal gibt es zusätzlich im Januar noch Messungen des WINDII (Wind Imaging Interferometer) Instrumentes (Russell III und Lowe (2003)) (hellblaue Kurve). WINDII ist ein Interferometer, das sich seit 1991 auf dem UARS (Upper Atmosphere Research Satellite) Satelliten befindet. Es misst Wind, Temperatur und Emissionsraten verschiedener Spurengase im Höhenbereich von 80 bis 300 km. Diesmal gibt es im Januar bis 88 km eine gute Übereinstimmung zwischen den vier Messgeräten. Lediglich das SOCRATES Modell verläuft deutlich niedriger. Ab 88 km verläuft das Sauerstoffprofil von WINDII nahezu konstant, während SCIAMACHY, SABER und SME mit zunehmender Höhe weiter ansteigen und weiterhin gut übereinstimmen. In den anderen drei Monaten liegen die SABER Messungen über denen von SCIAMACHY und die von SME, sowie das SOCRATES Modell unterhalb von SCIAMA-



CHY. Die Steigung der SCIAMACHY, SABER und SOCRATES Profile ist ähnlich, während die SME Daten mit zunehmender Höhe fast linear ansteigen.

Für die Unterschiede zwischen den verschiedenen Messinstrumenten gelten hier dieselben Gründe, die schon beim atomaren Wasserstoff erwähnt wurden.



**Abbildung 6.6:** Vergleich verschiedener Messungen für Höhenprofile von atomarem Sauerstoff für vier verschiedene Monate, (a): Januar, (b): April, (c): August, (d): November, Monatsmittel von 2006 von SCIAMACHY (rote Kurve), monatliche Mittel der Messungen von SABER Version 1.07 für das Jahr 2006 (blaue Kurven), monatliche Mittel der SME Daten von 1982 - 1985 (Thomas (1990)) (grüne Kurven) und ein global und zeitlich gemittelt Profil des SOCRATES (Simulation of chemistry, radiation, and transport of environmentally important species) Modells (Brasseur et al. (1990)) (schwarze Kurve), im Januar mittleres Profil von WINDII für UARS Tag 865 (23.01.94) (hellblaue Kurve)

### 6.3 Saisonale und räumliche Variationen

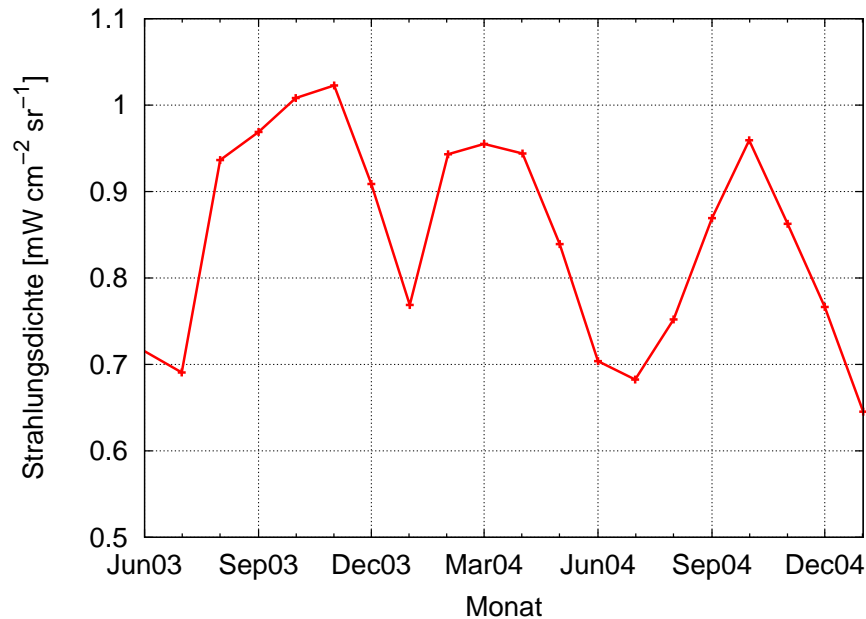
In den einzelnen Größen gibt es noch Ausreißer, die entfernt werden müssen. So treten vor allem durch die manuelle Korrektur des Hintergrundes, d.h. die Berücksichtigung des Dunkelstromes (siehe Kapitel 3.3.3) negative Strahlungsdichten auf, die vor der Auswertung eliminiert werden müssen. Deshalb werden auf die abgeleiteten Daten verschiedene Filterkriterien angewendet.

Bei den Betrachtungen in diesem Kapitel und im nächsten Kapitel wurde zuerst der Median der einzelnen Parameter gebildet. Anschließend wurden nur Werte berücksichtigt, die minimal um den Faktor zwei vom Median abweichen, damit einzelne Ausreißer nicht das Resultat verfälschen können.

Die Abbildung 6.7 zeigt die zeitliche Entwicklung der OH Emission in 88 km Höhe zwischen Juli 2003 und Januar 2005. Dabei wurden mit den gemessenen Strahlungsdichten im Breitenbereich zwischen  $15^{\circ}$  S und  $15^{\circ}$  N monatliche Mittel erstellt. Die Kurve zeigt eine halbjährliche Schwingung mit Maxima sowohl im März/April, als auch im September. Diese Schwingungen werden auch in den OH Emissionen von SABER gefunden (Marsh et al. (2006)). Dabei handelt es sich ebenfalls um monatliche Mittelwerte im Bereich zwischen  $7,5^{\circ}$  S und  $7,5^{\circ}$  N um 23:30 Uhr. Außerdem können ähnliche Ergebnisse auch in den AE (Atmospheric Explorer) Beobachtungen von Abreu und Yee (1989), den SME Beobachtungen von Texier et al. (1989) und den bodengebundenen Messungen der OH(9,4) Bandenemission bei  $3,9^{\circ}$  S von Takahashi et al. (1995) gefunden werden.

Die beobachtete Saisonalität wird durch die jahreszeitlichen Änderungen der täglichen Gezeit hervorgerufen. Diese hat ihre stärksten Amplituden am Äquator während der Tagundnachtgleiche (Burrage et al. (1995)).

Im weiteren werden nun die abgeleiteten Größen betrachtet. Dabei zeigen die Abbildungen 6.8 - 6.10 Breiten-Höhen-Querschnitte für die vier verschiedenen Jahreszeiten (DJF: Dezember-Februar, MAM: März-Mai, JJA: Juni-August, SON: September-November). Dargestellt sind Mittelwerte über den analysierten Messzeitraum von August 2002 bis April 2009. Die Konturflächen verschieben sich



**Abbildung 6.7:** Zeitreihe der integrierten OH Emissionen aus SCIAMACHY Kanal 6 am Äquator

aufgrund des jeweils abgedeckten Breitenbereichs.

Abbildung 6.8 zeigt die Breiten-Höhen-Querschnitte für die Heizungsrate. Dabei wurden die Daten innerhalb von  $\pm 5^\circ$  Intervallen in der Breite zusammengefasst. In der Höhe wurden die Daten auf ein 1 km Gitter gebracht. In den Wintermonaten (Dezember - Februar) gibt es um 86 km ein starkes Maximum mit ca. 9 K/Tag bei  $60^\circ$  N und ein zweites etwas schwächeres mit 8 K/Tag am Äquator. Dazwischen befindet sich bei  $30^\circ$  N ein klar abgegrenztes Minimum. Oberhalb von 88 km ist diese Breitenstruktur aufgehoben und die Heizungsraten nehmen polwärts von  $30^\circ$  N und mit der Höhe ab. In den Monaten Dezember - Februar und September - November existiert über dem Pol eine Abwärtstendenz der niedrigen Heizungsrate. Diese Abwärtstendenz ist ein Resultat der globalen Zirkulation, da sich die Luft über der Winterhemisphäre abwärts bewegt. Dabei wird atomarer Sauerstoff nach unten transportiert und infolge des photochemischen Gleichgewichts kommt es zu einer Erhöhung des Ozons und einer Abnah-

me im atomaren Wasserstoff (siehe auch Abbildung 6.9 und 6.10). Im Frühjahr (März - Mai) erstreckt sich der überdeckte Breitenbereich von  $30^\circ$  S bis  $60^\circ$  N. Die grundsätzliche Breitenstruktur stimmt mit der aus dem Winter überein. Allerdings ist das Maximum am Äquator jetzt deutlich stärker geworden und liegt bei 12 K/Tag. Das zweite Maximum ist in etwa konstant geblieben. Oberhalb von 88 km ist die Struktur deutlich geringer. Beim Übergang in den Sommer (Juni - August) erstreckt sich der überdeckte Breitenbereich von  $50^\circ$  S bis  $40^\circ$  N. Damit kann in diesem Zeitraum ein zweites Maximum bei  $50^\circ$  S mit 10 K/Tag aufgrund der globalen Zirkulation festgestellt werden. Das Maximum am Äquator ist immer noch vorhanden, hat sich allerdings wieder auf 9 K/Tag abgeschwächt. Oberhalb von 88 km gibt es auch in dieser Jahreszeit weniger Struktur. Die Breiten-Höhen-Verteilung im Herbst (September - November) erstreckt sich von  $30^\circ$  S bis  $70^\circ$  N. Diesmal sind beide Maxima, am Äquator und bei  $60^\circ$  N, ungefähr gleich stark ausgebildet mit 10 K/Tag. Oberhalb von 88 km findet sich wieder das Indiz der globalen Zirkulation mit einem abwärts gerichteten Minimum.

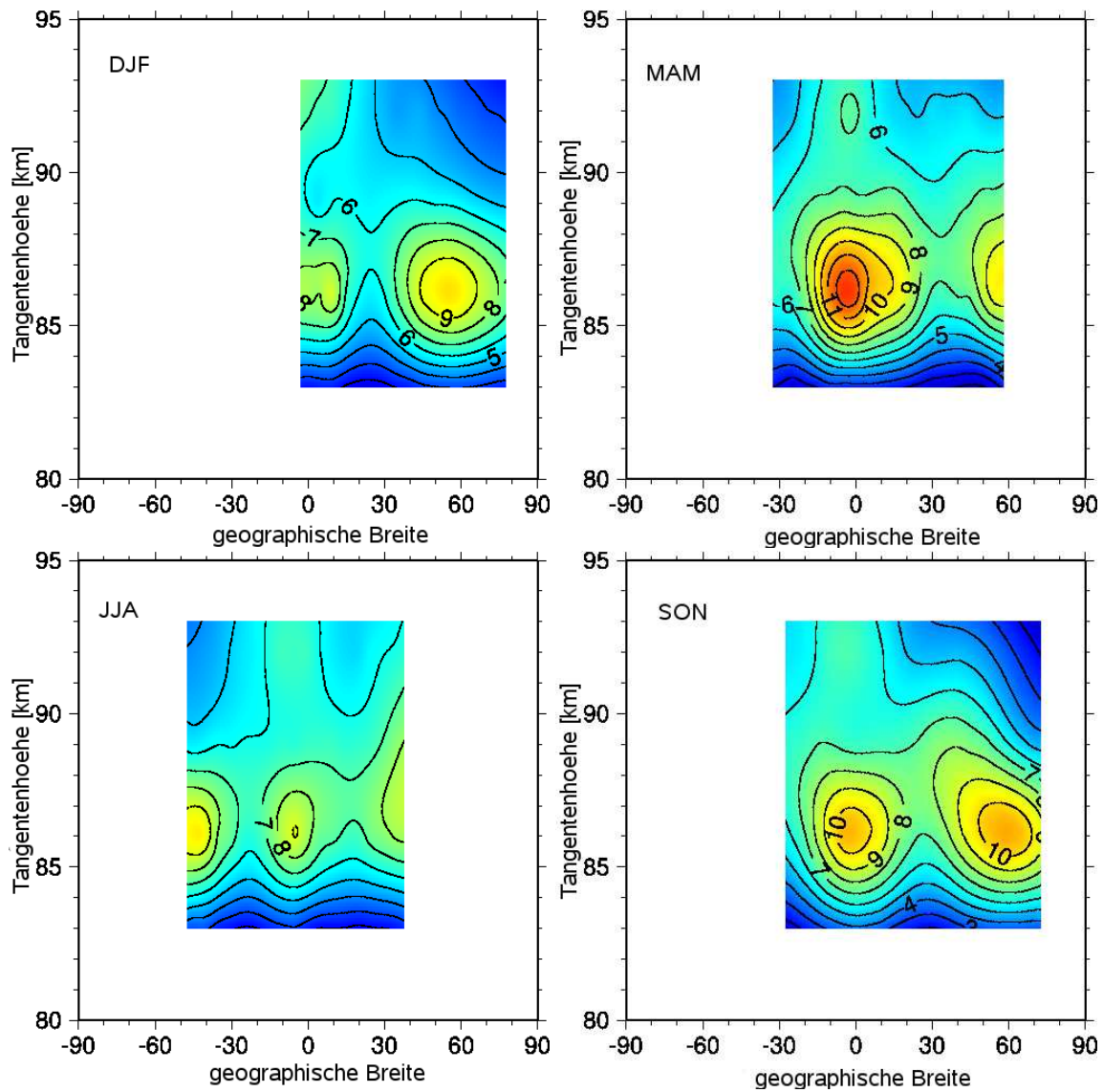
Am Äquator kann damit auch in der Heizungsrate ein halbjährlicher Zyklus mit dem Maximum im Frühjahr und Herbst gefunden werden. Zusätzlich gibt es bei  $50^\circ$  S und  $60^\circ$  N ein zweites Maximum, welches keinerlei Saisonalität aufweist. Allerdings ist das Maximum im Herbst etwas stärker. Marsh et al. (2006) haben bei  $\pm 60^\circ$  einen jährlichen Zyklus in den OH Emissionen gefunden. Das ist in diesen Daten nicht so klar zu erkennen, aufgrund der unterschiedlichen Breitenabdeckung in den einzelnen Jahreszeiten.

Abbildung 6.9 zeigt den saisonalen Zyklus für den atomaren Wasserstoff. Die grundsätzliche Breitenstruktur mit dem Maximum am Äquator und einem zweiten bei  $\pm 60^\circ$  N entspricht der der Heizungsrate. Allerdings befindet sich die Struktur im atomaren Wasserstoff bei 85 km, d.h. ca. 1 km tiefer. Außerdem ist die Breitenstruktur im Sommer nicht so klar abgegrenzt. Damit kann das Minimum bei  $30^\circ$  S nur schwer und das Minimum bei  $30^\circ$  N gar nicht identifiziert werden. Stattdessen ergibt sich eine Verschmierung der Struktur über den gesamten

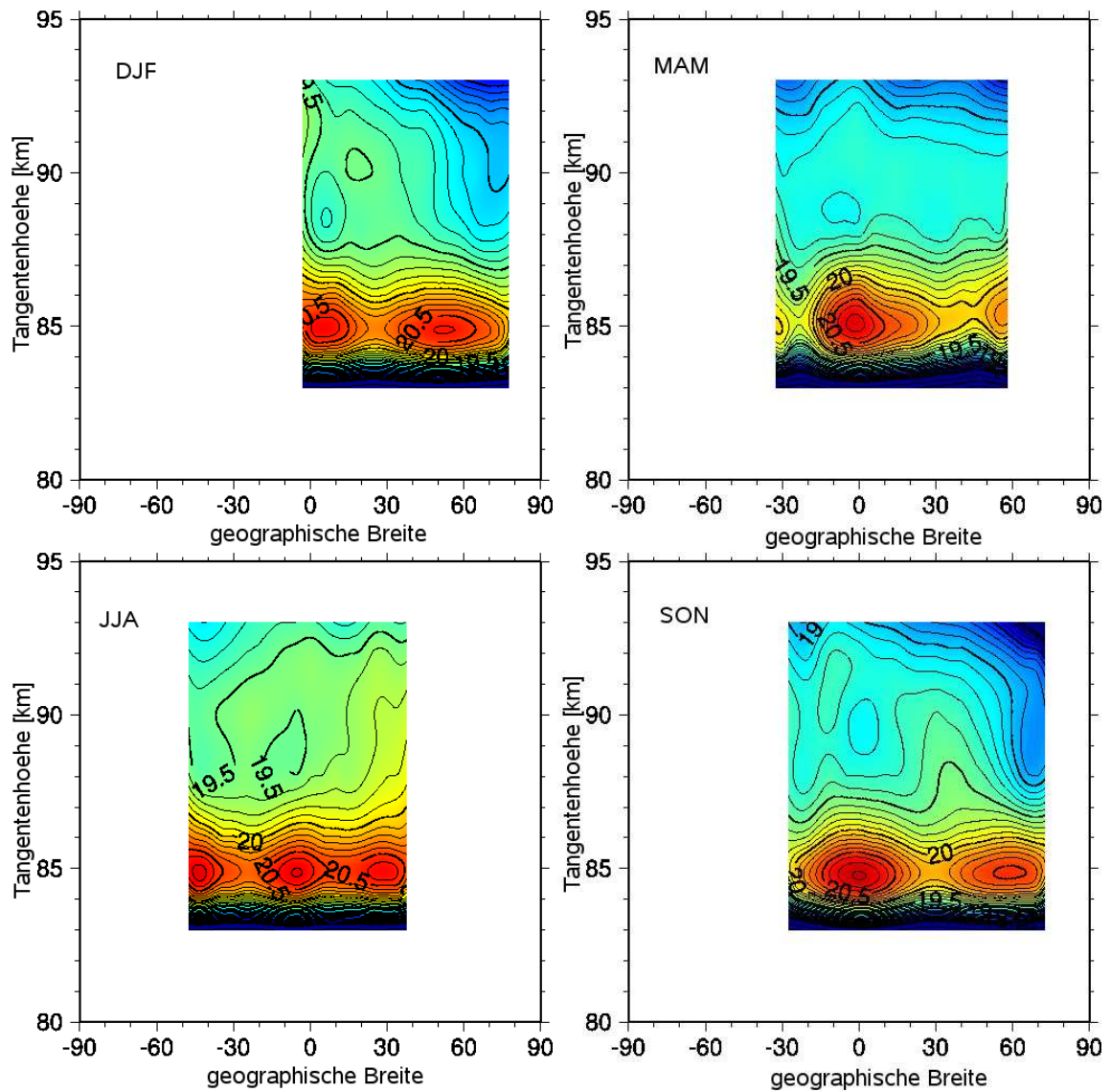
Breitenbereich. Der abwärts gerichtete Lufttransport über der Winterhemisphäre ist in dieser Abbildung allerdings deutlicher am Verlauf des Minimums mit der Höhe zu erkennen. So gibt es im Winter ein Minimum bei 30° N in 92 km, welches sich nach Norden und in tiefer Höhenschichten ausbreitet. Bei 70° N liegt es bei 88 km. Eine ähnliche Struktur ergibt sich im Herbst, wobei hier das Minimum etwas stärker und abgegrenzter auf die hohen Breiten ist.

