

**Auswirkungen präzipitierender Teilchen auf NO und NO₂
der oberen Stratosphäre und unteren Mesosphäre:
Messungen des Michelson Interferometer for Passive
Atmospheric Sounding (MIPAS)**

Zur Erlangung des akademischen Grades eines
DOKTORS DER NATURWISSENSCHAFTEN
von der Fakultät für Physik
des Karlsruher Instituts für Technologie (KIT)

genehmigte

DISSERTATION

von

Diplom-Physiker Felix Friederich
aus Ostfildern-Ruit, Baden-Württemberg

Tag der mündlichen Prüfung: 23.05.2014

Referent: Prof. Dr. Johannes Orphal

Korreferent: PD Dr. Michael Höpfner

Inhaltsverzeichnis

Abbildungsverzeichnis	iv
Tabellenverzeichnis	vii
Abkürzungsverzeichnis	viii
1. Einleitung	1
2. Solare Variabilität	4
2.1. Sonnenwind	4
2.1.1. Magnetfeld der Sonnenkorona und des interplanetaren Raums	4
2.1.2. Co-rotating Interaction Region	6
2.1.3. Koronaler Massenauswurf	7
2.2. Erdmagnetfeld	8
2.2.1. Strahlungsgürtel	11
2.3. Teilchenniederschlag	14
2.4. Sonnenspektrum	16
3. Auswirkungen auf die mittlere Atmosphäre	18
3.1. Struktur und Zusammensetzung der Atmosphäre	18
3.2. Teilchenniederschlag in der mittleren Atmosphäre	20
3.3. UV-Strahlung in der mittleren Atmosphäre	24
3.4. NO _x in der mittleren Atmosphäre	25
3.5. Zyklen in der mittleren Atmosphäre	26
4. Molekülspektren und Strahlungstransport	30
4.1. Molekülspektren	30
4.2. LTE+NLTE	31
4.2.1. GRANADA	33
4.3. Linienverarbeitung	33
4.4. Strahlungstransport	35
4.4.1. KOPRA	36
5. MIPAS/ENVISAT	37
5.1. Instrument	37
5.2. Level 0, Level 1B und Level 2 Produkte	41

Inhaltsverzeichnis

5.3. Retrieval von NO und NO ₂	44
5.3.1. Das Nacht-Tag-Verhältnis von NO in der Thermosphäre	47
6. SPE 2003	56
6.1. Lebensdauer von NO _x	57
6.2. Produktionsraten von NO _x	61
6.2.1. Vergleich mit anderen Studien	67
6.3. Diskussion	69
7. EEP 2007-2011	71
7.1. NO	74
7.2. NO ₂ (Nacht)	77
7.2.1. Ap Index	78
7.2.2. Dst Index	80
7.2.3. Elektronenfluss	83
7.2.4. Protonenfluss	83
7.2.5. Lyman α	85
7.2.6. Diskussion der bisherigen Ergebnisse	90
7.2.7. Produktionsraten und Lebensdauer	92
7.3. NO ₂ (Tag)	94
7.4. N ₂ O ₅	94
7.5. Diskussion	96
8. Zusammenfassung und Ausblick	99
A. Veröffentlichungen und Präsentationen	102
Literaturverzeichnis	104
Danksagungen	113

Abbildungsverzeichnis

1.1. Sonnenfleckenzahl R (oben), solarer Radiofluss bei 10.7 cm (Mitte) und Ap Index (über zehn Tage gemittelt, unten) von 1950 bis 2010	2
2.1. Aufnahmen der Sonne und der Sonnenkorona	5
2.2. „Helmet streamer“	6
2.3. Skizze der Sonne, des langsamen (LSW) und schnellen (SSW) Sonnenwinds, der Magnetfeldlinien und der CIR als Aufsicht.	7
2.4. Skizze zweier Magnetfeldkonfigurationen auf der Sonne, die Filamente tragen	8
2.5. Koronaler Massenauswurf, beobachtet von STEREO	9
2.6. Erdmagnetfeld	10
2.7. Künstlerische Darstellung der Elektronendichte in den Strahlungsgürteln	11
2.8. Losscone-Verteilungsfunktion	13
2.9. Referenzspektrum der Sonne und eines Schwarzkörpers	16
3.1. Modellierter chemischer Zusammensetzung und Temperatur der Erdatmosphäre	19
3.2. Eindringtiefe von solarer elektromagnetischer Strahlung in die Erdatmosphäre als Funktion ihrer Wellenlänge	23
3.3. Verlauf von NO_y -VMR und den einzelnen NO_y -Komponenten	27
3.4. Zeitreihe des von MIPAS/ENVISAT gemessenen NO_x -VMR 2007-2011 in ppbv in 18-64 km Höhe und $60 \pm 5^\circ \text{N}$ geografische Breite (zonales Mittel).	28
3.5. Solarer Radiofluss bei 10,7 cm im Jahr 2000	28
4.1. Qualitatives Rotationsvibrationsspektrum eines heterogenen diatomaren Moleküls.	32
5.1. Schematischer Aufbau von MIPAS: optische Elemente und Strahlengang	38
5.2. Emissionsbeiträge der wichtigsten Moleküle im Wellenbereich, der von den in MIPAS eingebauten HgCdTe-Detektoren erfasst wird	40
5.3. Skizze der MIPAS/ENVISAT-Limbbeobachtungen	41
5.4. Ein Mittel von MIPAS/ENVISAT aufgenommenen Spektren (21. Januar 2005, $70-90^\circ \text{S}$ Breite, 120 km Höhe)	46
5.5. Über die MIPAS-UA Messungen (2005-2009) gemitteltetes Nacht-Tag-Verhältnis von NO , δ_{NO} , in Abhängigkeit der Höhe und der geomagnetischen Aktivität für drei zoneale Mittel	50