Zum Schluss werden die Breiten-Höhen-Querschnitte von atomarem Sauerstoff betrachtet. Diese sind in Abbildung 6.10 dargestellt. Der atomare Sauerstoff nimmt mit der Höhe zu, so dass im Höhenintervall um 85 km kein klares Maximum festzustellen ist. Allerdings sind die Werte oberhalb von 89 km deutlich größer und es grenzt sich eine Schicht des atomaren Sauerstoffes ab. Grundsätzlich lässt sich auch hier die Breitenstruktur wieder erkennen. Jedoch sind die Werte diesmal noch etwas weiter verschmiert, so dass eine ganz klare Abgrenzung zwischen Maximum und Minimum nicht stattfindet.

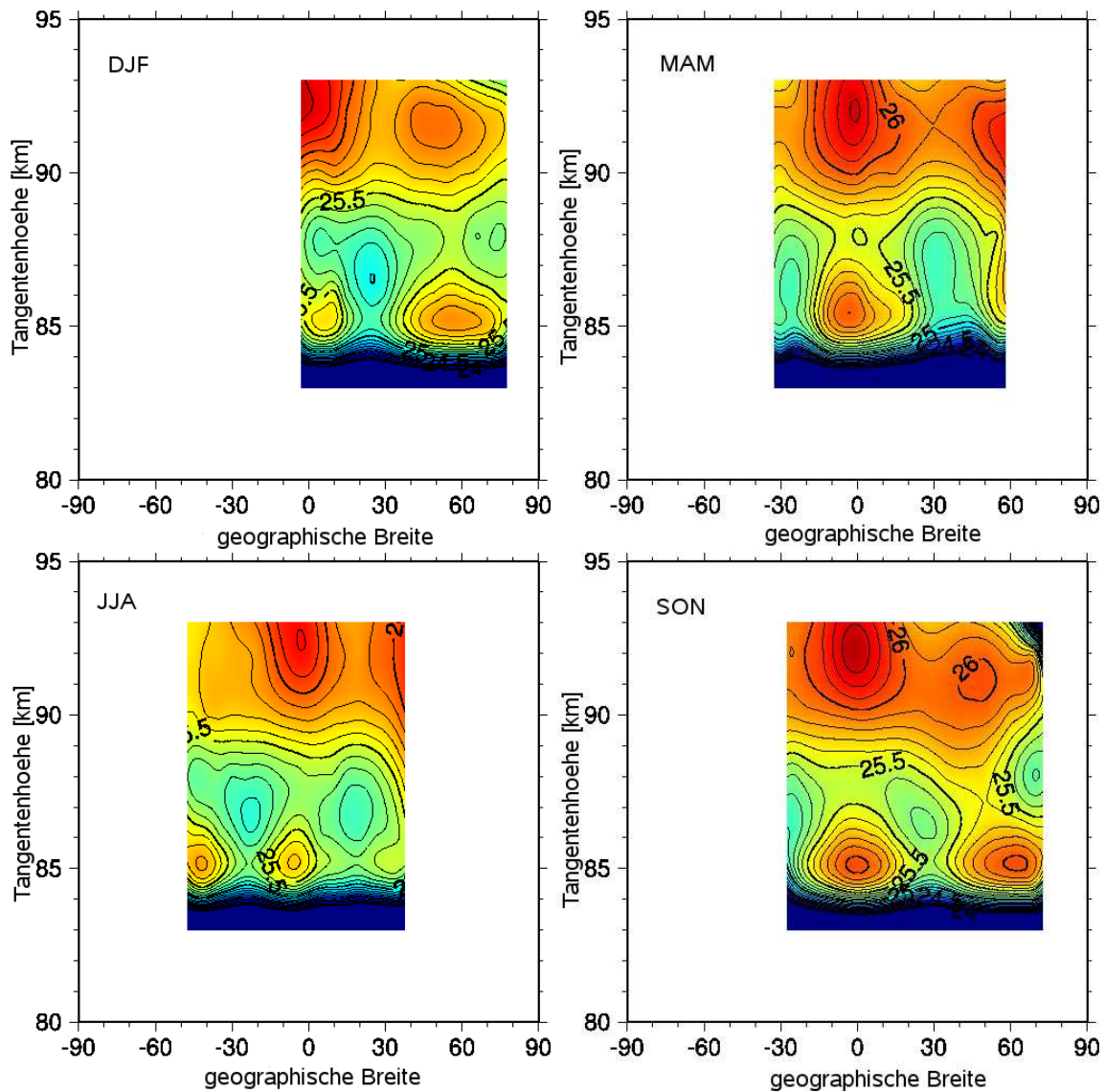
Die hier beobachteten Verteilungen sind mit klimatologischen Erwartungen bzw. den allgemeinen Annahmen über die Chemie und Dynamik in der oberen Atmosphäre konsistent (Smith et al. (2008)).



**Abbildung 6.8:** Saisonaler Zyklus der Heizungsrate (DJF: Dezember-Februar, MAM: März-Mai, JJA: Juni-August, SON: September-November). Dargestellt sind Mittelwerte über den analysierten Messzeitraum von August 2002 bis April 2009. Die Konturlinien geben die Heizungsrate in K/Tag an.



**Abbildung 6.9:** Saisonaler Zyklus von atomarem Wasserstoff (DJF: Dezember-Februar, MAM: März-Mai, JJA: Juni-August, SON: September-November). Dargestellt sind Mittelwerte über den analysierten Messzeitraum von August 2002 bis April 2009. Die Konturlinien geben die atomare Wasserstoffdichte in  $1 \cdot 10^9 \text{ cm}^{-3}$  an.



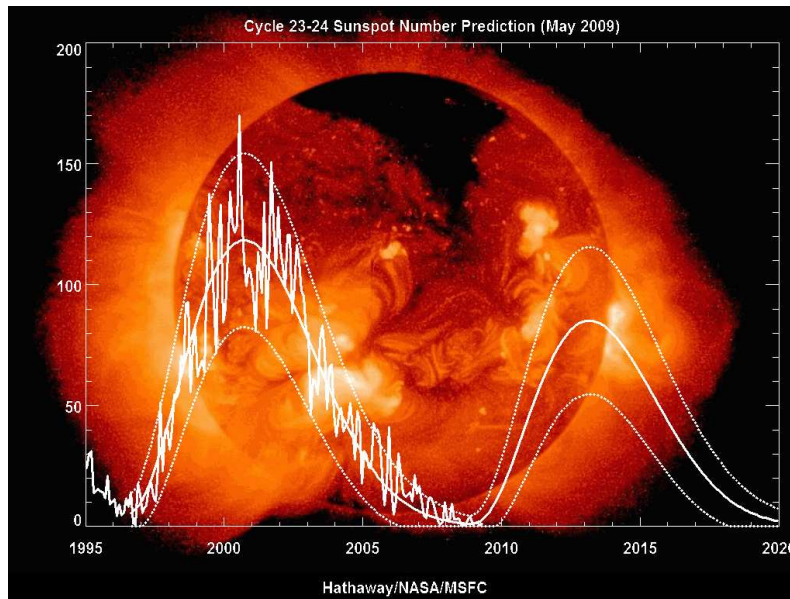
**Abbildung 6.10:** Saisonaler Zyklus von atomarem Sauerstoff (DJF: Dezember-Februar, MAM: März-Mai, JJA: Juni-August, SON: September-November). Dargestellt sind Mittelwerte über den analysierten Messzeitraum von August 2002 bis April 2009. Die Konturlinien geben die atomare Sauerstoffdichte in  $1 \cdot 10^{12} \text{cm}^{-3}$  an.



# Kapitel 7

## Langzeitliche Variationen

In diesem Kapitel sollen Variationen auf langen Zeitskalen untersucht werden. Eine Hauptquelle für Variationen auf einer Zeitskala von Dekaden in der Atmosphäre ist der 11-Jahres Zyklus der solaren Aktivität der Sonne (Brasseur und Solomon (2005)). Die elektromagnetische Strahlung der Sonne ist nicht konstant, sondern verändert sich bei ultravioletten Wellenlängen auf verschiedenen Zeitskalen (Donnelly (1991)). Die einfallende solare Strahlung treibt die Dynamik der Erdatmosphäre an. Der totale solare Fluss ist nahezu konstant, aber die spektrale UV-Einstrahlung ändert sich mit einer Periode von ca. 27-Tagen durch die Rotation der Sonne. Über einen solaren 11-Jahres Zyklus sind Variationen bis zum Faktor 2 im Lyman- $\alpha$  Fluss möglich. In Abbildung 7.1 ist die Vorhersage, basierend auf den Daten von Mai 2009, der Anzahl der Sonnenflecken gegen die Zeit dargestellt. Die Anzahl der Sonnenflecken ist ein Maß für die solare Aktivität. In Jahren mit geringerer Fleckenzahl nimmt auch die integrierte Sonnenstrahlung um ca. 0,1 % ab. Die Periodizität in der Häufigkeit der Sonnenflecken wird durch den Sonnenfleckenzyklus beschrieben. Dieser überdeckt einen Zeitraum von durchschnittlich 11 Jahren. Das Magnetfeld der ruhigen Sonne lässt sich durch ein Dipolfeld beschreiben. Dieses polt sich alle 11 Jahre um, so dass die ursprüngliche Ausrichtung wieder nach 22 Jahren erreicht ist. Damit ergibt sich der 11-Jahres Zyklus der Sonne.



**Abbildung 7.1:** Messung und Vorhersage der Sonnenflecken für den 23sten und 24sten solaren Zyklus, basierend auf den Daten von Hathaway, NASA, MSFC von Mai 2009

Studien zu Änderungen der solaren Einstrahlung auf den Zeitskalen von 27-Tagen und 11-Jahren wurden von mehreren Autoren durchgeführt (z.B. Donnelly (1991), Woods und Rottman (1997)).

Xu et al. (2007) haben die Effekte des solaren Zyklus in mittleren zonalen Temperaturen von Saber im Mesopausenbereich zwischen 83 und 100 km untersucht. Der Trend der Temperatur beträgt 0,4 - 1,5 K/Jahr in Abhängigkeit von der Breite. Dem Trend überlagert sind jährliche und halbjährliche Oszillationen. Deren Amplitude beträgt bei mittleren Breiten 12 - 16 K.

Der Einfluss des solaren Zyklus in den NO Daten von SABER wurde von Mlynczak et al. (2007) untersucht. Die mittlere jährlich abgestrahlte Energie im infraroten durch NO bei 5,3  $\mu\text{m}$  hat im Zeitraum von 2002 - 2006 um den Faktor 2,9 abgenommen. Diese Abnahme ist mit einer Abnahme in dem mittleren jährlichen F10.7 Solarindex korreliert ( $r=0,96$ ). Clemesha et al. (2005) hat bodengebundene Messungen der OH(6,2) Säulendichte für die Jahre 1987 - 2000 analysiert. Dabei fand er in den Intensitäten bei 23° S eine Zunahme um 2 %/Jahr und eine

11-jährige Schwingung mit einer maximalen Amplitude von 14 %. Für die Temperaturen fand er entsprechend Oszillation mit einer Amplitude von 6 K und einen linearen Trend von - 1,08 K/Jahr. Die Phase der 11-jährigen Schwingung stimmt sehr gut mit den Variationen des F10.7 Solarindexes überein, so tritt das Maximum der Temperatur 0,4 Jahre vor dem Maximum des solaren Flusses auf. Das Verhältnis der Intensitäten von O(557 nm) zu O<sub>2</sub>(865 nm), das ein Vertreter für das Volumenmischungsverhältnis von atomarem Sauerstoff ist, zeigt einen 11-Jahres Zyklus mit einer Amplitude von 22 % und einen linearen Trend von - 2 %/Jahr.

## 7.1 Trend in SCIAMACHY Daten

Der bisherige Datensatz der SCIAMACHY Messungen von 2002 - 2009 überdeckt lediglich die abnehmende Phase des 23sten solaren Zyklus (siehe Abbildung 7.1). Damit kann eine Abhängigkeit dieser Messungen vom solaren Zyklus nicht einwandfrei nachgewiesen werden.

Allerdings können trotzdem Trends in den Daten gefunden werden. Hierzu wurde ein Least-Square-Fit auf die Daten angewendet. Dabei wurde ein Trend, eine halbjährliche Schwingung (Amplitude und Phase) und eine jährliche Schwingung (Amplitude und Phase) an die Daten angepasst. Außerdem wurde bei der Anpassung noch ein Offset berücksichtigt.

Für die Fehleranalyse wurde die Bootstrap Methode verwendet. Diese Methode ist ein statistisches Analyseverfahren, wenn das Verhalten der Messung nicht genau bekannt ist. Dabei werden mit dem aktuellen Datensatz durch statistisches Umverteilen mehrere synthetische Datensätze erzeugt. Anschließend werden auf diese synthetischen Datensätze die gleichen Analyseverfahren angewendet, wie auf die Originaldaten. Zusätzlich wurden die Lücken in den Datensätzen zufällig über den Zeitraum verteilt und anschließend wieder die dadurch auftretenden

Fehler betrachtet. Damit ergeben sich statistisch signifikante Aussagen über die Ergebnisse.

Die Abbildungen 7.2 - 7.11 zeigen die zeitliche Entwicklung der gemessenen und abgeleiteten Produkte über den analysierten Messzeitraum. Dabei sind die grünen Kurven die wöchentlichen Mittel, die rote Kurve der angepasste Fit an die Daten und die schwarze Linie gibt den Trend an. Die einzelnen Kurven beziehen sich auf die Daten in 91 km Höhe am Äquator.

Außerdem wurden in den zweidimensionalen Abbildungen noch zusätzlich die Breiten- und Höhenabhängigkeit des Trends dargestellt. Dabei geben die Farbskalen die Größe des Trends über den Zeitraum von 5,5 Jahren in Prozent, bzw. bei der Heizungsrate in K/Tag, an. Der Zeitraum von 5,5 Jahren entspricht genau einem halben solaren Zyklus, d.h. dem Übergang vom solaren Maximum zum solaren Minimum. Die Größe der Punkte ist ein Maß für die Signifikanz. Sie wurde mit dem Kehrwert des Fehlers skaliert, d.h. große Punkte haben einen kleineren Fehler und sind somit vertrauenswürdiger.

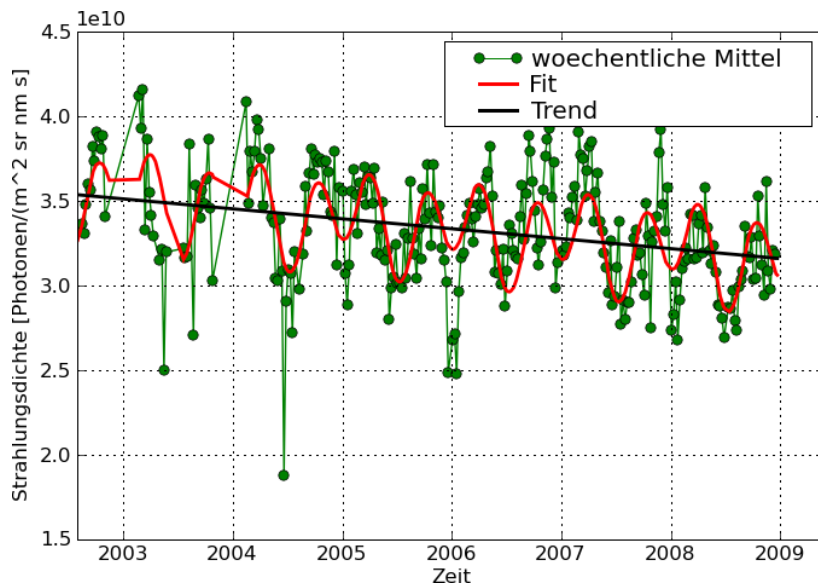
Abbildung 7.2 zeigt den Trend der Strahlungsdichte für den Wellenlängenbereich des Retrievals (1380 - 1400 nm) am Äquator. Dabei ist eindeutig eine abnehmende Tendenz der Strahlungsdichte in diesem Wellenlängenbereich zu erkennen. Allerdings fällt auch auf, dass die rote Kurve die grünen Punkte besonders im Maximum und Minimum schlecht anpasst. Dieser Effekt hat auf den Trend keinen Einfluss. So ist der Trend sehr robust gegenüber der Anpassung.

In Abbildung 7.3 ist nun der Trend der Strahlungsdichte als Breiten-Höhen-Querschnitt dargestellt. Die Punkte zwischen 20° S und 60° N haben den geringsten Fehler und sind damit signifikant. Der Trend liegt im gesamten Bereich zwischen 12 und 18 %/5,5 Jahre. Lediglich zwischen 86 km und 88 km und bei 80° N über den gesamten Höhenbereich gibt es einzelnen Punkte, die einen leicht geringeren Trend aufweisen. Bei 80° N gilt allerdings, dass dieses Breitenband nur selten abgedeckt wird, so dass dort weniger Messungen vorhanden sind (siehe auch Abbildung 3.4). Damit ist die Standardabweichung dieser Punkte auch

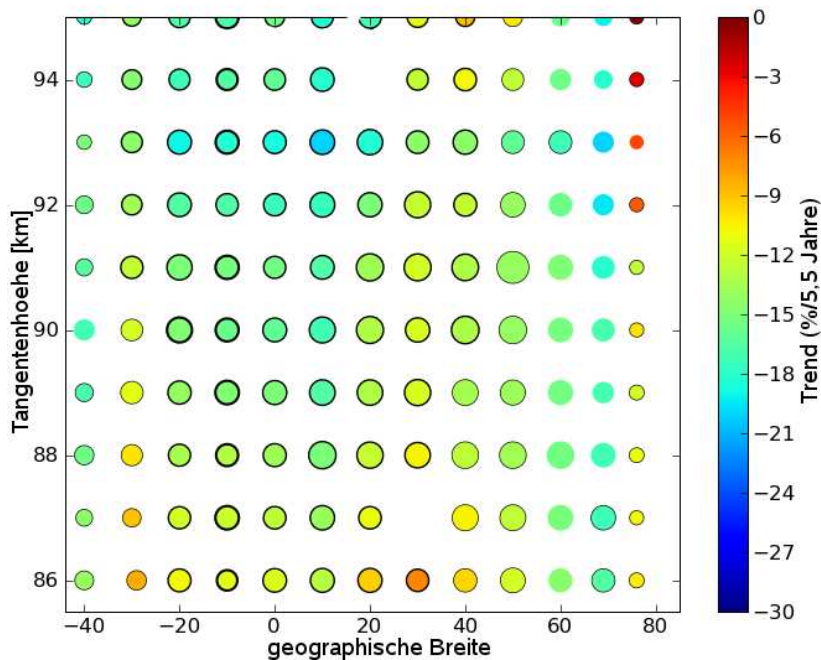
deutlich höher, als bei niedrigeren und mittleren Breiten. Das zeigen auch die kleinen Punkte. Grundsätzlich ist in dem kompletten Querschnitt ein negativer Trend für alle Breiten und Höhen zu erkennen.

Der Einfluss des solaren Zyklus in Emissionsmessungen der Mesopausenregion im infraroten Wellenlängenbereich mit einem bodengebundenen Spektrometer nahe Moskau wurde von Pertsev und Perminov (2008) untersucht. Emissionsintensitäten von OH(6,2) und O<sub>2</sub>(1,0) zeigen Änderungen des F10.7 Flusses von 30 - 40 % bezogen auf 100 solar flux units (sfu, 1 sfu =  $1 \cdot 10^{-22} \text{ W m}^{-2} \text{ Hz}^{-1}$ ) in den Intensitäten der Emissionen und ca. 4,5 K/100 sfu in Bezug auf Rotationstemperaturen von atomarem Wasserstoff auf. Es wird eine jahreszeitliche Variation beobachtet. D.h. die beobachteten Effekte können ohne Berücksichtigung der atmosphärischen Dynamik nicht erklärt werden.

Der Einfluss des solaren Zyklus auf die O(<sup>1</sup>S) Nightglow Emissionen in der unteren Thermosphäre wurde für die Jahre 1991 - 1997 von Liu und Shepherd (2008) untersucht. Die integrierten Emissionsraten von O(<sup>1</sup>S) zeigen eine lineare Korrelation mit dem solaren F10.7 Fluss.



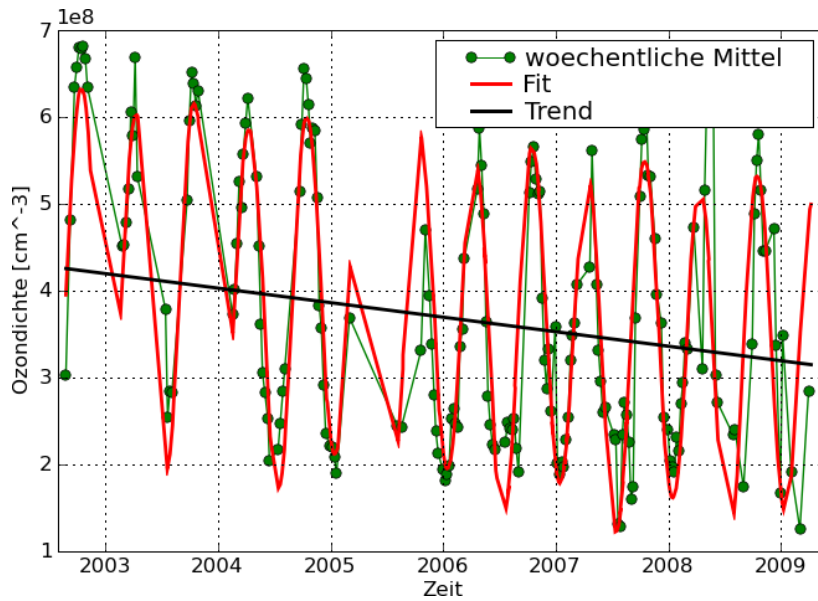
**Abbildung 7.2:** Zeitliche Entwicklung der wöchentlichen Mittel der Strahlungsdichte (grüne Kurve), des Fits an die Mittelwerte (rote Kurve) und des Trends (schwarze Kurve). Die Daten beziehen sich auf 91 km Höhe am Äquator.



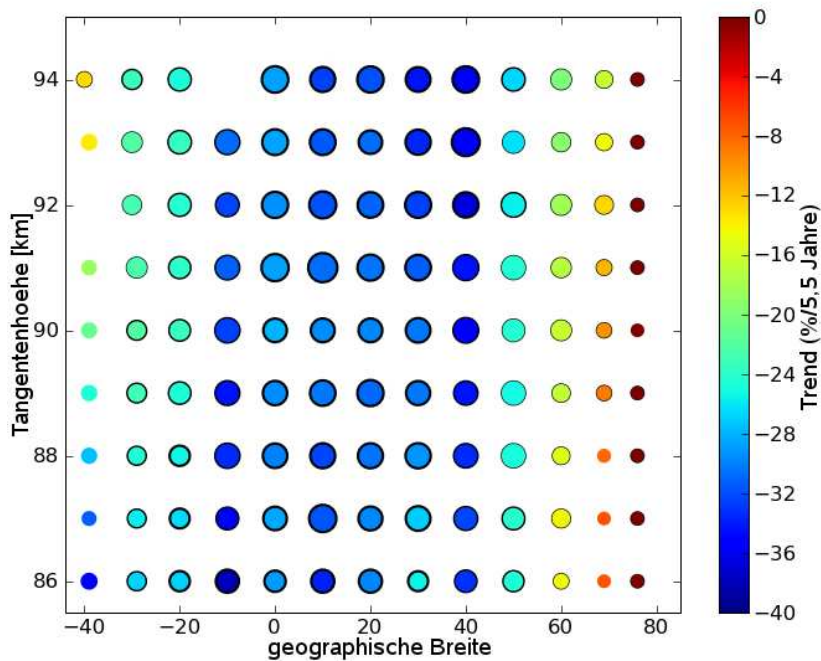
**Abbildung 7.3:** Breiten-Höhen-Querschnitt des Trends in der Strahlungsdichte über den Zeitraum von 2002 - 2009

Der nächste Parameter, der betrachtet werden soll ist das Ozon. Dabei handelt es sich um alle im Retrieval berücksichtigten GOMOS Messungen. D.h. es sind nicht die Originaldaten, sondern die gefilterten und auf die SCIAMACHY Geolokationen interpolierten Daten (Kapitel 3.3.3). Abbildung 7.4 zeigt die zeitliche Entwicklung der wöchentlichen Mittel und des Trends im Ozon. Diesmal ist die Anpassung der roten Kurve an die grünen Punkte deutlich besser. Es werden die Maxima und Minima getroffen und auch der gesamte zeitliche Verlauf folgt dieser Kurve. Auch in diesem Fall gibt die schwarze Linie einen negativen Trend in der Ozondichte an.

In Abbildung 7.5 ist der Breiten-Höhen-Querschnitt des Ozontrends über den Messzeitraum von 5,5 Jahren dargestellt. Dabei sind wieder die Daten zwischen  $20^{\circ}$  S und  $60^{\circ}$  N signifikant, was durch die großen Punkte symbolisiert ist. Der Trend liegt im Breitenintervall von  $10^{\circ}$  S und  $40^{\circ}$  N über den gesamten Höhenbereich zwischen -30 und -40 %/5,5 Jahre. In Richtung höherer Breiten nimmt die Stärke des Trend etwas ab und liegt um die -20 %/5,5 Jahre.



**Abbildung 7.4:** Zeitliche Entwicklung der wöchentlichen Mittel der Ozondichte (grüne Kurve), des Fits an die Mittelwerte (rote Kurve) und des Trends (schwarze Kurve). Die Daten beziehen sich auf 91 km Höhe am Äquator.



**Abbildung 7.5:** Breiten-Höhen-Querschnitt des Trends in der Ozondichte über den Zeitraum von 2002 - 2009



Als nächstes wird die zeitliche Entwicklung der atomaren Wasserstoffdichte betrachtet. Dies ist in Abbildung 7.6 dargestellt. Die Anpassung der roten Kurve weist auch in diesem Fall besonders bei den Maxima und Minima Abweichungen zu den grünen Punkten auf. Der Trend im atomarem Wasserstoff ist positiv. Dieses Verhalten war aufgrund der beiden vorher diskutierten Trends zu erwarten, da in erster Näherung gilt  $H * O_3 \approx OH$  und damit  $H \approx OH/O_3$ . D.h. der Trend sollte sich in diesem Fall umgekehrt zu dem von Ozon verhalten, der den der Strahlungsdichte überkompensiert.

Der Breiten-Höhen-Querschnitt des Trends im atomarem Wasserstoff über die 5,5 Jahre ist in Abbildung 7.7 dargestellt. Diesmal ergibt sich kein so homogenes Bild, sondern der Trend variiert stark mit den einzelnen Breitenbändern. Zwar sind auch diesmal die Breitenbereiche von  $10^\circ$  S und  $60^\circ$  N, ohne den Äquator, signifikant. Doch nur im Bereich von  $20^\circ$  N und  $40^\circ$  N gibt es einen starken positiven Trend von ca. 25 % über den gesamten Höhenbereich. Zwischen  $10^\circ$  S und  $40^\circ$  S ist der Trend in den unteren Höhen, d.h. zwischen 86 und 88 km, bzw. 89 km bei  $10^\circ$  S, in der gleichen Größenordnung. Die oberen Höhen weisen allerdings einen deutlich geringeren Trend von 10 - 15 % auf. Im Norden nimmt der Trend zu höheren Breiten ab und die Punkte weisen schon ab  $60^\circ$  N starke Unsicherheiten auf. Die Ausklammerung des Äquators deutet auf einen Effekt der Temperatur hin, da in diesem Bereich besonders starke Gezeiteneffekte vorliegen.

Die zeitliche Entwicklung der wöchentlichen Mittel und des Trends der Heizungsrate sind in Abbildung 7.8 dargestellt. Dabei werden die Minima und Maxima der wöchentlichen Mittel wieder teilweise schlecht durch die Anpassung wiedergegeben. Der Trend in der Heizungsrate ist über die 5,5 Jahre negativ.

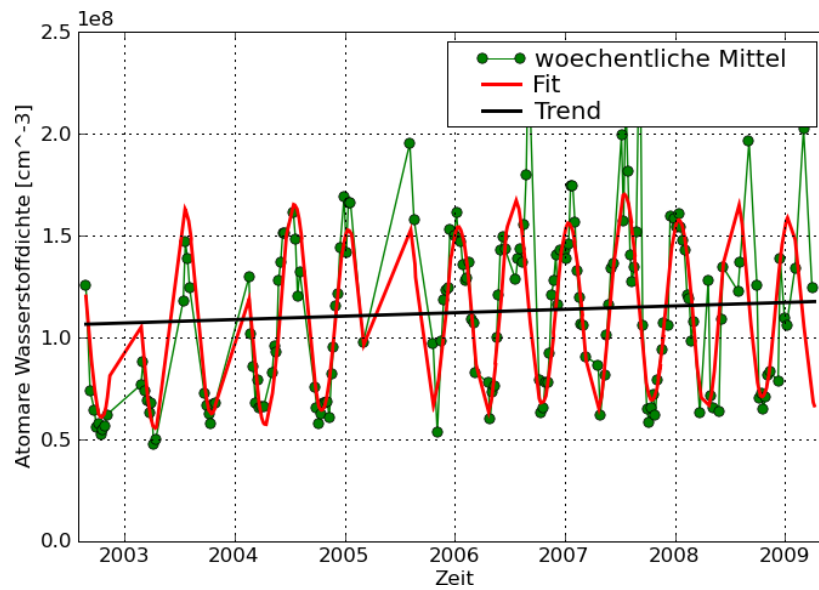
In Abbildung 7.9 ist der Breiten-Höhen-Querschnitt des Trends der Heizungsrate über die 5,5 Jahre gezeigt. Dabei wird ein ähnliches Verhalten wie bei atomarem Wasserstoff beobachtet. Die Trends unterscheiden sich stärker in Abhängigkeit von der Breite und der Höhe. Dabei findet sich der stärkste Trend zwischen  $10^\circ$  S und  $10^\circ$  N mit ungefähr 1 K/Tag. Allerdings haben die Punkte in diesem Inter-

vall diesmal nicht die kleinsten Fehler. Diese sind auf einzelne Punkte bei unterschiedlichen Höhen und Breiten begrenzt. Zu höheren Breiten nimmt der Trend ab, mit einem Minimum von ca. 0,6 K/Tag zwischen 20° S und 30° S bzw. 20° N und 30° N. Danach gibt es im Norden wieder eine Zunahme, besonders in den unteren Höhen. Allerdings nimmt auch die Unsicherheit der Punkte zu.

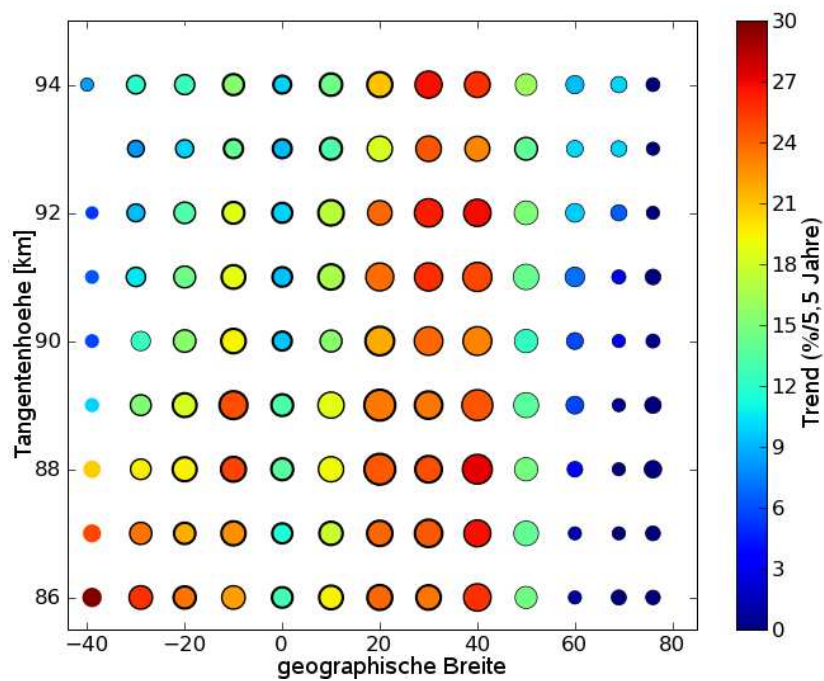
Die letzte hier betrachtete Größe ist der atomare Sauerstoff. In Abbildung 7.10 wird die zeitliche Entwicklung der wöchentlichen Mittel der atomaren Sauerstoffdichte, sowie der Trend in den Daten gezeigt. Dabei fällt auf, dass auch in diesem Fall die Minima und Maxima nicht gut angepasst werden. Der Trend über den gesamten Messzeitraum ist auch in dieser Größe negativ.

In Abbildung 7.11 ist der Breiten-Höhen-Querschnitt für den Trend im atomaren Sauerstoff über den Messzeitraum dargestellt. Diesmal zeigt sich kein einheitliches Bild für die Verteilung des Trends. Von 40° N bis zu hohen Breiten nimmt der Trend kontinuierlich ab und hat sein Minimum bei 70° N mit ca. 24 %. In den übrigen Breitenbereichen liegt der Trend bei ungefähr 10 % in den Höhen bis 90 km. Darüber ist er mit ca. 15 % etwas stärker.

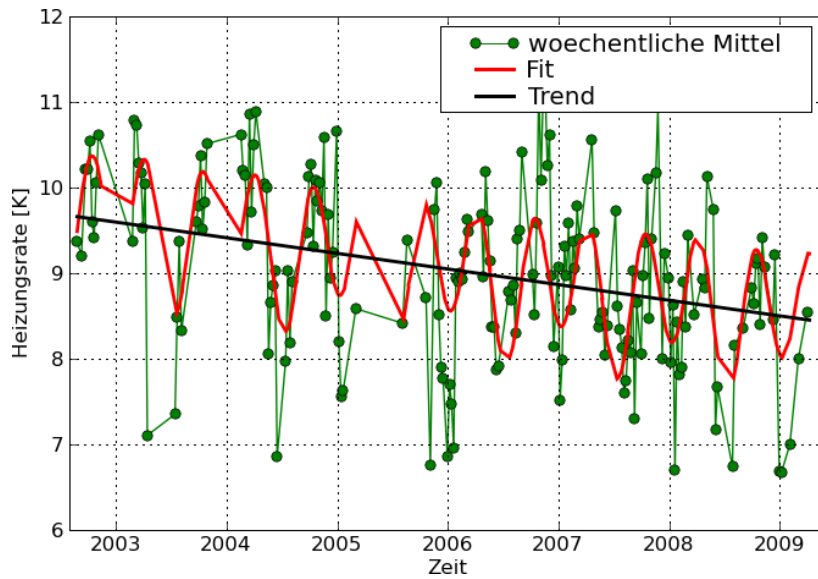
Die Bildung dieser Trends wird durch die chemische Rückkopplung der Atmosphäre auf die Reduzierung der solaren Einstrahlung hervorgerufen. So wird eine Abnahme im Ozon sowohl durch eine Abnahme bei den Produktionstermen als auch durch eine Zunahme bei den Verlusttermen erzeugt. Die Abnahme der Photolyserate von molekularem Sauerstoff im Schumann-Runge Kontinuum, entspricht dem Übergang von solaren Maximum Bedingungen zu solaren Minimum Bedingungen, reduziert den vorhandenen atomaren Sauerstoff und damit die Produktion von Ozon. Außerdem führt eine Abnahme im Lyman- $\alpha$  Fluss zu einer Zunahme des Wasserdampfes in der oberen Mesosphäre. Damit nimmt auch der atomare Wasserstoff in dieser Region zu.



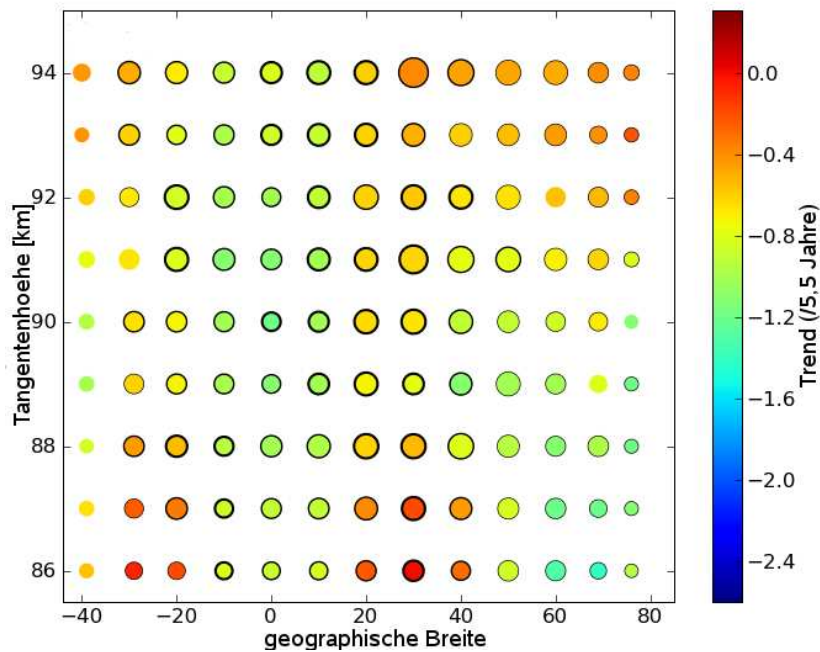
**Abbildung 7.6:** Zeitliche Entwicklung der wöchentlichen Mittel der atomaren Wasserstoffdichte (grüne Kurve), des Fits an die Mittelwerte (rote Kurve) und des Trends (schwarze Kurve). Die Daten beziehen sich auf 91 km Höhe am Äquator.