Abbildungsverzeichnis

5.6.	a) Aus den MIPAS-UA Messungen (2005-2009) ermitteltes Nacht-Tag-Verhältnis von NO (δ_{NO}) als Höhenprofil b) Durch einen linearen Fit ermittelte Ableitung von δ_{NO} nach dem Ap Index ($d\delta_{\text{NO}}/d\text{Ap}$) c) $d\delta_{\text{NO}}/d\text{Ap}$ für niedrige und hohe Breiten d) δ_{NO} -Modell für drei verschiedene Ap-Werte	52
5.7.	NO-Retrieval und NOT-Retrieval von Nachtmessungen des UA Modus am 22. Juli 2005 von MIPAS	54
6.1.	Dst Index (oben) und Ap Index (unten) im Jahr 2003	56
6.2.	MIPAS Messungen von NO_x -VMR im Oktober-November 2003 zwischen 50°S und 90°S und die Fits einer Exponentialfunktion.	58
6.3.	Links: Höhenabhängige Lebensdauer von NO_x nach dem SPE am 30. Oktober 2003 zwischen 50°S und 90°S . Rechts: Höhenabhängige χ^2 -Werte zwischen Messung und Fit.	59
6.4.	Links: Zeitreihe der NO_x -Teilchenzahldichte vom 1. Oktober 2003 bis zum 31. März 2004 als zonales Mittel von 50°S bis 90°S in farbigen Kreuzen. Als grün Kurve ist ein Polynomfit dargestellt, welche $n(\text{IPP} = 0)$ darstellt. Rechts: $\Delta n_{\text{MIPAS}}(t_0)$ in Abhängigkeit von $I(\text{IPP}, \tau, t_0)$ in farbigen Kreuzen. Die grüne Kurve zeigt den Fit dazu an. Die schwarze Kurve zeigt $\Delta n_{\text{Theorie}}(t_0)$	63
6.5.	Wie Bild 6.4 für die Höhen 44 km bis 52 km.	64
6.6.	Links: Höhenabhängige effektive NO_x -Produktionsraten: pr_{eff} , mit/ohne durch Elektronen verursachte IPP bestimmt (grüne/blau Quadrante); pr_{box} (schwarze Linie) mit einem im Text erläuterten Fehlerbereich (rote Linien); pr_{B10} (violette gestrichelte Linie). Rechts: Höhenabhängige χ^2 -Werte, die zur Bestimmung von pr_{eff} minimiert wurden.	66
6.7.	Höhenabhängige $\text{N}(^4\text{S})$ - und $\text{N}(^2\text{D})$ -Produktionsraten (Kreise und Quadrante)	69
7.1.	Dst Index, Ap Index, Belt Index der Protonen- ($>6.9\text{ MeV}$) und Elektronenkanäle ($>300\text{ keV}$), solarer Lyman α -Fluss in Photonen/ cm^2/s und NO_2 -VMR in ppb bei Nacht von 2007-2011	72
7.2.	Modelliertes Signal X_{mod} , Gleitender Mittelwert $\overline{X_{\text{mod}}}$ und die Variation des modellierten Signals ΔX_{mod}	74
7.3.	NO Höhenprofile vom 1.-10. Juli in geomagnetischen Breiten von 53 - 63°N	75
7.4.	SEA von ΔNO und ΔAp	76
7.5.	SEA von ΔAp Index und von $\Delta\text{NO}_2(\text{Nacht})$	79
7.6.	Der Wert an Tag 1 der SEA aus Bild 7.5	80
7.7.	Korrelationskoeffizient r zwischen ΔAp und ΔNO_2	80
7.8.	SEA von ΔDst Index und von $\Delta\text{NO}_2(\text{Nacht})$	81
7.9.	Der Wert an Tag 0 der SEA aus Bild 7.8	82
7.10.	Korrelationskoeffizient r zwischen ΔDst und ΔNO_2	82
7.11.	SEA von Δe^- und von $\Delta\text{NO}_2(\text{Nacht})$	84