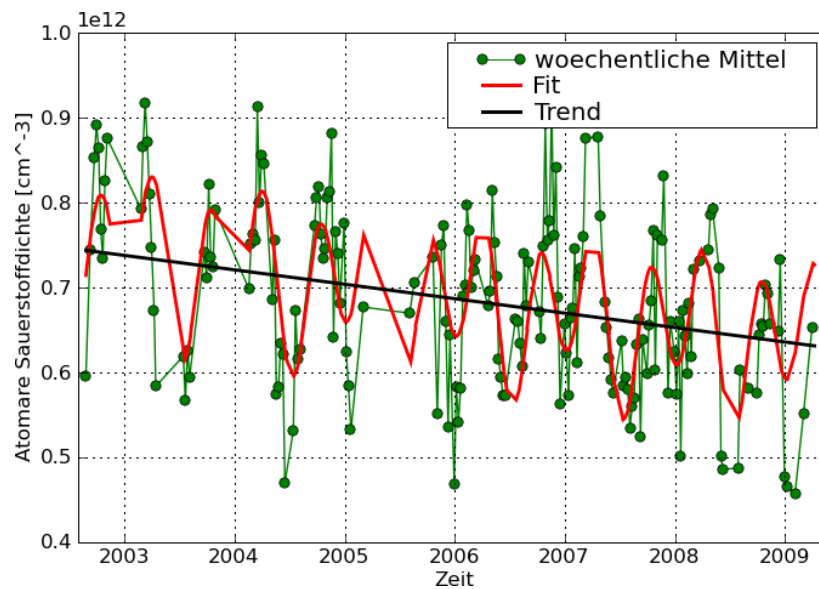
**Abbildung 7.7:** Breiten-Höhen-Querschnitt des Trends in der atomaren Wasserstoffdichte über den Zeitraum von 2002 - 2009



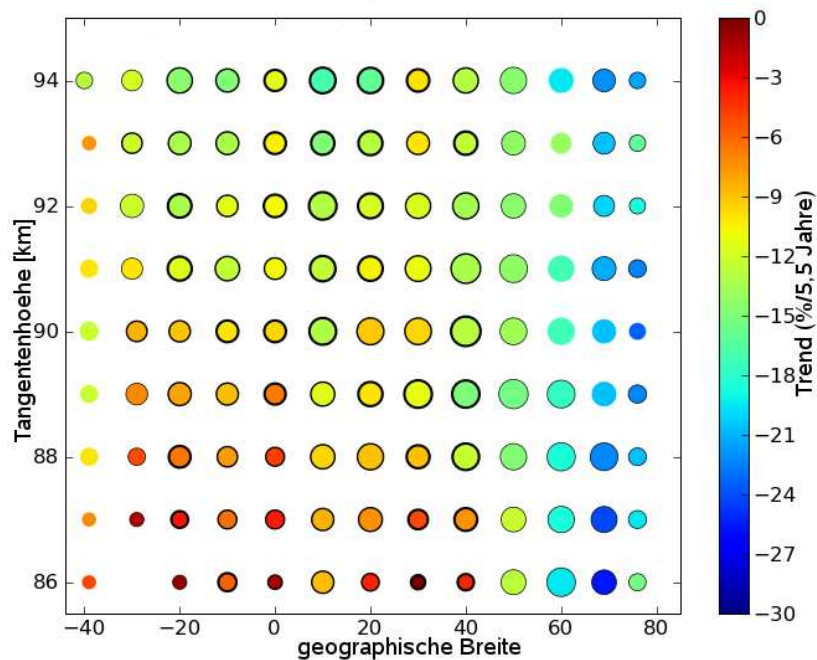
**Abbildung 7.8:** Zeitliche Entwicklung der wöchentlichen Mittel der Heizungsrate (grüne Kurve), des Fits an die Mittelwerte (rote Kurve) und des Trends (schwarze Kurve). Die Daten beziehen sich auf 91 km Höhe am Äquator.



**Abbildung 7.9:** Breiten-Höhen-Querschnitt des Trends in der Heizungsrate über den Zeitraum von 2002 - 2009



**Abbildung 7.10:** Zeitliche Entwicklung der wöchentlichen Mittel der atomaren Sauerstoffdichte (grüne Kurve), des Fits an die Mittelwerte (rote Kurve) und des Trends (schwarze Kurve). Die Daten beziehen sich auf 91 km Höhe am Äquator.



**Abbildung 7.11:** Breiten-Höhen-Querschnitt des Trends in der atomaren Sauerstoffdichte über den Zeitraum von 2002 - 2009

## 7.2 Solare Variationen in verschiedenen Atmosphärenmodellen

Um den Einfluss des solaren Zyklus auf die Atmosphäre und damit die Spurengase global zu untersuchen sind Atmosphärenmodelle nötig, da es bei früheren Messungen keine globale Abdeckung gab und die neueren Satelliteninstrumente noch keinen ganzen solaren Zyklus überdecken.

Eine Studie zu Einflüssen des solaren Zyklus wurde von Khosravi et al. (2002) mit dem SOCRATES Modell durchgeführt. Die Untersuchung wurde für drei verschiedene Szenarien unternommen. Zum einen für den Anstieg der Treibhausgase der vorindustriellen Zeit bis heute, für eine Verdopplung der CO<sub>2</sub> Konzentration in einer heutigen Atmosphäre und zuletzt für die natürlichen Schwankungen des 11-Jahres Zyklus der solaren Einstrahlung. Die Ergebnisse der letzten Studie sollen hier kurz wiedergegeben werden.

Die Effekte aufgrund der Abnahme im solaren Fluss vom Maximum zum Minimum führen zu einer deutlichen Abkühlung der Mesosphäre. Die Modellrechnungen ergeben eine Abkühlung von ca. 9 K in der oberen Mesosphäre. Zusätzlich zeigen die Ergebnisse eine Abhängigkeit der Abkühlung von den dynamischen Prozessen und Auswirkungen auf die chemische Zusammensetzung. So nimmt Ozon in der unteren Mesosphäre um 5 - 20 % und zwischen 70 und 80 km um 20 % zu. Diese Änderungen werden durch Änderungen im OH und H hervorgerufen, die ihrerseits durch die Zunahme im Wasserdampf beeinflusst werden. Schmidt et al. (2006) haben eine Studie des solaren Einflusses auf die obere Atmosphäre mit Hilfe des HAMMONIA (Hamburg Model of the Neutral and Ionized Atmosphere) Modells durchgeführt. Dabei wurden zwei Modellläufe über 20 Jahre gemacht, einer für Bedingungen des solaren Minimums (September 1986) und ein weiterer für Bedingungen des solaren Maximums (November 1989).

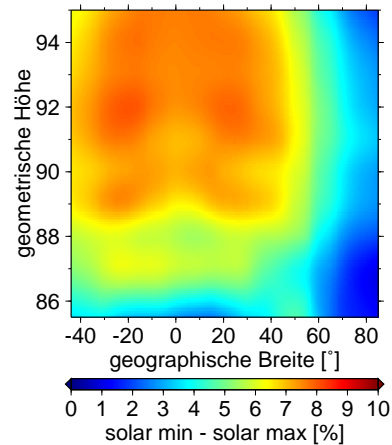
Die Abbildungen 7.12 und 7.13 basieren auf den Daten der Studie von Schmidt et al. (2006). Die folgenden Abbildungen zeigen die Differenzen zwischen dem

Modelllauf für solares Minimum und dem Modelllauf für solares Maximum als Breiten-Höhen-Querschnitte. In Abbildung 7.12 ist die Entwicklung für das Volumenmischungsverhältnis von atomarem Wasserstoff dargestellt. Die von HAMMONIA simulierte Breiten-Höhenverteilung des Trends stimmt qualitativ gut mit den SCIAMACHY Beobachtungen überein (Abbildung 7.7). Beide Datensätze zeigen einen starken positiven Trend in äquatorialen Breiten und einen deutlich geringeren Trend bei hohen nördlichen Breiten. Quantitativ ist die Übereinstimmung nördlich von 60 Grad gut (positiver Trend von 3 %), im übrigen Breitenintervall werden die Trends von HAMMONIA jedoch deutlich gegenüber der Messung unterschätzt. So beträgt die Zunahme im atomarem Wasserstoff oberhalb von 88 km zwischen 40° S und 40° N zwischen 6 % und 9 %. Bei SCIAMACHY liegt der Trend in den atomaren Wasserstoffdichten in diesem Bereich bei ca. 15 %. Außerdem weisen die SCIAMACHY Messungen zwischen 20° N und 40° N über das komplette Höhenintervall einen starken Trend von 25 % in den atomaren Wasserstoffdichten auf. Auch beim Vergleich der langfristigen Variationen im Ozon gibt es quantitative Übereinstimmungen der HAMMONIA Simulationen mit den SCIAMACHY Beobachtungen (Abbildung 7.5). In beiden Datensätzen findet sich ein negativer Trend nördlich von 60° N von ca. 4%. Im übrigen Breitenbereich werden die Trends von HAMMONIA gegenüber der Messung unterschätzt. So liegt bei SCIAMACHY der Trend zwischen 40° S und 40° N über das komplette Höhenintervall im Bereich von 20 % bis 30 % und bei HAMMONIA nur bei ca. 5 %. Außerdem ist der Trend bei HAMMONIA in dem Breitenbereich zwischen 40° S und 40° N unterhalb von 88 km mit ca. 3 % nochmal etwas geringer gegenüber SCIAMACHY.

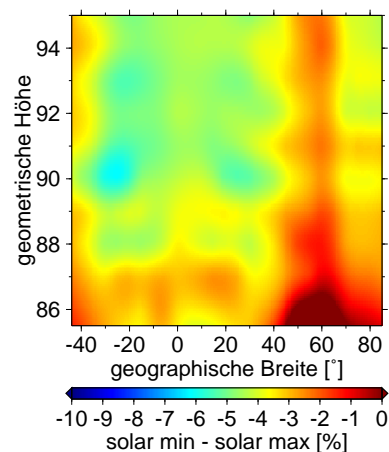
Eine weitere Studie existiert von Marsh et al. (2007) mit Hilfe des WACCM3 (Whole Atmosphere Community Climate Model, version 3) Modells. Mit diesem Modell wurden zwei Modellläufe über 30 Jahre mit konstantem solarem und geomagnetischem Antrieb für typische Bedingungen unter solarem Minimum und solarem Maximum gerechnet. Der Einfluss auf die Region der Mesosphäre und

Thermosphäre entspricht dem aus der Studie von Schmidt et al. (2006) mit dem HAMMONIA Modell.

Qualitativ stimmen die Trends in den verschiedenen Atmosphärenmodellen also mit den Trends in den Beobachtungen von SCIAMACHY überein. Allerdings sind die Modellprognosen geringer als die tatsächlich beobachteten.



**Abbildung 7.12:** Langfristige Variationen im atomaren Wasserstoff simuliert mit HAMMONIA. Dargestellt ist die Differenz für einen Modelllauf mit Bedingungen des solaren Minimums und einen mit Bedingungen des solaren Maximums.



**Abbildung 7.13:** Langfristige Variationen im Ozon simuliert mit HAMMONIA. Dargestellt ist die Differenz für einen Modelllauf mit Bedingungen des solaren Minimums und einen mit Bedingungen des solaren Maximums.



# Kapitel 8

## Wellenanalyse

Neben saisonalen oder langfristigen Variationen der Atmosphäre, wie z.B. der solare Zyklus, spielen auch globalskalige Wellen mit Periodendauern im Bereich von mehreren Tagen bis zu einem Monat eine wichtige Rolle in der Atmosphäre. Vor allem zur Erklärung von dynamischen Phänomenen wie die beobachtete saisonale Windumkehr in der Mesosphäre (Fritts und Alexander (2003)), oder den Zusammenbruch des Polarwirbels von oben in der Mesosphäre (z.B. Duck und Whiteway (2000)) sind sowohl mesoskalige Schwerewellen als auch globalskalige Wellen von großer Bedeutung.

Die beobachteten planetaren Wellen in der Mesosphäre/ unteren Thermosphäre können in drei Klassen eingeteilt werden. Zum einen gibt es starke Gezeitensignale mit Perioden von einem Tag oder kürzer. Die zweite Klasse sind Äquatorwellen im Bereich  $20^{\circ}$  S -  $20^{\circ}$  N. Bei den beobachteten Äquatorwellen handelt es sich meistens um ostwärts wandernde Kelvinwellen mit Periodendauern zwischen etwa 10 Tagen und 1 - 2 Tagen. Allerdings können in den Tropen und Subtropen auch westwärts wandernde Rossby-Schwerewellen mit Perioden im Bereich 1,5 - 2,5 Tage und zonalen Wellenzahlen 1 und 2 beobachtet werden. Die dritte Klasse beinhaltet längerperiodische Wellen, die hauptsächlich bei mittleren und hohen Breiten beobachtet werden. Bei dieser Klasse werden die beobachteten Perioden in vier verschiedenen Intervallen jeweils einer Welle zugeordnet.

Das erste Intervall erstreckt sich von 1,9 - 2,2 Tagen, die sogenannte 2-Tage-Welle. Das zweite Intervall geht von 4 - 7 Tagen und misst die 5-Tage-Welle. Das dritte Intervall liegt zwischen 8 - 11 Tagen und wird als 10-Tage-Welle bezeichnet. Das vierte Intervall erstreckt sich von 11 - 22 Tagen und wird 16-Tage-Welle genannt. Quasi-2-Tage-Wellen werden hauptsächlich als westwärts wandernde Wellen mit zonaler Wellenzahl 3 beobachtet. Dieser Wellenmode wird oft dem (3,0) Rossby-Normalmode der Atmosphäre zugeordnet, d.h. einer Eigenschwingung der Atmosphäre. Quasi-2-Tage-Wellen sind ein Phänomen der Sommerhemisphäre der Mesosphäre. Allerdings können sie sich auch in der Mesopausenregion und oberhalb über den Äquator hinaus ausbreiten. Die 5-Tage-Welle, 10-Tage-Welle und 16-Tage-Welle wandern westwärts mit zonaler Wellenzahl 1. Sie werden den (1,1), (1,2) und (1,3) Rossby Normalmoden der Atmosphäre zugeordnet.

Die Beobachtung globaler Wellen mit Satelliten bringt gegenüber bodengebundener Beobachtungen den Vorteil, dass die gesamte räumliche Struktur der Welle analysiert werden kann. Außerdem können durch das globale Bild der Wellenaktivität die beteiligten physikalischen Prozesse besser verstanden werden.

Ein Problem in der Beobachtung vom Satelliten aus liegt allerdings in dem asynoptischen Messgitter (Salby (1982a), Salby (1982b)). Deshalb wurden spezielle Methoden entwickelt, um Raum-Zeit-Spektren von asynoptisch gesampelten Daten zu erhalten. In Raum-Zeit-Fourier-Spektren können die verschiedenen Wellenmoden aufgrund ihrer charakteristischen Frequenzen und zonalen Wellenzahlen identifiziert werden.

## 8.1 Beschreibung der Methode

Für die Ableitung von Raum-Zeit-Spektren von asynoptisch abgetasteten Satellitendaten wird die Methode von Ern et al. (2008) angewendet. Dabei werden die Daten in Breiten- und Höhen-Bereiche eingeteilt. Für die so erhaltenen Längen-Zeit-Serien für jeden Bereich wird dann eine zwei-dimensionale Fourier-

transformation durchgeführt. Damit ergeben sich zonale Wellenzahl/ Frequenz Spektren. Aufgrund der asynoptisch abgetasteten Satellitendaten kann eine zwei-dimensionale schnelle Fouriertransformation (engl. Fast Fourier Transformation (FFT)) nicht angewendet werden (Salby (1982a), Salby (1982b)). In dieser Analyse (Ern et al. (2009)) wird die Methode der kleinsten Quadrate benutzt, um Amplituden und Phase der unabhängigen Raum-Zeit Fourierkoeffizienten für jeden Breite-/ Höhe-Bereich zu erhalten, ähnlich der Methode von Wu et al. (1995).

Die Methode der kleinsten Quadrate ist eine traditionelle Methode für spektrale Analyse und hat zwei Vorteile gegenüber anderen statistischen Verfahren. Zum einen funktioniert sie mit ungleichmäßig abgetasteten Gitterpunkten und zum anderen gibt sie eine Fehlerabschätzung für das resultierende Spektrum an. Die Beschreibung dieser Methode erfolgte von Lomb (1976) und Scargle (1982).

In atmosphärischen Anwendungen können die Koeffizienten einer Welle mit Frequenz  $\sigma$  (Tage<sup>-1</sup>) und Wellenzahl  $s$  durch anpassen eines Modells folgender Form

$$y_i = A \cos [2\pi (\sigma t_i + s \lambda_i)] + B \sin [2\pi (\sigma t_i + s \lambda_i)] \quad (8.1)$$

an die Daten gefunden werden. Dabei werden die Raum-Zeit-Serien  $y_i$ ,  $i=1, \dots, N$ , zur Zeit  $t_i$  (Tage) bei der geographischen Länge  $\lambda_i$  (bezogen auf 360°) mit der Unsicherheit  $\epsilon_i$  gemessen. Die Anpassung erfolgt über die Parameter  $A$  und  $B$ . Für jede einzelne Anpassung werden Frequenz  $\sigma$  und zonale Wellenzahl  $s$  fest vorgegeben und als Resultat erhält man schließlich Raum-Zeit-Spektren in Abhängigkeit von zonaler Wellenzahl und Frequenz.

$$R^2(\sigma, s) = \hat{A}^2(\sigma, s) + \hat{B}^2(\sigma, s) \quad (8.2)$$

mit

$$\hat{A}^2(\sigma, s) = \frac{\sum_{i=1}^N \frac{1}{\epsilon_i^2} y_i \cos(2\pi(\sigma t_i + s \lambda_i) - \tau)}{\sum_{i=1}^N \frac{1}{\epsilon_i^2} \cos^2(2\pi(\sigma t_i + s \lambda_i) - \tau)} \quad (8.3)$$

$$\hat{B}^2(\sigma, s) = \frac{\sum_{i=1}^N \frac{1}{\epsilon_i^2} y_i \sin(2\pi(\sigma t_i + s \lambda_i) - \tau)}{\sum_{i=1}^N \frac{1}{\epsilon_i^2} \sin^2(2\pi(\sigma t_i + s \lambda_i) - \tau)} \quad (8.4)$$

$$\tau \equiv \frac{1}{2} \tan^{-1} \left[ \frac{\left( \sum_{i=1}^N \frac{1}{\epsilon_i^2} \sin(4\pi(\sigma t_i + s\lambda_i)) \right)^2}{\left( \sum_{i=1}^N \frac{1}{\epsilon_i^2} \cos(4\pi(\sigma t_i + s\lambda_i)) \right)^2} \right] \quad (8.5)$$

Sowohl  $t_i$  als auch  $\lambda_i$  können in diesen Gleichungen ein unregelmäßiges Gitter besitzen.