Abbildungsverzeichnis

7.12. Der Wert an Tag 1 der SEA aus Bild 7.11	85
7.13. Korrelationskoeffizient r zwischen Δe^- und ΔNO_2	85
7.14. SEA von Δp^+ und von ΔNO_2 (Nacht)	86
7.15. Der Wert an Tag 1 der SEA aus Bild 7.14	87
7.16. Korrelationskoeffizient r zwischen Δp^+ und ΔNO_2	87
7.17. SEA von $\Delta \text{Ly}\alpha$ und ΔNO_2 (Nacht)	88
7.18. Der Wert an Tag 0 der SEA aus Bild 7.17	89
7.19. Wahrscheinlichkeit p in % einer Abhängigkeit zwischen $\Delta \text{Ly}\alpha$ und ΔNO_2	89
7.20. SEA von ΔAp und ΔNO_2 (Nacht) mit unterdrücktem $\Delta \text{Ly}\alpha$	91
7.21. Der Wert an Tag 1 der SEA aus Bild 7.20	92
7.22. Korrelationskoeffizient r zwischen ΔAp und ΔNO_2	92
7.23. Höhenabhängige Lebensdauer τ von NO_x	93
7.24. Höhenabhängige Produktionsrate pr von NO_2	93
7.25. NO_2/NO_x , gemessen von MIPAS/ENVISAT um 22 Uhr Lokalzeit als zo- nales Mittel bei 60N-70N geomagnetischer Breite von 2007 bis 2011.	94
7.26. SEA von ΔAp und ΔNO_2 (Tag)	95
7.27. Der Wert an Tag 1 der SEA aus Bild 7.26	96
7.28. Korrelationskoeffizient r zwischen ΔAp und ΔNO_2 (Tag)	96
7.29. SEA von ΔAp und $\Delta \text{N}_2\text{O}_5$ (Nacht)	97

Tabellenverzeichnis

2.1. Verschiedene Eigenschaften des langsamen und schnellen Sonnenwinds (SW) und des koronalen Massenauswurfs (CME)	5
2.2. Frequenzen der Bewegungen von Elektronen und Protonen (jeweils von 10^{-3} – 10^3 MeV) in den Strahlungsgürteln	13
5.1. MIPAS Scans	42
5.2. Kalender der MIPAS Scans	48
7.1. Zeiträume, in denen MIPAS NO_y -VMRs in der Analyse verwendet werden.	78
7.2. Zuordnung zwischen χ_{QK}^2 und der Wahrscheinlichkeit p bei der Quadrantenkorrelation (Blomqvist, 1950)	89

Abkürzungsverzeichnis

AIMOS	Atmospheric Ionization Module Osnabrück
AVKD	Diagonalelement der Averaging Kernel Matrix
CIR	Korotierende Wechselwirkungsregion engl.: corotating interaction region
CME	Koronaler Massenauswurf engl.: coronal mass ejection
EEP	Elektronenniederschlag engl.: energetic electron precipitation
ESA	Europäische Weltraumorganisation European Space Agency
FR	Volle Auflösung engl.: full resolution
FTIR	Fourier-Transform-Infrarot
GOES	Geostationary Operational Environmental Satellite
GOMOS	Global Ozone Monitoring by Occultation of Stars
GRANADA	Generic RAdiative traNsfer AnD non-LTE population Algorithm
HEPPA	High Energy Particle Precipitation in the Atmosphere
HO _x	H+OH+HO ₂
IAA	Institut für Astrophysik Andalusien span.: Instituto de Astrofísica de Andalusia
IMK	Institut für Meteorologie und Klimaforschung
IPP	Ionenpaarproduktion engl.: ion pair production
KOPRA	Karlsruhe Optimized and Precise Radiative transfer Algorithm
LTE	Lokales thermodynamisches Gleichgewicht engl.: local thermal equilibrium
MA	Mittlere Atmosphäre engl.: middle atmosphere
MHD	Magnetohydrodynamik
MIPAS	Michelson Interferometer for Passive Atmospheric Sounding
NLTE	Non-LTE
NOEM	Nitric Oxide Empirical Model
NOM	Nominell
NO _x	N+NO+NO ₂
OSIRIS	Optical Spectrograph and Infrared Imaging System
O _x	O+O ₃
POES	Polar Operational Environmental Satellite

Tabellenverzeichnis

QBO	Quasi-biennale Oszillation
RR	Reduzierte Auflösung reduced resolution
SEA	Superposed Epoch Analysis
SNOE	Student Nitric Oxide Explorer
SPE	Solares Protonenereignis engl.: solar proton event
SSW	Plötzliche Stratosphärenenerwärmung engl.: sudden stratospheric warming
SZA	Sonnenzenitwinkel engl.: solar zenith angle
UA	Obere Atmosphäre engl.: upper atmosphere
UV	Ultraviolett
VMR	Volumenmischungsverhältnis engl.: volume mixing ratio

1. Einleitung

Welcher Lebendige, Sinnbegabte, liebt nicht vor allen Wundererscheinungen des verbreiteten Raums um ihn das allerfreulichste Licht - mit seinen Farben, seinen Strahlen und Wogen; seiner milden Allgegenwart, als weckender Tag.

Novalis, Hymnen an die Nacht

Der Einfluss der Sonne auf die Erde lässt sich durch verschiedene einfache Beobachtungen im Alltag belegen. Die Energieeinstrahlung der Sonne spielt eine entscheidende Rolle für das Wetter, da sie z.B. die Temperatur der Erdatmosphäre beeinflusst. Der Tag-Nacht-Rhythmus hat großen Einfluss auf das Leben; Photosynthese geschieht nur unter Lichteinstrahlung - genauso wie andere photochemische Prozesse in der Erdatmosphäre. Beispielsweise wird die für den Menschen nicht sichtbare ultraviolette Strahlung größtenteils durch Ozon in der Stratosphäre absorbiert. Ozon wiederum wird durch Photolyseprozesse gebildet.

Doch nicht nur elektromagnetische Sonnenstrahlung, auch der Sonnenwind, der aus Elektronen, Protonen und schwereren Ionen besteht, wirkt auf die Erde. Das Nordlicht, das man nachts in höheren Breiten regelmäßig sehen kann, ist das wohl prominenteste Beispiel dafür. Dabei präzipitieren (lat. *praecipitare* – herabstürzen) geladene Teilchen in die Erdatmosphäre und regen Ionen, Atome und Moleküle an (z.B. N^+ , O und N_2), die dann als Folge sichtbares Licht aussenden.

Die Auswirkungen von Sonnenstrahlung und Sonnenwind sind dabei keineswegs zeitlich unabhängig. Auf verschiedenen Zeitskalen zeigen sich Variationen. (i) Die Solar-konstante S_0 , die die durchschnittliche Intensität der Sonnenstrahlung bei einem Abstand von 1 AE angibt, liegt bei 1367 W/m^2 . Doch der Begriff "Solarkonstante" ist trügerisch, denn sie unterliegt verschiedenen Variationen: Als Hauptreihenstern der G2-Klasse nimmt die Intensität alle 100 Millionen Jahre um ca. 1% zu. Regelmäßige Veränderungen des solaren Magnetfelds sorgen für Schwankungen von S_0 (man spricht von Sonnenaktivität), deren Perioden von 22 Jahren über einige hundert Jahre bis hin zu mehreren tausend Jahren reichen. Die Intensität der (fernen) UV-Strahlung kann dabei abhängig ihrer Wellenlänge um 10% bis über 100% schwanken. (ii) Als Folge der elliptischen Erdumlaufbahn variiert die Intensität der Strahlung, die auf der Erde ankommt, innerhalb eines Jahres um über 3% um ihren Mittelwert. Weitere geometrische Variationen in Größen wie der Neigung und der Exzentrizität der Erdumlaufbahn sowie der Präzession der Erdachse werden zusammen mit den Schwankungen von S_0 zu den sogenannten Milanković-Zyklen zusammengefasst. (iii) Die Sonnenaktivität hat auch Einfluss auf Geschwindigkeit, Dichte und Zusammensetzung des Sonnenwindes, der auf das Erdmagnetfeld trifft. (iv) In unregelmäßigen Abständen, doch meist während