Um zeitliche Änderungen der Raum-Zeit-Spektren zu untersuchen, wird der gesamte Datensatz in sich nicht überlappende Zeitfenster unterteilt und für jedes Fenster eine Raum-Zeit-Fourier-Analyse durchgeführt. Ein Zeitfenster überdeckt jeweils 31 Tage. Diese Länge ist ein Kompromiss zwischen der erwarteten zeitlichen Variation und der spektralen Auflösung (Ern et al. (2009)).

Im Gegensatz zu Ern et al. (2008) werden keine symmetrischen und antisymmetrischen Spektren, bezogen auf den Äquator, berechnet, sondern die spektrale Analyse wird für jede Breite und Höhe ohne Mittelung, wie sie bei der Bestimmung von symmetrischen und antisymmetrischen Spektren automatisch erfolgt, angewendet.

## 8.2 Wellen in SCIAMACHY und SABER-Daten

Die Raum-Zeit-Spektralanalyse wird für die aus den SCIAMACHY Messungen abgeleiteten Heizungsdaten durchgeführt. Die Orbitgeometrie des Envisat Satelliten erlaubt eine Auflösung durch die asynoptische Abtastung von zonaler Wellenzahl bis zu 6 - 7 und Frequenzen bis zu 1 Schwingung/Tag. Da von den SCIAMACHY Daten nur die nächtlichen Daten und damit der aufsteigende Knoten verwendet werden (siehe Kapitel 3.3.2), können in dieser Analyse nur Frequenzen bis zu 0,5 Schwingungen/Tag aufgelöst werden. Das Breitenband der verfügbaren "Nightglow" Daten variiert je nach Jahreszeit, so dass kein reguläres Messgitter vorliegt. Zusätzlich wird die spektrale Analyse durch eine Anzahl von Datenlücken und Rauschen erschwert. Deshalb werden die Raum-Zeit-Spektren für Fluktuationen der Heizungsrate zwischen 50° S und 80° N in 10° Schritten berechnet. Die Fluktuationen der Heizungsrate ergeben sich durch Subtraktion

des Medians.

Der zweite Datensatz für die Analyse sind SABER Temperaturen der Datenversion 1.06 (E. et al. (2003)). In diesem Fall werden die Raum-Zeit-Spektren für die Fluktuationen der Temperatur zwischen 80° S und 80° N in 4° Schritten berechnet. Die Orbitgeometrie des TIMED Satelliten erlaubt ebenfalls eine Auflösung zonaler Wellenzahlen bis zu 6 - 7 Wellenzahlen und 1 Schwingung/Tag. Die SABER Temperaturen werden aus der Emission der 15  $\mu\text{m}$  CO<sub>2</sub> Bande abgeleitet. Sie stehen sowohl für den aufsteigenden als auch für den absteigenden Knoten zur Verfügung und somit können hier Frequenzen von 1 Schwingung/Tag auch tatsächlich aufgelöst werden.

In den Abbildungen 8.1, 8.3 und 8.6 werden über den gesamten Zeitraum, von August 2002 bis Dezember 2006, gemittelte Raum-Zeit-Spektren für verschiedene Breiten in einer Höhe von 87 km von SCIAMACHY und SABER verglichen, um die wichtigsten atmosphärischen Wellentypen in der Mesopausenregion zu identifizieren.

Auch in diesem Fall wurden die Daten vor der eigentlichen Analyse nochmal gefiltert. Dabei wurden zuerst für jeden Parameter alle Messungen die von der erwarteten Messgröße um mehr als den Faktor zehn abweichen eliminiert. Es wurde dabei beachtet, dass mindestens 70 % der Daten erhalten bleiben, d.h. mindestens an 22 Tagen liegen in dem 31-Tage Fenster Daten vor. Anschließend wurde der Median berechnet und nur Werte im Intervall  $\pm 2$ \*Standardabweichung zur weiteren Analyse verwendet. Die Medianberechnung und anschließende Filterung anhand des Sigmakriteriums wurde iterativ mehrmals hintereinander durchgeführt. Damit ist gewährleistet, dass die Ergebnisse eine realistische Aussage über das Verhalten der Atmosphäre geben können.

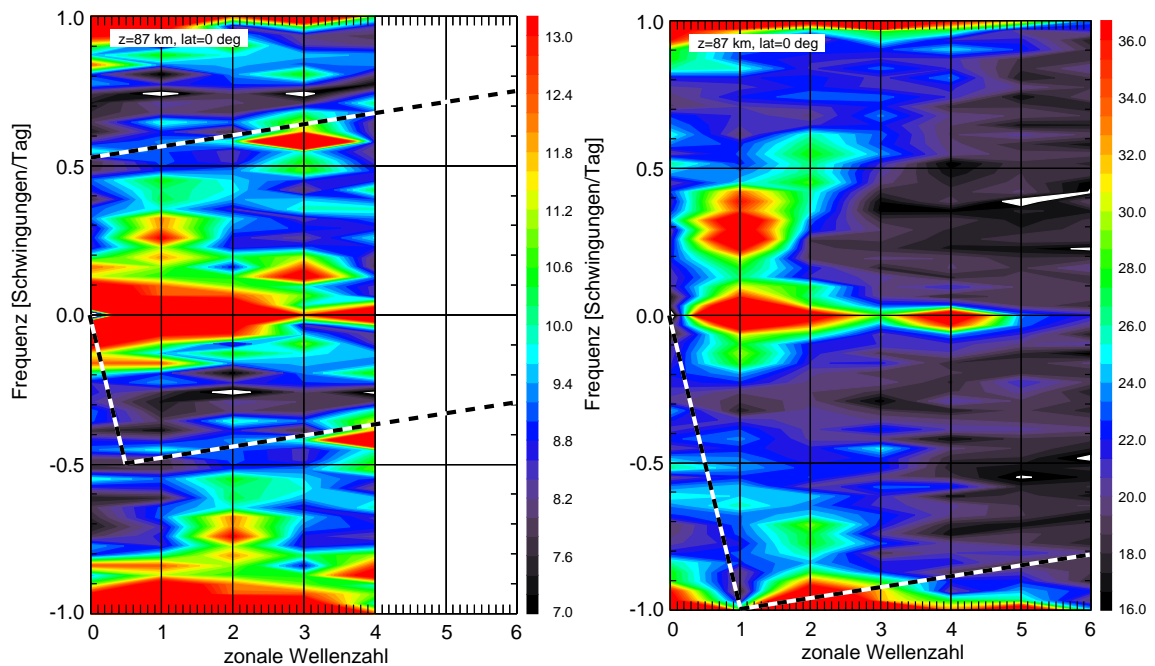
In Abbildung 8.1 sind die über den gesamten Zeitraum von 2002 - 2006 gemittelten Raum-Zeit-Spektren am Äquator für Fluktuationen der SCIAMACHY Heizungsrate (links) und Fluktuationen der SABER Temperatur (rechts) dargestellt. Positive Frequenzen bezeichnen ostwärts wandernde Wellen und negative Fre-

quenzen westwärts wandernde.

Beide Spektren zeigen die stärksten spektralen Komponenten bei 0 und  $\pm 1$  Schwingung/Tag. Diese Komponenten gehören zu stationären planetaren Wellen und Gezeiten und ebenso zu ihren Aliaseffekten, die periodisch verschoben mit einer zonalen Wellenzahl und 1 Schwingung/Tag auftreten. In dem SCIAMACHY Spektrum sind diese spektralen Komponenten dominierender, verglichen mit dem SABER Spektrum. Dies kann daran liegen, dass SCIAMACHY immer zu einer festen Lokalzeit misst und so eventuell immer eine hohe Gezeitenamplitude sieht, während bei SABER aufgrund der Bahnpräzession über alle Phasen gemittelt wird. Da das SCIAMACHY Messgitter nur auf dem aufsteigenden Bahnknoten beruht und es außerdem eine Anzahl von Datenlücken gibt, kommt es durch diese dominanten Spektralampplituden verstärkt zu spektralen Artefakten, Aliasing und Leakage. Insbesondere auch bei hohen zonalen Wellenzahlen, wo man keine größeren Spektralbeiträge erwarten würde. Um die Übersichtlichkeit zu erhöhen und den Leser nicht von den in den Daten vorhandenen realen Spektralsignaturen abzulenken, wurden die SCIAMACHY Spektren daher bei der zonalen Wellenzahl 4 abgeschnitten.

Neben dem starken Beitrag durch stationäre planetare Wellen und Gezeiten finden sich in beiden Spektren starke spektrale Signaturen bei zonaler Wellenzahl 1 und Frequenzen zwischen 0,2 und 0,4 Schwingungen/Tag, d.h. Perioden zwischen 2,5 und 5 Tagen. Diese spektrale Signatur kann äquatorialen Kelvinwellen zugeordnet werden. In der unteren Stratosphäre haben die beobachteten Kelvinwellen längere Perioden von über 10 Tagen und höhere zonale Wellenzahlen (Ern et al. (2008)). Allerdings verschiebt sich der Peak der Kelvinwellen mit der Höhe zu höheren Frequenzen und niedrigerer zonaler Wellenzahl (Garcia et al. (2005)). Perioden zwischen 2 und 5 Tagen wurden auch in anderen Untersuchungen (z.B. Salby et al. (1984), Garcia et al. (2005)) gefunden.

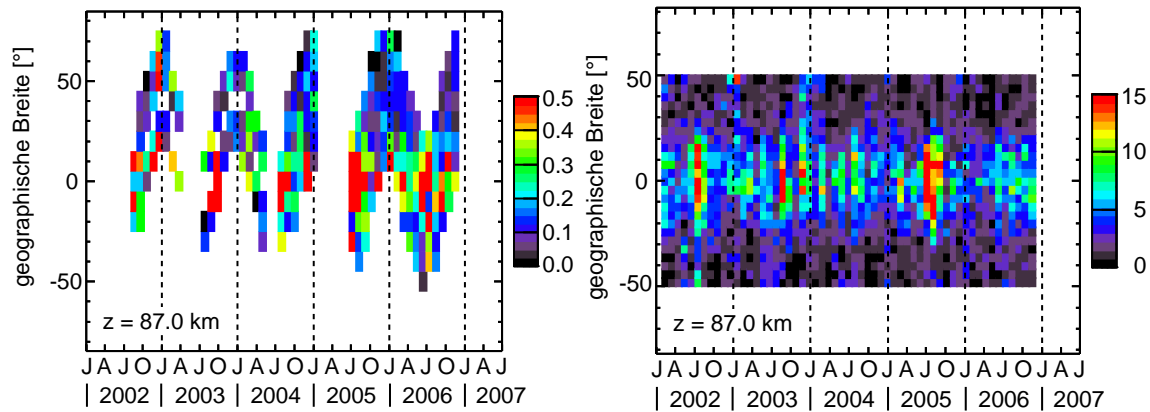
Die zeitliche Breitenverteilung der Varianzen aufgrund von Kelvinwellen ist in Abbildung 8.2 für SCIAMACHY Heizungsraten (links) und SABER Temperatur



**Abbildung 8.1:** Gemittelte Raum-Zeit-Spektren über den Zeitraum 2002 - 2006 von SCIAMACHY Heizungsraten in K/Tag/Wellenzahl/Schwingungen/Tag (links) und SABER Temperaturen in K/Wellenzahl/Schwingungen/Tag (rechts) in 87 km Höhe am Äquator. Positive Frequenzen bezeichnen ostwärts wandernde Wellen und negative Frequenzen westwärts wandernde. Der Frequenzbereich, der durch die Abtastung von SCIAMACHY und SABER aufgelöst werden kann ist in Bezug zu den zonalen Wellenzahl-Frequenzkoordinaten gedreht. Die Grenzen dieser Rechtecke sind durch die schwarz-weiß gestrichelten Linien dargestellt. Aufgrund der Beschränkung auf die Nachtdaten bei SCIAMACHY ist der aufgelöste Frequenzbereich halb so groß wie bei SABER.

(rechts) in 87 km Höhe gezeigt.

Die Varianzen der Welle ergeben sich aus den einzelnen 31 Tage Raum-Zeit-Analysen durch Anwendung eines Bandpassfilters für zonale Wellenzahl 1 und Frequenzen zwischen 0,1 und 0,4 Schwingungen/ Tag (Perioden zwischen 2,5 und 5 Tagen), d.h. für die Position des Peaks der Kelvinwelle aus Abbildung 8.1. Der Median des spektralen Hintergrundes (bestimmt von zonalen Wellenzahlen  $> 2$ ) aufgrund von durch die Satellitenabtastung nicht aufgelösten mesoskali-gen Schwerewellen, spektralen Artefakten und Messrauschen ist bei beiden Da-



**Abbildung 8.2:** Varianzen durch Kelvinwellen abgeleitet aus Raum-Zeit-Spektren der SCIAMACHY Heizungsrate in  $K^2/\text{Tag}^2$  (rechts) und SABER Temperaturen in  $K^2$  (links) in 87 km

tensätzen abgezogen worden, um die spektralen Varianzen des hier diskutierten Wellentyps besser hervorzuheben (siehe auch Ern et al. (2008)).

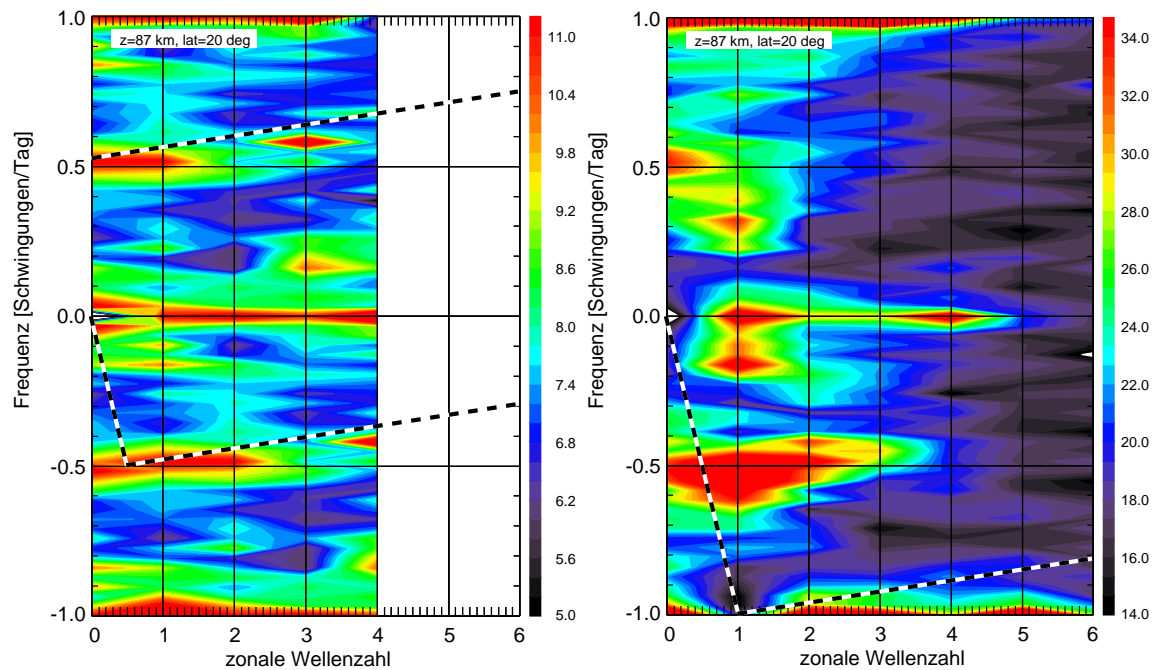
Die Verteilung der SCIAMACHY und SABER Varianzen zeigt wie erwartet hohe Kelvinwellenvarianz im Bereich zwischen  $20^\circ$  S und  $20^\circ$  N.

In Abbildung 8.3 werden die Raum-Zeit-Spektren von SCIAMACHY (a) und SABER (b) nun für  $20^\circ$  N betrachtet. Die spektralen Muster der stationären planetaren Wellen und der Gezeiten sind auch hier sichtbar. Außerdem gibt es ein starkes Signal im SABER Spektrum bei zentraler Wellenzahl 1 - 2 und Frequenzen von -0,5 Schwingungen/Tag. Bei 0,5 Schwingungen/Tag sind die Amplituden ebenfalls sichtbar, aber deutlich schwächer. Damit herrschen im Mittel in dieser Höhe westwärts wandernde Wellen mit zentraler Wellenzahl 1 und 2 und Perioden von 2 Tagen und kürzer vor. Da dieser Peak nur in den Subtropen auftritt, weist er auf äquatoriale Rossby-Schwerewellen hin.

Bei Rossby-Schwerewellen handelt es sich um einen antisymmetrischen äquatorialen Wellentyp mit einem Minimum der Amplitude am Äquator, einem Maximum der Amplitude in den Tropen und Subtropen und wieder abnehmender Amplitude zu hohen Breiten.