1. Einleitung

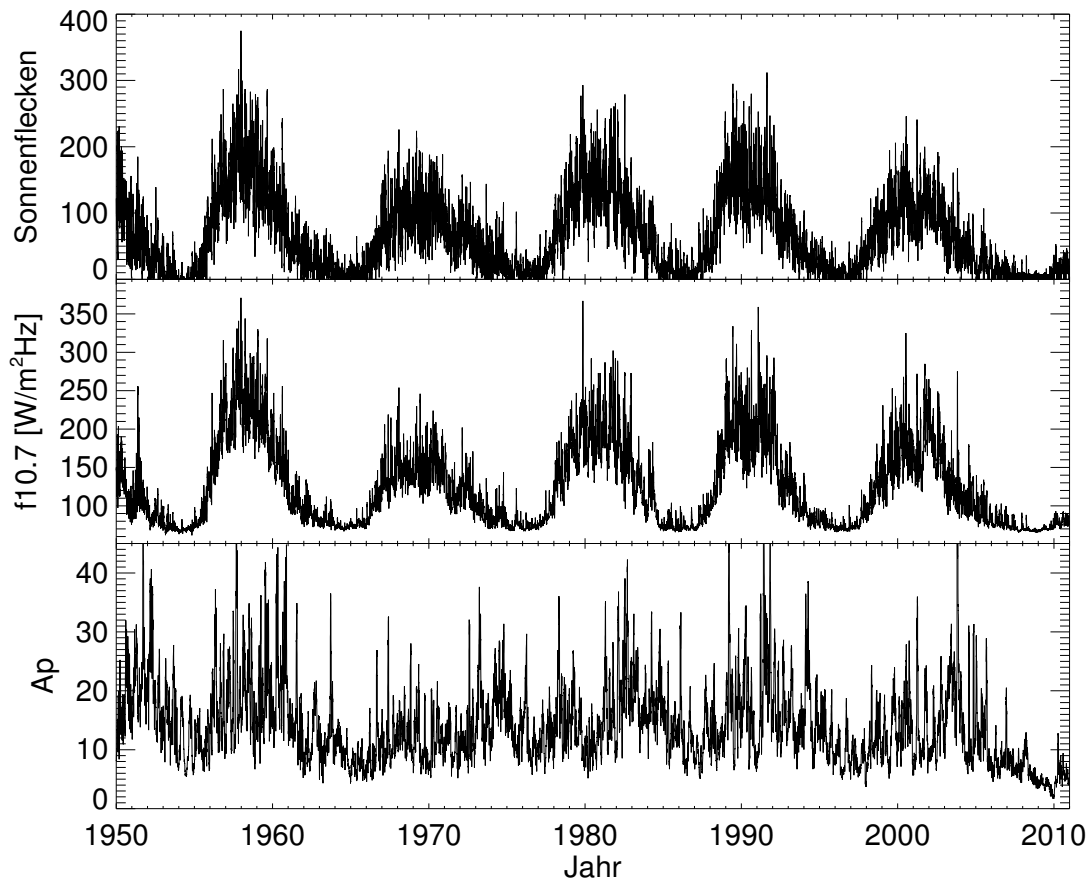


Bild 1.1.: Sonnenfleckenzahl R (oben), solarer Radiofluss bei 10.7 cm (Mitte) und Ap Index (über zehn Tage gemittelt, unten) von 1950 bis 2010. Die Sonnenfleckenzahl sind von <http://spidr.ngdc.noaa.gov/> entnommen, f10.7 und Ap Index sind von <http://www.ngdc.noaa.gov/>.

hoher Sonnenaktivität (solares Maximum) kommt es auf der Sonne zu Explosionen, die große Mengen an Plasma in den Weltraum befördern, welche anschließend auf die Erde treffen können. (v) Starker Sonnenwind schirmt die Erde effektiver von kosmischer Strahlung ab, die isotrop auf die Erde trifft. (vi) Die Neigung der Erdumlaufbahn gegenüber der Ekliptik und die daraus folgende Kopplung der Magnetfelder der Sonne und der Erde sorgen für jährliche Schwankungen der Wahrscheinlichkeit, dass Teilchen des Sonnenwindes in die Magnetosphäre eindringen und in die Erdatmosphäre präzipitieren.

In Zeiten großer Sonnenaktivität kann man auf der Sonnenoberfläche vermehrt kleine dunkle (also kühle) Regionen erkennen, sogenannte Sonnenflecken. Diese sind über mehrere Sonnenrotationen stabil. In Bild 1.1 sind drei verschiedene Zeitreihen dargestellt: Die Anzahl der Sonnenflecken pro Tag, das Tagesmittel des solaren 10,7 cm-Radioflusses, der an der Erde ankommt und ein gleitender 10-Tagesmittelwert des Ap Index, der

1. Einleitung

Schwankungen im Erdmagnetfeld anzeigt, die z.B. durch Sonnenwind ausgelöst werden können. Die Sonnenfleckenanzahl R wird folgendermaßen ermittelt:

$$R = 10N + n, \quad (1.1)$$

wobei N für die Anzahl der Sonnenfleckengruppen steht, n für die Anzahl der einzelnen Sonnenflecken. Eine 11-Jahresperiode ist bei der Sonnenfleckenanzahl und beim Radiofluss deutlich zu erkennen, beim Ap Index lässt sie sich erahnen. Es ist aber offensichtlich, dass Variationen über kleinere Zeiträume diese Parameter beeinflussen. Diese Zeitreihen belegen, dass sich die Variabilitäten der Sonnenaktivität (parametrisiert durch die Sonnenfleckenanzahl) in verschiedenen Einflussfaktoren zeigen, welche auf die Erdatmosphäre wirken können. Sowohl in der elektromagnetischen Strahlung (stellvertretend durch den Radiofluss) als auch im Sonnenwind, der das Erdmagnetfeld stört (parametrisiert durch den Ap Index).

Diese Arbeit befasst sich mit Auswirkungen des Sonnenwinds auf die chemische Zusammensetzung der mittleren Erdatmosphäre, berücksichtigt aber auch simultane Veränderungen, die durch UV Strahlung hervorgerufen werden. Insbesondere werden die Auswirkungen auf NO_x ($\text{NO} + \text{NO}_2$) zwischen 40 km und 62 km Höhe untersucht, das für katalytischen Ozonabbau verantwortlich ist. Dieser Ozonabbau hat durch breitenabhängige Strahlungsheizung oder -kühlung Einfluss auf die Strahlungsbilanz der mittleren Atmosphäre. Durch dynamische Kopplungseffekte treten möglicherweise Auswirkungen bis zum Erdboden und damit auf das Klima der Erde auf. Die Größe des Einflusses des Sonnenwinds auf die Energiebilanz der Erde ist aber noch nicht bekannt. Daher müssen dessen Auswirkungen auf NO_x untersucht werden, um sie in künftigen Klimamodellen berücksichtigen zu können.