Abbildung 8.4 zeigt rechts die SABER Varianzen aufgrund von Rossby-Schwerewellen, durch Anwendung eines Bandpassfilters für zonale Wellenzahl

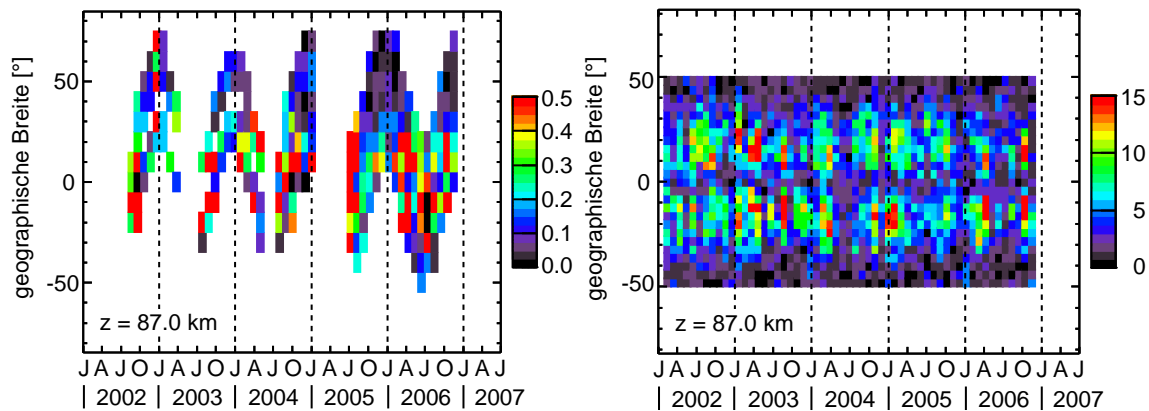




**Abbildung 8.3:** Gemittelte Raum-Zeit-Spektren über den Zeitraum 2002 - 2006 von SCIAMACHY Heizungsraten in K/Tag/Wellenzahl/Schwingungen/Tag (rechts) und SABER Temperaturen K/Wellenzahl/Schwingungen/Tag (links) in 87 km Höhe bei 20° N. Positive Frequenzen bezeichnen ostwärts wandernde Wellen und negative Frequenzen westwärts wandernde. Der Frequenzbereich, der durch die Abtastung von SCIAMACHY und SABER aufgelöst werden kann ist in Bezug zu den zonalen Wellenzahl-Frequenzkoordinaten gedreht. Die Grenzen dieser Rechtecke sind durch die schwarz-weiß gestrichelten Linien dargestellt. Aufgrund der Beschränkung auf die Nachtdaten bei SCIAMACHY ist der aufgelöste Frequenzbereich halb so groß wie bei SABER.

1 und Frequenzen zwischen -0,4 und -0,7 Schwingungen/Tag (Perioden von 1,4 bis 2,5 Tagen). Die erwartete Breitenverteilung mit Maxima bei 20° S und 20° N ist klar zu erkennen.

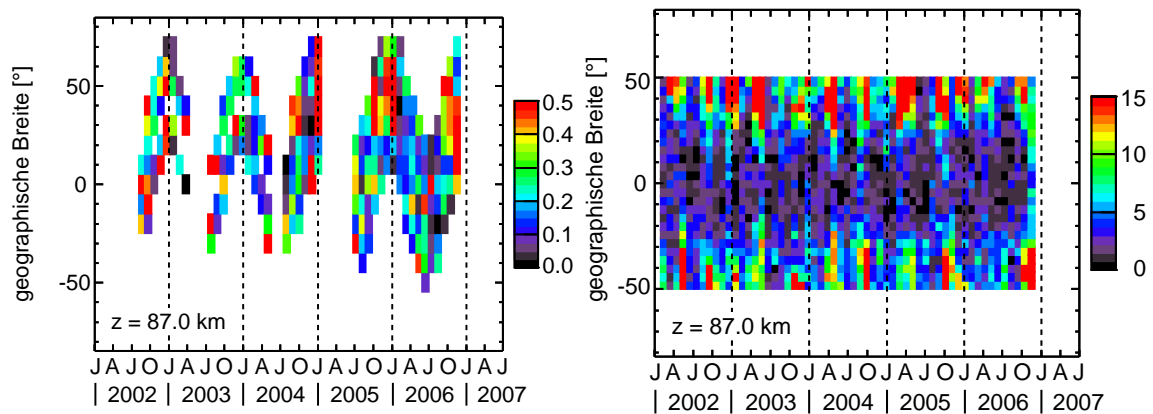
In dem Raum-Zeit-Spektrum von SCIAMACHY (Abbildung 8.3 (links)) ist diese Signatur ebenfalls vorhanden. Da allerdings nur Frequenzen bis 0,5 Schwingungen/Tag aufgelöst werden können, kann aus diesem Spektrum alleine die Ausbreitungsrichtung nicht angegeben werden (Ern et al. (2009)). Auch in den Varianzen von SCIAMACHY kann die charakteristische Breitenverteilung ge-



**Abbildung 8.4:** Varianzen durch Rossby-Schwerewellen abgeleitet aus Raum-Zeit-Spektren der SCIAMACHY Heizungsraten in  $K^2/\text{Tag}^2$  (links) und SABER Temperaturen in  $K^2$  (rechts) in 87 km

funden werden. Allerdings sind in diesem Fall die Daten deutlich verrauschter gegenüber SABER. Ähnliche Ergebnisse für Rossby-Schwerewellen wurden auch in anderen Studien (Garcia et al. (2005)) gefunden.

Beide Spektren zeigen zudem Anzeichen für eine westwärts wandernde Welle mit zonaler Wellenzahl 1 und Perioden zwischen 5 und 10 Tagen. Zusätzlich kann im SABER Spektrum noch die Signatur der Kelvinwellen bei zonaler Wellenzahl 1 und Frequenzen zwischen 0,2 und 0,5 Schwingungen/Tag gefunden werden. Diese Signatur ist in dem SCIAMACHY Spektrum nicht mehr sichtbar. Zum Schluss werden jetzt die Raum-Zeit-Spektren bei  $40^\circ$  N betrachtet (Abbildung 8.6). Auch in diesem Fall sind die starken Signaturen der stationären planetaren Wellen und Gezeiten bei Frequenzen von 0,2 und 0,4 Schwingungen/Tag sichtbar. Die Amplitude der Rossby-Schwerewellen hat sich im SABER Spektrum stark abgeschwächt und ist im SCIAMACHY Spektrum komplett verschwunden. Ebenso sind in beiden Spektren keinerlei Anzeichen mehr für Kelvinwellen zu erkennen. Im Gegensatz dazu gibt es in beiden Spektren einen neuen spektralen Peak mit zonaler Wellenzahl 1 - 2 und Frequenzen zwischen -0,2 und 0 Schwingungen/ Tag. Dieser Spektralbeitrag wird durch langperiodische planetare (Rossby) Wellen mit Perioden von 5 - 30 Tagen hervorgerufen. Die Varianzen aufgrund von Rossbywellen werden durch Anwendung eines Bandpassfilters



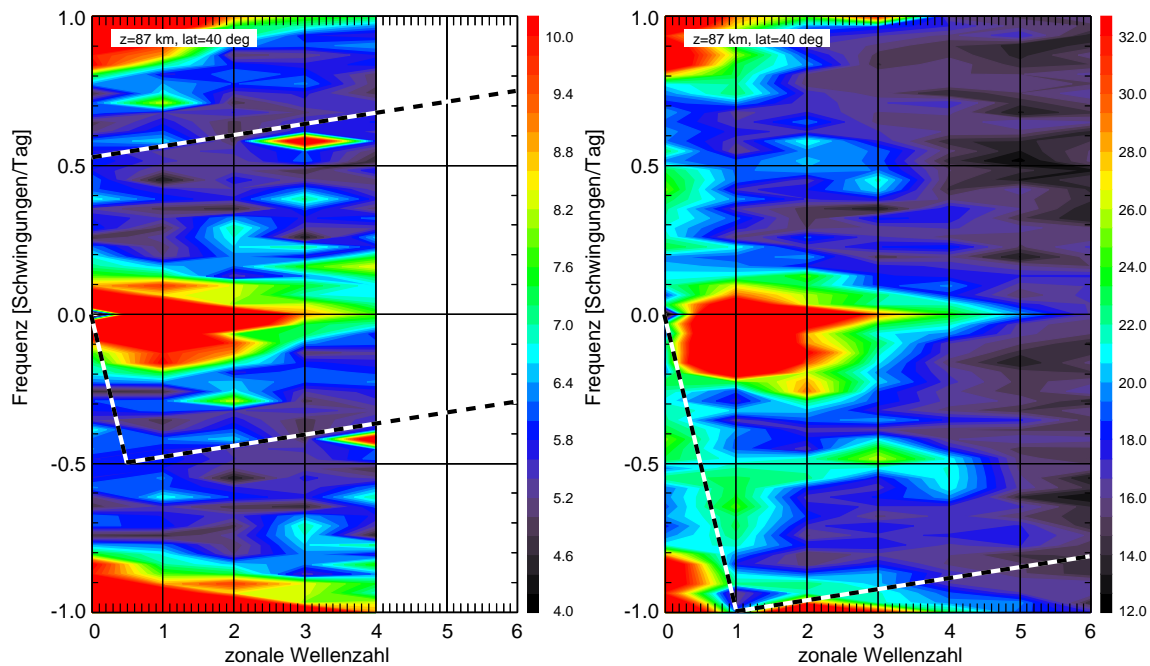
**Abbildung 8.5:** Varianzen in Bezug auf Rossbywellen von SCIAMACHY (links) und SABER (rechts) in 87 km

mit zentraler Wellenzahl 1 und Frequenzen zwischen  $-0,25$  und  $-0,05$  Schwingungen/ Tag (Perioden von 4 - 20 Tagen) für SCIAMACHY und SABER ermittelt. Dabei zeigt die Abbildung 8.5, dass Rossbywellen in 87 km Höhe hauptsächlich bei mittleren und hohen Breiten auftreten. Auch diesmal ist die Verteilung von SCIAMACHY deutlich verrauschter.

In dem SABER Spektrum ist noch eine weitere Signatur bei zentraler Wellenzahl 3 und Frequenzen von  $-0,5$  Schwingungen/Tag vorhanden. Hierbei handelt es sich um den Spektralbeitrag der Quasi-2-Tage-Welle, der zwar im SABER Spektrum sichtbar ist, aber nicht im SCIAMACHY Spektrum.

Die Quasi-2-Tage-Welle tritt hauptsächlich während der Sommersonnenwende auf. In dieser Zeit verschiebt sich der Breitenbereich der SCIAMACHY Messungen allerdings in Richtung Winterhemisphäre und die Breiten, bei denen die Quasi-2-Tage-Welle auftritt werden nicht abgedeckt.

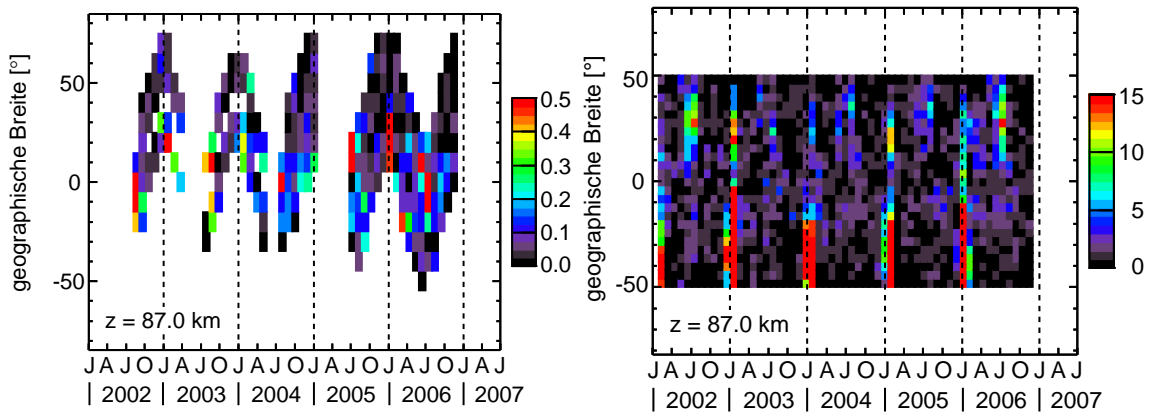
Wellenvarianzen aufgrund der Quasi-2-Tage-Welle sind in Abbildung 8.7 dargestellt. Sie wurden mit einem Bandpassfilter mit zentraler Wellenzahl 3 und Frequenzen zwischen  $-0,6$  und  $-0,4$  Schwingungen/ Tag (Perioden von 1,7 bis 2,5 Tagen) gefiltert. Kleine scharf abgegrenzte Maxima können in den SABER Varianzen gefunden werden. Vor allem in der Südhemisphäre während der Sommersonnenwende. In der Nordhemisphäre sind sie während der Sommerson-



**Abbildung 8.6:** Gemittelte Raum-Zeit-Spektren über den Zeitraum 2002 - 2006 von SCIAMACHY Heizungsraten in K/Tag/Wellenzahl/Schwingungen/Tag (links) und SABER Temperaturen in K/Wellenzahl/Schwingungen/Tag (rechts) in 87 km Höhe bei 40° N. Positive Frequenzen bezeichnen ostwärts wandernde Wellen und negative Frequenzen westwärts wandernde. Der Frequenzbereich, der durch die Abtastung von SCIAMACHY und SABER aufgelöst werden kann ist in Bezug zu den zonalen Wellenzahl-Frequenzkoordinaten gedreht. Die Grenzen dieser Rechtecke sind durch die schwarz-weiß gestrichelten Linien dargestellt. Aufgrund der Beschränkung auf die Nachtdaten bei SCIAMACHY ist der aufgelöste Frequenzbereich halb so groß wie bei SABER.

nenwende deutlich schwächer vorhanden. Außerdem zeigt die Abbildung, dass während der südlichen Sommersonnenwende Wellenaktivität über den Äquator in die Nordhemisphäre gelangt. In den Varianzen von SCIAMACHY kann kein Anzeichen für eine Quasi-2-Tage-Welle gefunden werden. Das liegt zum einen an der Verschiebung des Breitenbereichs und zum anderen daran, dass die Signale dort wo sie zu sehen wären sehr schwach sind und unter Umständen im spektralen Rauschen untergehen.

Die wesentlichen Signaturen der planetaren Wellen können in den SCIAMACHY



**Abbildung 8.7:** *Varianzen durch Quasi-2-Tageswellen abgeleitet aus Raum-Zeit-Spektren der SCIAMACHY Heizungsraten in  $K^2/\text{Tag}^2$  (links) und SABER Temperaturen in  $K^2$  (rechts) in 87 km*

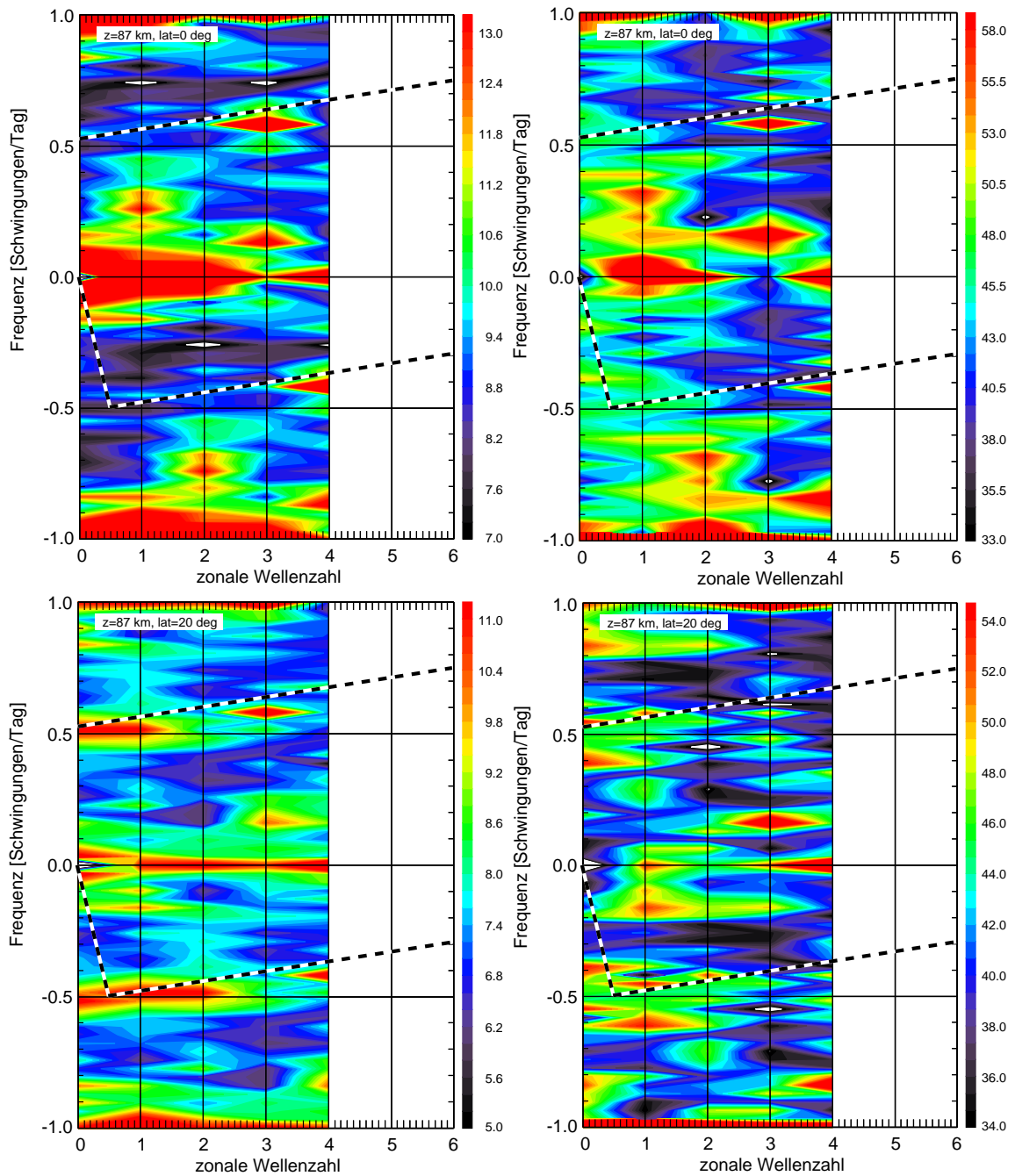
Daten gefunden werden und damit eignet sich dieser Datensatz zur Wellenanalyse. Die Auswirkungen des gegenüber SABER gröber aufgelösten Messgitters und damit eine Begründung für einzelne Defizite in den Daten werden im nächsten Kapitel näher untersucht.

### 8.3 Wellen in SABER mit dem SCIAMACHY Messgitter

Die spektralen Muster in den Raum-Zeit-Spektren von SCIAMACHY und SABER haben im großen und ganzen eine gute Übereinstimmung gezeigt. Allerdings gibt es einzelne Signaturen, die bei SABER sichtbar sind, aber nicht bei SCIAMACHY und umgekehrt. Ein Grund, der diese Unterschiede hervorrufen kann, ist das unterschiedliche Messgitter der beiden Instrumente. So sind die SCIAMACHY Messungen gröber aufgelöst und weisen auch mehr Datenlücken auf. In diesem Abschnitt wird deshalb ein Vergleich der originalen Raum-Zeit-Spektren von SCIAMACHY mit Raum-Zeit-Spektren von SABER, die auf das SCIAMACHY Messgitter interpoliert wurden, gezeigt. Für die Simulation der SCIAMACHY Raum-Zeit-Spektren wurde die SABER Spektralanalyse Punkt für

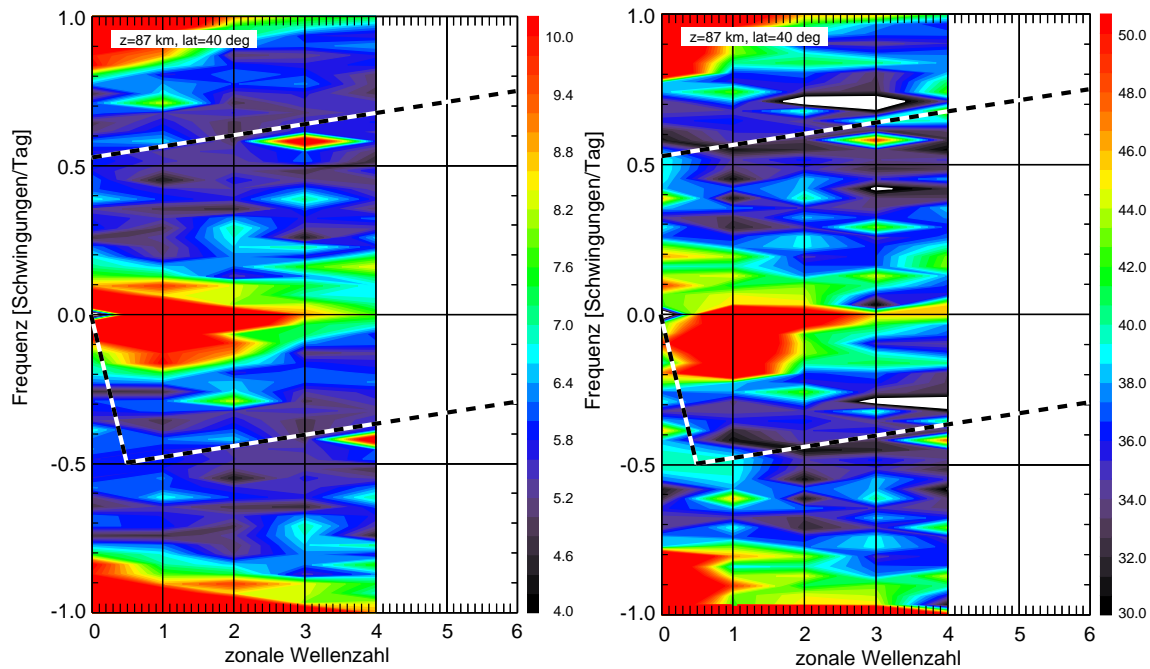
Punkt am SCIAMACHY Messgitter ausgewertet und somit eine Messung mit dem SCIAMACHY Messgitter simuliert. Wie sich herausstellt, können auf diese Art und Weise alle wesentlichen Unterschiede zwischen SABER und SCIAMACHY Spektren im Hinblick auf die Erkennung von Wellen erklärt werden. Dies wird im Folgenden anhand der Raum-Zeit-Spektralanalysen dargestellt.

Der Vergleich der Raum-Zeit-Spektren ist in Abbildung 8.9 für die Breitenbänder Äquator, 20° N und 40° N dargestellt. Es fällt auf, dass bei den fiktiven Spektren der spektrale Hintergrund deutlich zunimmt. Da die Raum-Zeit-Analyse von SABER jetzt nur noch für den aufsteigenden Knoten des SCIAMACHY Messgitters durchgeführt wurde, ist dieses Verhalten aufgrund von Aliasingeffecten und spektralen Artefakten zu erwarten. So können die spektralen Peaks bei zonaler Wellenzahl 3 und Frequenzen von 0,2 und 0,6 Schwingungen/ Tag auf das unregelmäßige Messgitter von SCIAMACHY zurückgeführt werden, da sie sowohl im originalen Spektrum als auch in den mit dem SCIAMACHY Messgitter abgetasteten Spektrum der SABER Temperaturen auftreten, aber nicht im originalen SABER Spektrum. Weitere Aliasingeffecte sind bei zonaler Wellenzahl 4 und Frequenzen von -0,8 und -0,4 Schwingungen/Tag zu finden. Die stärksten spektralen Artefakte treten im Frequenzbereich zwischen -0,5 und 0,5 Schwingungen/Tag bei zonaler Wellenzahl 3 und größer auf. Die spektralen Muster der meisten globalen Wellentypen, die bei zonaler Wellenzahl 1 und 2 auftreten, werden nur gering beeinflusst.



**Abbildung 8.8:** Gemittelte Raum-Zeit-Spektren über den Zeitraum 2002 - 2006 von SCIAMACHY Heizungsdaten (linke Spalte) und auf das SCIAMACHY Messgitter interpolierte SABER Temperaturen (rechte Spalte) in 87 km Höhe am Äquator und bei 20° N. Details siehe Abbildung 8.9





**Abbildung 8.9:** Gemittelte Raum-Zeit-Spektren über den Zeitraum 2002 - 2006 von SCIAMACHY Heizungsraten in K/Tag/Wellenzahl/Schwingungen/Tag (linke Spalte) und auf das SCIAMACHY Messgitter interpolierte SABER Temperaturen in K/Wellenzahl/Schwingungen/Tag (rechte Spalte) in 87 km Höhe bei 40° N. Positive Frequenzen bezeichnen ostwärts wandernde Wellen und negative Frequenzen westwärts wandernde. Der Frequenzbereich, der durch die Abtastung von SCIAMACHY und SABER aufgelöst werden kann ist in Bezug zu den zonalen Wellenzahl- Frequenzkoordinaten gedreht. Die Grenzen dieser Rechtecke sind durch die schwarz-weiß gestrichelten Linien dargestellt. Aufgrund der Beschränkung auf die Nachtdaten bei SCIAMACHY ist der aufgelöste Frequenzbereich halb so groß wie bei SABER.



Der Vergleich von originalem SCIAMACHY Spektrum und dem Spektrum der mit dem SCIAMACHY Messgitter abgetasteten SABER Temperaturen mit dem originalen SABER Spektrum zeigt, dass sich neben den spektralen Artefakten auch die beobachteten Unterschiede bei den einzelnen Wellentypen durch das unterschiedliche Messgitter erklären lassen. So ist die Signatur der Kelvinwellen bei 20° N auch in dem Spektrum der SABER Temperaturen, die mit dem SCIAMACHY Messgitter abgetastet wurden, nicht mehr zu erkennen. Genauso verhält es sich mit der spektralen Signatur der Quasi-2-Tage-Welle bei zonaler Wellenzahl 3 und Frequenzen von -0,5 Schwingungen/Tag.

Das zeigt, dass der SCIAMACHY Datensatz zwar ein paar Lücken und andere Defizite hat, aber im Prinzip für die Wellenanalyse gut ist. Die wesentlichen Signaturen planetarer Wellen findet man trotz den gegebenen Einschränkungen.



# Kapitel 9

## Zusammenfassung

Im Rahmen der vorliegenden Arbeit wurden die OH Emissionsmessungen von SCIAMACHY ausgewertet. Dabei wurden zuerst die notwendigen Kalibrierungen der Daten vorgestellt. So ist es nötig bei den Daten einen Hintergrund (den sogenannten Dark Current) abzuziehen. Außerdem müssen die Spektren noch gefiltert werden, um unrealistische Datenpunkte aus den Messungen zu eliminieren. Für die Ableitung von atomarem Wasserstoff wird zusätzlich noch die Messung von Ozon benötigt. Diese wird durch das GOMOS Instrument bereitgestellt. Auch dieser Datensatz muss vor der eigentlichen Verwendung noch von unrealistischen Messpunkten befreit werden.

Die OH Emissionen von SCIAMACHY wurden mit denen von SABER verglichen. Dabei ergab sich innerhalb der Fehlerbalken eine gute Übereinstimmung. Da SCIAMACHY die OH Emissionen misst, können andere atmosphärische Parameter, wie Heizungsrate, atomarer Wasserstoff und atomarer Sauerstoff nur mittels der Retrievalmethode abgeleitet werden. Dazu wurde zuerst ein Vorwärtsmodell entwickelt, in dem die wesentlichen Prozesse, die beim Übergang zwischen den verschiedenen angeregten Zuständen des OH Moleküls auftreten berücksichtigt werden.

Anschließend wurde dieses Vorwärtsmodell dann um das Retrieval ergänzt. Damit können dann die gewünschten Größen bestimmt werden. In dieser Arbeit

wurde auf mögliche Fehlerquellen und ihre Auswirkungen auf die abgeleiteten Größen eingegangen. Die abgeleiteten Parameter wurden ebenfalls mit anderen Messungen verglichen.

Außerdem wurden die saisonalen und räumlichen Variationen der einzelnen Parameter gezeigt. Dabei existiert in allen Größen eine halbjährliche Schwingung aufgrund der täglichen Gezeit am Äquator. Das Maximum dieser Schwingung befindet sich im Frühjahr und im Herbst.

Im weiteren wurde die langzeitliche Änderung betrachtet. Dabei wurde der Einfluss der solaren Einstrahlung, insbesondere des solaren 11-Jahres Zyklus auf die abgeleiteten Parameter untersucht. Da sich der Messzeitraum der SCIAMACHY Daten bis jetzt nur vom 23sten solaren Maximum bis zum solaren Minimum erstreckt und daher keine eindeutige Aussage zulässt, wurden die erhaltenen Trends mit Simulationen von Atmosphärenmodellen unter Bedingungen des solaren Maximums und des solaren Minimums verglichen. So weist die Strahlungsdichte über die analysierten 5,5 Jahre, entsprechend einem halben solaren Zyklus vom solaren Maximum bis zum solaren Minimum, eine Abnahme von ungefähr 15 % auf. Der Trend in der Heizungsrate beträgt ca. 1 K/Tag Abnahme über die 5,5 Jahre Daten. Die Ozondichte hat einen negativen Trend von ca. 20 % und die atomare Sauerstoffdichte von 10 % bis 15 %. In der atomaren Wasserstoffdichte hingegen ist eine Zunahme über die letzten 5,5 Jahre festzustellen. Der Trend liegt in diesem Fall zwischen 20 % und 30 %. Ein Vergleich mit den Modelldaten von SOCRATES, HAMMONIA und WACCM3 zeigt, dass dieser Trend auf die unterschiedliche solare Einstrahlung zurückgeführt werden kann.

Zum Schluss wurde in dieser Arbeit noch eine Wellenanalyse der SCIAMACHY Daten durchgeführt. Dabei sollte überprüft werden, ob in den Daten die wesentlichen atmosphärischen Wellensignaturen erkannt werden können. In den Daten können Kelvinwellen, Rossby-Schwerewellen und Rossbywellen identifiziert werden. Durch einen Vergleich mit SABER Messungen werden diese Wellensignaturen bestätigt. Außerdem können durch eine Simulation der SCIAMACHY

Spektren anhand der besser aufgelösten SABER Spektralanalysen Artefakte in den SCIAMACHY Spektralanalysen zweifelsfrei identifiziert werden.

Insgesamt zeigt sich, dass die hier abgeleiteten Datensätze für verschiedene wissenschaftliche Studien überaus brauchbar sind. So ergeben sich langfristige globale Datensätze, mit denen das Verhalten der Atmosphäre im Bereich der Mesopausenregion näher untersucht werden kann.



# Literaturverzeichnis

Abreu, V. J. und Yee, J. H., 1989. Diurnal and seasonal variation of the nighttime OH(8-3) emission at low latitudes. *Journal of Geophysical Research*, 94(11), 11 949–11 957.

Adler-Golden, S., 1997. Kinetic parameters for OH nightglow modeling consistent with recent laboratory measurements. *Journal of Geophysical Research*, 102(A9), 19 969–19 976.

Allen, M., Lunine, J. I., und Yung, Y. L., 1984. The Vertical Distribution of Ozone in the Mesosphere and Lower Thermosphere. *Journal of Geophysical Research*, 89(D3), 4841–4872.

Bates, D. R., 1951. The temperature of the Upper Atmosphere. *Proceedings of the Physical Society. Section B*, 64(9), 805–821.

Beig, G., Keckhut, P., Lowe, R. P., Roble, R. G., Mlynczak, M. G., Scheer, J., Fomichev, V. I., Offermann, D., French, W. J. R., Shepherd, M. G., Semenov, A. I., Remsberg, E. E., She, C. Y., Lübken, F. J., Bremer, J., Clemesha, B. R., Stegman, J., Sigernes, F., und Fadnavis, S., 2003. Review of mesospheric temperature trends. *Reviews of Geophysics*, 41, 1015.

Berger, U., 2005. Die Mesosphäre: Ein Frühwarnsystem für Klimaänderungen? *promet*, 31, 12–18.

Bertaux, J. L., Hauchecorne, H., Dalaudier, F., Cot, C., Kyrölä, E., Fussen, D., Tam-

- minen, J., Leppelmeier, G. W., Sofieva, V., und Hassinen, S., 2004. First results on GOMOS/Envisat. *Advances in Space Research*, 33(7), 1029–1035.
- Bertaux, J. L., Megie, G., Widemann, T., Chassefiere, E., Pellinen, R., Kyrölä, E., Korpela, S., und Simon, P., 1991. Monitoring of ozone trend by stellar occultations: The GOMOS instrument. *Advances in Space Research*, 11(3), 237–242.
- Bovensmann, H., Burrows, J. P., Buchwitz, M., Frerick, J., Noël, S., Rozanov, V. V., Chance, K. V., und Goede, A. P. H., 1999. SCIAMACHY: Mission Objectives and Measurement Modes. *Journal of the Atmospheric Sciences*, 56, 127–150.
- Bramstedt, K., 2008. Calculation of SCIAMACHY M-Factors. Technischer Bericht, Universität Bremen.
- Brasseur, G. und Offermann, D., 1986. Recombination of atomic oxygen near the mesopause: Interpretation of rocket data. *Journal of Geophysical Research*, 91, 10 818–10 824.
- Brasseur, G. P., Hitchmann, M., Walters, S., Dymek, M., Falise, E., und Pirre, M., 1990. An interactive chemical dynamic radiative 2-dimensional model of the middle atmosphere. *Journal of Geophysical Research*, 95(D5), 5639–5655.
- Brasseur, G. P. und Solomon, S., 2005. *Aeronomy of the Middle Atmosphere: Chemistry and Physics of the Stratosphere and Mesosphere*. Springer.
- Burrage, M. D., Haggan, M. E., Skinner, W. R., Wu, D. L., und Hays, P. B., 1995. Long-term variability in the solar diurnal tide observed by HRDI and simulated by the GSWM. *Geophysical Research Letters*, 22, 2641–2644.
- Charters, P. E., Macdonald, R. G., und Polanyi, J. C., 1971. Formation of Vibrationally Excited OH by the Reaction  $H + O_3$ . *Applied Optics*, 10(8), 1747–1754.
- Clemesha, B., Takahashi, H., Simonich, D., Gobbi, D., und Batista, P., 2005. Experimental evidence for solar cycle and long-term change in the low-latitude MLT region. *Journal of Atmospheric and Solar-Terrestrial Physics*, 67(1-2), 191–196.



- Copeland, R., 2002. Recommended OH Vibrational Energy Transfer Rate Constants Based on Laboratory Studies. *AGU Fall Meeting Abstracts*, Seiten A510+.
- Craig, R. A. und Gille, J. C., 1969. Cooling of the Thermosphere by Atomic Oxygen. *Journal of the Atmospheric Sciences*, 26, 205–209.
- Crutzen, P. J., 1971. Energy conversion and mean vertical motions in the high latitude summer mesosphere and lower thermosphere. *Mesospheric Models and Related Experiments*, Seiten 78–88.
- Dickinson, P. H. G., Bolden, R. C., und Young, R. A., 1974. Measurement of atomic oxygen in the lower ionosphere using a rocket-borne resonance lamp. *Nature*, 252, 289–291.
- Donnelly, R. F., 1991. Solar UV spectral irradiance variations. *Journal of Geomagnetism and Geoelectricity*, 43, 835–842.
- Dubbock, P. A., Spoto, F., Simpson, J., Spencer, D., Schutte, E., und Sontag, H., 2001. The Envisat Satellite and Its Integration. *ESA Bulletin*, 106, 26–45.
- Duck, T. J. und Whiteway, J. A., 2000. Seasonal transition in gravity wave activity during the springtime stratospheric vortex breakdown. *Geophysical Research Letters*, 27(21), 3477–3480.
- E., R., G., L., L., H. V., W., G., Russell III, J. M., Mlynczak, M., Gordley, L., und Marshall, B. T., 2003. On the verification of the quality of SABER temperature, geopotential height, and wind fields by comparison with Met Office assimilated analyses. *Journal of Geophysical Research*, 108(D20), 4628.
- Ern, M., Lehmann, C., Kaufmann, M., und Riese, M., 2009. Spectral wave analysis at the mesopause from Sciamachy airglow data compared to Saber temperature data. *Annales Geophysicae*, 27, 407–416.

- Ern, M., Preusse, P., Krebsbach, M., Mlynczak, M. G., und Russell III, J. M., 2008. Equatorial wave analysis from SABER and ECMWF temperatures. *Journal of Atmospheric Chemistry*, 8, 845–869.
- Evans, W. J. und Llewellyn, E. J., 1973. Atomic Hydrogen Concentrations in the Mesosphere and the Hydroxyl Emissions. *Journal of Geophysical Research*, 78(1), 323–326.
- Frerick, J., 2006. Sciamachy level 1b-1c processing: the scial1c command line tool.
- Fritts, D. C. und Alexander, M. J., 2003. Gravity wave dynamics and effects in the middle atmosphere. *Reviews of Geophysics*, 41(1).
- Garcia, R. R., Lieberman, R., Russell III, J. M., und Mlynczak, M. G., 2005. Large-scale waves in the mesopause and lower thermosphere observed by SABER. *Journal of the Atmospheric Sciences*, 62, 4384–4399.
- Gerndt, R., 1986. *Untersuchung der Temperaturvariationen in der oberen Mesosphäre mit Infrarot-Spektrometern*. Doktorarbeit, Bergische Universität Wuppertal.
- Goldman, A., Schoenfeld, W. G., Goorvitch, D., Chackerian, C. J., Dothe, H., Melen, F., Abrams, M. C., und Selby, J. A., 1998. Updated line parameters for OH  $X^2\Pi-X^2\Pi(\nu'', \nu')$  transitions. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 59(3-5), 455–469.
- Grossmann, K., Kaufmann, M., und Gerstner, E., 2000. A global measurement of lower thermosphere atomic oxygen densities. *Geophysical Research Letters*, 27(9), 1387–1390.
- Grossmann, K. U., Barthol, P., Frings, W., Henning, R., und Offermann, D., 1983. A new spectrometric measurement of atmospheric 63  $\mu\text{m}$  emission. *Advances in Space Research*, 2, 111–114.