Die Arbeit ist wie folgt aufgebaut. Zuerst wird die solare Variabilität und ihre Auswirkungen auf das Erdmagnetfeld näher beschrieben (Kapitel 2). Danach folgt ein Überblick über den Aufbau der Atmosphäre und die Auswirkungen der solaren Variabilität auf die Erdatmosphäre, insbesondere auf die in ihr enthaltenen Moleküle (Kapitel 3). Die Eigenschaften und das Spektrum eines diatomaren heterogenen Moleküls werden am Beispiel von NO in Kapitel 4 besprochen. Das Verständnis dieser charakteristische Eigenschaften der Moleküle sind für deren Messung notwendig. Anschließend wird das Instrument MIPAS/ENVISAT vorgestellt und es wird erläutert, wie man durch die Auswertung der von MIPAS aufgenommenen Spektren die Häufigkeit der Gase bestimmen kann (Kapitel 5). Am Ende dieses Kapitels wird auch besprochen wie das Auswertungsprogramm weiterentwickelt wurde, um Nachtmessungen der oberen Erdatmosphäre genauer auswerten zu können. Messungen von MIPAS und deren Analyse werden in den Kapiteln 6 und 7 präsentiert. Jeweils zum Abschluss dieser Kapitel werden Rückschlüsse auf die NO_x -Produktionsraten gezogen, die in künftigen Klimamodellen berücksichtigt werden können. Im letzten Kapitel (Kapitel 8) werden die Ergebnisse der Arbeit zusammengefasst, offene Fragestellungen diskutiert und ein Ausblick auf künftige Arbeiten gegeben.

2. Solare Variabilität

Die chemische Zusammensetzung der mittleren Atmosphäre wird u.a. durch Teilchenniederschlag in hohen geomagnetischen Breiten und durch Sonneneinstrahlung auf der Tagseite beeinflusst. Beide Größen sind zeit- und ortsabhängig und werden maßgeblich von der Sonnenaktivität bestimmt. Die Variabilität der Sonnenaktivität wird durch das sich zeitlich und räumlich ändernde Magnetfeld der Sonne verursacht. Der von der Sonne ausgehende Sonnenwind wird dadurch in seinen Eigenschaften beeinflusst. Die Variationen des Sonnenwindes haben Einfluss auf den Teilchenniederschlag der Erde. Eine ausführliche Erläuterung von der Ursache bis zum Ereignis des Teilchenniederschlags wird in den Kapiteln 2.1 bis 2.3 gegeben. Variationen im elektromagnetischen Spektrum der Sonne werden in Kapitel 2.4 vorgestellt.

Für ein tieferes Verständnis seien die Lehrbücher von Kivelson und Russell (1995) und von Kallenrode (2010) empfohlen, die auch die Grundlage dieses Kapitels stellen. Die Bilder 2.1, 2.5, 2.6 und 2.7 wurden folgender NASA-Homepage entnommen:

<http://svs.gsfc.nasa.gov/Gallery/index.html>

2.1. Sonnenwind

Sonnenwind ist ein von der Sonne aus strömendes, kollisionsfreies Plasma und besteht aus Elektronen, Protonen, Alphateilchen und einer um Größenordnungen geringeren Anzahl schwererer Ionen. Er entsteht in verschiedenen Regionen des solaren Magnetfelds (Kapitel 2.1.1) und wird je nach Entstehungsregion in langsamen und schnellen Sonnenwind unterteilt. Er variiert z.B. in Geschwindigkeit, Dichte, Teilchenanzahl der Alphateilchen und in Stärke und Orientierung des Magnetfelds. Regionen, in denen das Plasma des Sonnenwindes stark komprimiert ist, werden korotierende Wechselwirkungsregionen (engl.: corotating interaction regions, CIR, Kapitel 2.1.2) genannt, welche für die weiterführenden Kapitel wichtig sind. Koronale Massenauswürfe (engl.: coronal mass ejection, CME) der Sonne, die einen starken Einfluss auf die mittlere Erdatmosphäre haben können, werden in Kapitel 2.1.3 besprochen. Verschiedene Parameter des Sonnenwindes sind in Tab. 2.1 dargestellt.