- Grossmann, K. U. und Offermann, D., 1978. Atomic oxygen emission at 63  $\mu\text{m}$  as a cooling mechanism in the thermosphere and ionosphere. *Nature*, 276, 594–595.
- Grossmann, K. U. und Vollmann, K., 1997. Thermal infrared measurements in the middle and upper atmosphere. *Advances in Space Research*, 19, 631–638.
- Hedin, A. E., Mayr, H. G., Reber, C. A., Spencer, N. W., und Carignan, G. R., 1974. Empirical model of global thermospheric temperature and composition based on data from the OGO 6 quadrupole mass spectrometer. *Journal of Geophysical Research*, 79, 215 – 225.
- Herzberg, G., 1974. *Molecular Spectra and Molecular Structure*.
- Johnson, R. M. und Killeen, T. L., 1995. *The upper Mesosphere and Lower Thermosphere: A Review of Experiment and Theory*.
- Kaiser, J. W., von Savigny, C., Eichmann, K.-U., Noël, S., Bovensmann, H., und Burrows, J. P., 2004. Satellite Pointing Retrieval from Atmospheric Limb Scattering of Solar UV-B Radiation. *Canadian Journal of Physics*, 82, 1041–1052.
- Kaufmann, M., Gusev, O. A., Grossmann, K. U., Martin-Torres, F. J., Marsh, D. R., und Kutepov, A. A., 2003. Satellite observations of daytime and nighttime ozone in the mesosphere and lower thermosphere. *Journal of Geophysical Research*, 108(D9).
- Kellogg, W. W., 1961. Chemical heating above the polar mesopause in winter. *Journal Met.*, 18, 373–381.
- Khosravi, R., Brasseur, G., Smith, A., Rusch, D., Walters, S., Chabrilat, S., und Kockarts, G., 2002. Response of the mesosphere to human-induced perturbations and solar variability calculated by a 2-D model. *Journal of Geophysical Research*, 107(D18).

- Kockarts, G. und Peetermans, W., 1970. Atomic oxygen infrared emission in the earth's upper atmosphere. *Planetary and Space Science*, 18, 271–285.
- Kyrölä, E., Tamminen, J., Leppelmeier, G. W., Sofieva, V., Hassinen, S., Bertaux, J. L., Hauchecorne, A., Dalaudier, F., Cot, C., Korablev, O., d'Andon, O. F., Barrot, G., Mangin, A., Theodore, B., Guirlet, M., Etanchaud, F., Snoeij, P., Koppmann, R., Savedra, L., Fraisse, R., Fussen, D., und Vanhellemont, F., 2004. GO-MOS on Envisat: an overview. *Advances in Space Research*, 33, 1020–1028.
- Lin, F. J., Kelly, V. C., und Wesley, A. T., 1987. Atomic oxygen in the lower thermosphere. *Journal of Geophysical Research*, 92, 4325–4336.
- Liu, G. und Shepherd, G. G., 2008. An investigation of the solar cycle impact on the lower thermosphere O(<sup>1</sup>S) nightglow emission as observed by WINDII/UARS. *Advances in Space Research*, 42(5), 933–938.
- Lomb, N. R., 1976. Least-square frequency analysis of unequally spaced data. *Astrophysica Space Science*, 39, 447–462.
- Louet, J., 2001. The Envisat Mission and System. *ESA Bulletin*, 106, 11–25.
- Marsh, D., Smith, A., Brasseur, G., Kaufmann, M., und Grossmann, K., 2001. The existence of a tertiary ozone maximum in the high-latitude middle mesosphere. *Geophysical Research Letters*, 28, 4531–4534.
- Marsh, D. R., Garcia, R. R., Kinnison, D. E., Boville, B. A., Sassi, F., Solomon, S. C., und Matthes, K., 2007. Modelling the whole atmosphere response to solar cycle changes in radiative and geomagnetic forcing. *Journal of Geophysical Research*, 112(D23306).
- Marsh, D. R., Smith, A. K., Mlynczak, M. G., und Russell III, J. M., 2006. SABER observations of the OH Meinel airglow variability near the mesopause. *Journal of Geophysical Research*, 111(A10S05).

- McDade, I. C. und Llewellyn, E. J., 1987. Kinetic Parameters Related to Sources and Sinks of Vibrationally Excited OH in the Nightglow. *Journal of Geophysical Research*, 92(A7), 7643–7650.
- McDade, I. C., Murtagh, D. P., Greer, R. G. H., Dickinson, P. H. G., Witt, G., Stegman, J., Llewellyn, E. J., Thomas, L., und Jenkins, D. B., 1986. ETON 2: Quenching parameters for the proposed precursors of  $O_2(b^1 \Sigma g^+)$  and  $O(^1S)$  557.7 nm in the terrestrial nightglow. *Planetary and Space Science*, 34, 789–800.
- Meijer, Y. J., Swart, D. P. J., Allaart, M., Andersen, S. B., Bodeker, G., Boyd, I., Braathen, G., Calisesi, Y., Claude, H., Dorokhov, V., von der Gathen, P., Gil, M., Godin-Beekmann, S., Goutail, F., Hansen, G., Karpetchko, A., Keckhut, P., Kelder, H. M., Koelemeijer, R., Kois, B., Koopman, R. M., Kopp, G., Lambert, J.-C., Leblanc, T., McDermid, I. S., Pal, S., Schets, H., Stubi, R., Suortti, T., Visconti, G., und Yela, M., 2004. Pole-to-pole validation of Envisat GOMOS ozone profiles using data from ground-based and balloon sonde measurements. *Journal of Geophysical Research*, 109(D23305).
- Meinel, A. B., 1950. OH emission bands in the spectrum of the night sky I. *Astrophysical Journal*, 111, 555–564.
- Mies, F. H., 1974. Calculated vibrational transition probabilities of  $OH(X^2\Pi)$ . *Journal of Molecular Spectroscopy*, 53, 150–188.
- Mlynczak, M. G., 1991. Nonlocal Thermodynamic Equilibrium Processes in Ozone: Implications for the Energy Budget of the Mesosphere and lower Thermosphere. *Journal of Geophysical Research*, 96(D9), 17 217–17 228.
- Mlynczak, M. G., 1997. Energetics of the mesosphere and lower thermosphere and the SABER experiment. *Advances in Space Research*.
- Mlynczak, M. G., 1999. A new perspective on the molecular oxygen and hydroxyl airglow emissions. *Journal of Geophysical Research*, 104(D22), 27 535–27 543.

- Mlynczak, M. G., Martin-Torres, F. J., Marshall, B. T., Thompson, R. E., Williams, J., Turpin, T., Kratz, D. P., Russell III, J. M., Woods, T., und Gordley, L. L., 2007. Evidence for a solar cycle influence on the infrared energy budget and radiative cooling of the thermosphere. *Journal of Geophysical Research*, 112(A12).
- Mlynczak, M. G. und Olander, D. S., 1995. On the utility of the molecular oxygen dayglow emissions as proxies for middle atmospheric ozone. *Geophysical Research Letters*, 22, 1377–1380.
- Mlynczak, M. G. und Solomon, S., 1993. A detailed evaluation of the heating efficiency in the middle atmosphere. *Journal of Geophysical Research*, 98(D6), 10 517–10 541.
- Mlynczak, M. G. und Zhou, D. K., 1998. Kinetic and spectroscopic requirements for the measurement of mesospheric ozone at 9.6  $\mu\text{m}$  under non-LTE conditions. *Geophysical Research Letters*, 25(5), 639–642.
- Mlynczak, M. G., Zhou, D. K., und Adler-Golden, S. M., 1998. Kinetic and spectroscopic requirements for the inference of chemical heating rates and atomic hydrogen densities from OH Meinel band measurements. *Geophysical Research Letters*, 25(5), 647–650.
- Nett, H., Frerick, J., Paulsen, T., und Levrini, G., 2001. The Atmospheric Instruments and Their Applications: GOMOS, MIPAS and SCIAMACHY. *ESA Bulletin*, 106, 77–87.
- Noël, S., Bovensmann, H., Bramstedt, K., Burrows, J. P., Gottwald, M., und Krieg, E., 2007. SCIAMACHY degradation monitoring results. In *Proc. ENVISAT Symposium*, ESA SP-636.
- Offermann, D., Friedrich, V., Ross, P., und v. Zahn, U., 1981. Neutral gas composition measurements between 80 and 120 km. *Planetary and Space Science*, 29, 747–764.

- Pendleton, W. R. J., Espy, P. J., und Hammond, M. R., 1993. Evidence for Non-Local-Thermodynamic-Equilibrium Rotation in the OH Nightglow. *Journal of Geophysical Research*, 98(A7), 11 567–11 579.
- Pertsev, N. und Perminov, V., 2008. Response of the mesopause airglow to solar activity inferred from measurements at Zvenigorod, Russia. *Annales Geophysicae*, 26(5), 1049–1056.
- Portmann, R. W., Thomas, G. E., Solomon, S., und Garcia, R. R., 1995. The importance of dynamical feedbacks on doubled CO<sub>2</sub>-induced changes in the thermal structure of the mesosphere. *Geophysical Research Letters*, 22, 1733–1736.
- Riese, M., Offermann, D., und Brasseur, G., 1994. Energy released by recombination of atomic oxygen and related species at mesopause heights. *Journal of Geophysical Research*, 99(D7), 14 585–14 593.
- Roble, R. G. und Dickinson, R. E., 1989. How will changes in carbon dioxide and methane modify the mean structure of the mesosphere and thermosphere. *Geophysical Research Letters*, 16, 1441–1444.
- Rodgers, C. D., 2000. *Inverse Methods for atmospheric sounding Theorie and Practice*.
- Rose, K. und Brasseur, G., 1989. A Three-Dimensional Model of chemically active Trace Species In The Middle Atmosphere During Disturbed Winter Conditions. *Journal of Geophysical Research*, 94(D13), 16 387–16 403.
- Rothman, L. S., Jacquemart, D., Barbe, A., Benner, D. C., Birk, M., Brown, L. R., Carleer, M. R., Chackerian, C., und Chance, K., 2005. The HITRAN 2004 molecular spectroscopic database. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 96(2), 139–204.
- Russell III, J. M., Mlynczak, M. G., Gordley, L. L., Tansock, J., und Esplin, R., 1999. An overview of the SABER experiment and preliminary calibration results. In Larar, AM, Herausgeber, *Optical Spectroscopic Techniques and Instrumentation for*

- Atmospheric and Space Research III*, Band 3756 von *Proceedings of the Society of Photo-Optical Instrumentation Engineers (SPIE)*, Seiten 277–288. ISBN 0-8194-3242-3. 3rd Optical Spectroscopic Techniques and Instrumentation for Atmospheric and Space Research, Denver, CO, JUL 19-21, 1999.
- Russell III, J. P. und Lowe, P. R., 2003. Atomic oxygen profiles (80-94 km) derived from Wind Imaging Interferometer/Upper Atmospheric Research Satellite measurements of the hydroxyl airglow: 1. Validation of technique. *Journal of Geophysical Research*, 108(D21), 4662.
- Salby, M. L., 1982a. Sampling theory for asynoptic satellite observations, Part I: Space-time spectra, resolution, and aliasing. *Journal of the Atmospheric Sciences*, 39, 2577–2600.
- Salby, M. L., 1982b. Sampling theory for asynoptic satellite observations, Part II: Fast Fourier synoptic mapping. *Journal of the Atmospheric Sciences*, 39, 2601–2614.
- Salby, M. L., Hartmann, D. L., Bailey, P. L., und Gille, J. C., 1984. Evidence for equatorial Kelvin modes in Nimbus-7 LIMS. *Journal of the Atmospheric Sciences*, 41, 220–235.
- Sander, S. P., Friedl, R. R., Golden, D. M., Kurylo, M. J., Huie, R. E., Orkin, V. L., Moortgat, G. K., Ravishankara, A. R., Kolb, C. E., Molina, M. J., und Finlayson-Pitts, B. J., 2002. Chemical kinetics and photochemical data for use in stratospheric studies.
- Scargle, J. D., 1982. Studies in astronomical time series analysis. Part II: Statistical aspects of spectral analysis of unevenly spaced data. *The Astrophysical Journal*, 263, 835–853.
- Schmidt, H., Brasseur, G. P., Charron, M., Manzini, E., Giorgetta, M. A., Diehl, T., Fomichev, V. I., Kinnison, D., Marsh, D., und Walters, S., 2006. The HAM-



- MONIA chemistry climate model: Sensitivity of the mesopause region to the 11-year solar cycle and CO<sub>2</sub> doubling. *Journal of Climate*, 19(16), 3903–3931.
- Sharp, W. E. und Kita, D., 1987. In Situ Measurement of Atomic Hydrogen in the Upper Mesosphere. *Journal of Geophysical Research*, 92(D4), 4319–4324.
- Shepherd, G. G., Hagan, M., und Portnyagin, Y., 2002. PSMOS 2000 Workshop- Planetary Scale Mesopause Observing System. *Journal of Atmospheric and Solar-Terrestrial Physics*, 64.
- Smith, A. K. und Marsh, D. R., 2005. Processes that account for the ozone maximum at the mesopause. *Journal of Geophysical Research*, 110(D23305).
- Smith, A. K., Marsh, D. R., Russell III, J. M., Mlynczak, M. G., Martin-Torres, F. J., und Kyrölä, E., 2008. Satellite observations of high nighttime ozone at the equatorial mesopause. *Journal of Geophysical Research*, 113(D17312).
- Strickland, D. J., Meier, R. R., Hecht, J. H., und Christensen, A. B., 1989. Deducing composition and incident electron spectra from ground-based auroral optical measurements: Theory and model results. *Journal of Geophysical Research*, 94(A10), 13 527–13 539.
- Strobel, D. F., 1978. Parameterization of the Atmospheric Heating Rate From 15 to 120 km Due to O<sub>2</sub> and O<sub>3</sub> Absorption of Solar Radiation. *Journal of Geophysical Research*, 83(C12), 6225–6230.
- Takahashi, H., Clemesha, B. R., und Batista, P. P., 1995. Predominant semiannual oscillation of the upper mesospheric airglow intensities and temperatures in the equatorial region. *Journal of Atmospheric and Solar-Terrestrial Physics*, 57(4), 407–414.
- Texier, H. L., Solomon, S., Thomas, R. J., und Garcia, R. R., 1989. OH\*(7-5) Meinel band dayglow and nightglow measured by the SME limb scanning near-

- infrared spectrometer: Comparison of the observed seasonal variability with two-dimensional model simulations. *Annales Geophysicae*, 7, 365–374.
- Thomas, G. E., 1996. Is the polar mesosphere the miner's canary of global change? *Advances in Space Research*, 18(3), 149–158.
- Thomas, L., Greer, L. G. H., und Dickinson, P. H. G., 1979. The excitation of the 557.7 nm line and Herzberg bands in the nightglow. *Planetary and Space Science*, 27, 925–931.
- Thomas, R. J., 1990. Atomic Hydrogen and Atomic Oxygen Density in the Mesopause Region: Global and Seasonal Variations Deduced From Solar Mesosphere Explorer Near-Infrared Emissions. *Journal of Geophysical Research*, 95(D10), 16 457–16 476.
- Thomas, R. J. und Young, R. A., 1981. Measurement of atomic oxygen and related airglows in the lower thermosphere. *Journal of Geophysical Research*, 86, 7389–7393.
- van der Loo, M. P. J. und Gronenboom, G. C., 2007. Theoretical transition probabilities for the OH Meinel system. *Journal of Chemical Physics*, 126(11).
- von Savigny, C., Kaiser, J. W., Bovensmann, H., Burrows, J. P., McDermid, I. S., und Leblanc, T., 2005. Spatial and temporal characterization of SCIAMACHY limb pointing errors during the first three years of the mission. *Atmospheric Chemistry and Physics*, 5, 2593–2602.
- Wasser, B. und Donahue, T. M., 1979. Atomic oxygen between 80 and 120 km: evidence for a latitudinal variation in vertical transport near the mesopause. *Journal of Geophysical Research*, 84, 1297–1309.
- Woods, T. N. und Rottman, G. J., 1997. Solar Lyman  $\alpha$  irradiance measurements during two solar cycles. *Journal of Geophysical Research*, 102, 8769–8779.

- Wu, D. L., Hays, P. B., und Skinner, W. R., 1995. A least squares method for spectral analysis of space-time series. *Journal of the Atmospheric Sciences*, 52, 3501–3511.
- Xu, J., Smith, A. K., Yuan, W., Liu, H. L., Wu, Q., Mlynczak, M. G., und Russell III, J. M., 2007. Global structure and long-term variations of zonal mean temperature observed by TIMED/SABER. *Journal of Geophysical Research*, 112(D24).
- Yee, J. H., Talaat, E. R., Christensen, A. B., Killeen, T. L., Russell III, J. M., und Woods, T. N., 2003. TIMED instruments. *APL Technical Digest*, 24, 156–164.
- Zhao, Y., Taylor, M. J., und Chu, X., 2005. Comparison of simultaneous Na lidar and mesospheric nightglow temperature measurements and the effects of tides on the emission layer heights. *Journal of Geophysical Research*, 110.



# Danksagung

Mein Dank gilt Prof. Dr. Martin Riese für die Ermöglichung und Betreuung der vorliegenden Doktorarbeit. Außerdem danke ich Dr. Martin Kaufmann für die Betreuung der Arbeit. Allen Mitarbeitern des Instituts für Chemie und Dynamik der Geosphäre (ICG-1) danke ich für Ihre Hilfsbereitschaft und Unterstützung.

Desweiteren danke ich Dr. Christian von Savigny und Dr. Kai-Uwe Eichmann, Universität Bremen, für die Bereitstellung der abgeleiteten OH Temperaturen von SCIAMACHY und Ihre Unterstützung in allen Fragen bezüglich SCIAMACHY.

Dr. Hauke Schmidt, Max Planck Institut für Meteorologie Hamburg, danke ich für die zur Verfügung gestellten Daten des HAMMONIA Modells.

Diese Arbeit wurde durch die DFG unter der Nummer RI 1546/1-1 (HYDOX) im Schwerpunktprogramm 1176 CAWSES - Climate And Weather of the Sun Earth System gefördert.

Bei meinen Eltern bedanke ich mich, dass Sie mir die Ausbildung ermöglicht haben und mich stets in allen Dingen unterstützen. Yvonne danke ich für jede Unterstützung. Bei Trutz bedanke ich mich dafür, dass er einfach da ist und besonders in der Schlußphase alle meine Launen ertragen hat.