2.1.1. Magnetfeld der Sonnenkorona und des interplanetaren Raums

Verantwortlich für das Magnetfeld der Sonne ist ihr magnetohydrodynamischer (MHD) Dynamo. Grundlegend dabei sind die differentielle Rotation der Sonne und die daraus folgenden Scherkräfte. An der Oberfläche am Äquator beträgt ihre siderische Ro-

2. Solare Variabilität

Tabelle 2.1.: Verschiedene Eigenschaften des langsamen und schnellen Sonnenwinds (SW) und des koronalen Massenauswurfs (CME)

Parameter	langs. SW	schneller SW	CME
Geschwindigkeit [km/s]	250-400	400-800	10-2000
Dichte bei 1 AE [Ionen/cm ³]	8	3	bis 200
$\frac{\alpha}{\text{Gesamt}}$ -Teilchenanzahl	0.02	0.04	bis 0.3

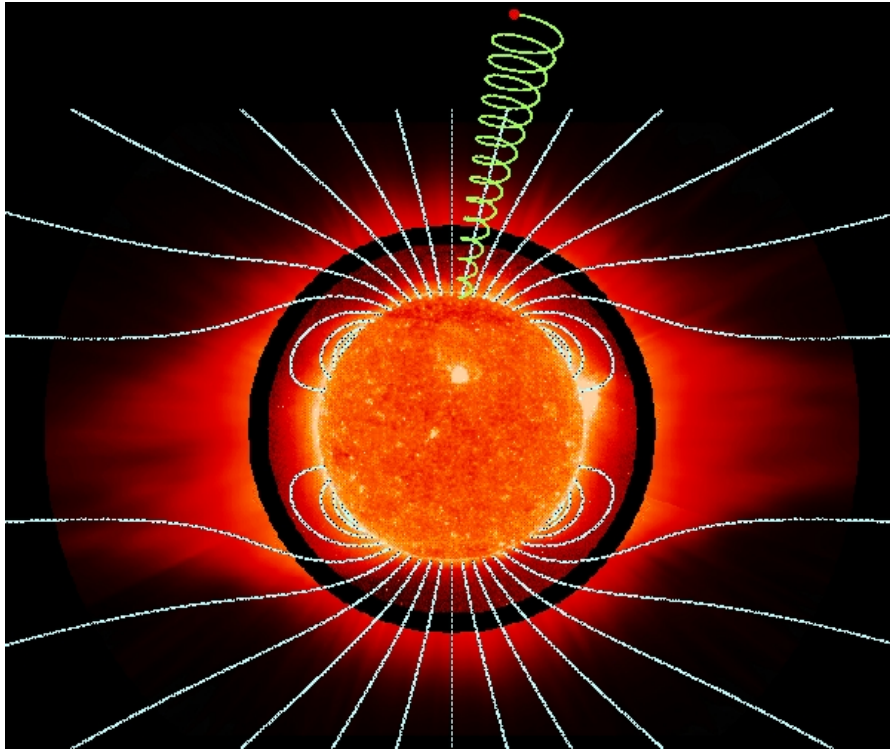


Bild 2.1.: Aufnahmen der Sonne und der Sonnenkorona. Die Magnetfeldlinien der Sonnenkorona während eines solaren Minimums sind in weiß und Bahn eines geladenen Teilchens in grün eingezeichnet. Der schwarze Ring um die Sonne markiert diejenige Fläche, die kleinskalige Strukturen des Magnetfelds einschließt (engl.: solar source surface). Credit: NASA

tation 26,8 Tage, bei 60° Breite schon 30,8 Tage. Der Kern rotiert dagegen starr. Die Übergangsregion (Tachocline) zwischen starrer und differentieller Rotation befindet sich bei ca. 0.7 Sonnenradien.

Das Magnetfeld der Sonne wechselt ungefähr alle elf Jahre seine Polarität. Ein vollständiger solarer magnetischer Zyklus dauert folglich ca. 22 Jahre und durchläuft jeweils zweimal eine Phase des solaren Maximums und des solaren Minimums. Das Magnetfeld der Sonnenkorona während eines solaren Minimums ist in Bild 2.1 dargestellt. Die magnetischen Pole befinden sich in der Nähe der geographischen Pole und es existiert eine

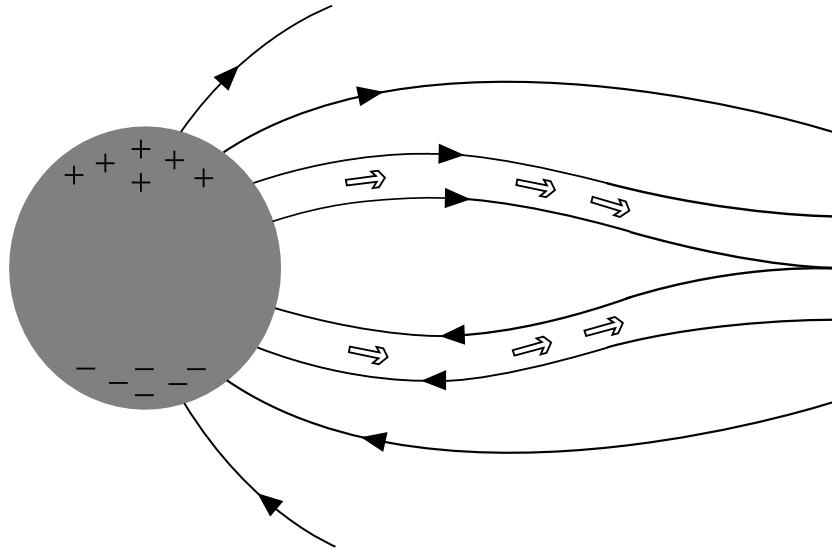


Bild 2.2.: Die Sonne und der „helmet streamer“. Die schwarzen Linien stellen das Magnetfeld der Sonne in Zeiten ihres Minimums dar. Die Richtung der Magnetfeldlinien ist durch Dreiecke gekennzeichnet. Die Pfeile zeigen die Richtung des langsamen Sonnenwinds an.

annähernd magnetfeldfreie Fläche in der Nähe des Äquators. Innerhalb einer Sphäre von 2,5 Sonnenradien (im Bild 2.1 nicht maßstabsgerecht durch einen schwarzen Ring dargestellt) bilden die Magnetfeldlinien Bögen und es kommt zu kleinskaligen Abweichungen. Ein geladenes Teilchen kann in hohen Breiten leichter entkommen, da sich diese Magnetfeldlinien erst sehr weit von der Sonne entfernt wieder schließen. Man spricht auch von „offenen“ Magnetfeldlinien. Die Bahn eines geladenen Teilchens ist durch eine grüne Spirale dargestellt. Diese Bahn wird durch die Lorentzkraft bestimmt und wird später noch beschrieben (Kapitel 2.2.1). Die Regionen mit offenen Magnetfeldlinien werden koronale Löcher genannt, sie sind der Ursprung des schnellen Sonnenwinds. In niedrigeren Breiten zeigt das Magnetfeld Bögen, die die verschiedenen Polaritäten miteinander verbinden. Da hier Elektronen gefangen sind, leuchten diese Regionen (engl.: helmet streamer, Bild 2.2) stärker. An den Seiten der Streamer können Elektronen entweichen, sie sind der Ursprung des langsamen Sonnenwinds.

Die extrem hohe Leitfähigkeit σ des Plasmas führt dazu, dass das Magnetfeld \vec{B} der Sonne im Plasma eingefroren von der Sonne nach außen transportiert wird. In Folge der Sonnenrotation und der radialen Geschwindigkeitskomponente des Sonnenwinds windet sich das Sonnenmagnetfeld nach außen hin wie eine archimedische Spirale.

2.1.2. Co-rotating Interaction Region

Wird der langsame Sonnenwind vom schnellen Sonnenwind eingeholt, tritt eine Wechselwirkung auf. Aufgrund der geringen Dichte - sowohl vom langsamen als auch vom schnellen Sonnenwind - kommt es aber nicht zu Stößen: Sonnenwind ist ein kollisionsfreies

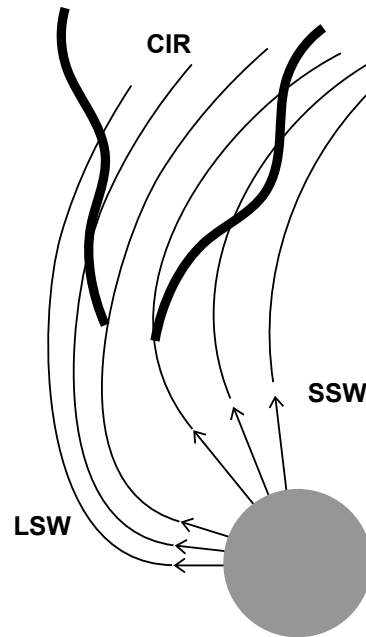


Bild 2.3.: Skizze der Sonne, des langsamen (LSW) und schnellen (SSW) Sonnenwinds, der Magnetfeldlinien und der CIR als Aufsicht. Die dicken Kurven stellen die Stoßwellen dar und begrenzen die CIR.

Plasma. Magnetische Kräfte innerhalb des Plasmas sind für die Wechselwirkung verantwortlich. Bildlich gesehen kann der schnelle Sonnenwind den langsamen nicht überholen, da sich Magnetfeldlinien nicht kreuzen dürfen. Es bildet sich in Folge eine CIR aus. Dies ist in Bild 2.3 dargestellt. Korotierend, da diese Region gebunden mit der Sonne rotiert. Die magnetische Wechselwirkung führt zur Bildung von Stoßwellen und damit zur Teilchenbeschleunigung. Teilchen innerhalb einer CIR erfahren die größte Beschleunigung in etwa bei 4 AE. Eine CIR kann aber auch schon bei kleineren Radien als 1 AE beginnen. Die CIR wird von zwei Stoßwellen begrenzt: die eine verläuft vorwärts, die andere rückwärts. Stoßwellen innerhalb der CIR bei 1 AE bewegen sich also in Richtung der Sonne. Diese Region erstreckt sich bei 1 AE typischerweise um 30° , wohingegen das Plasma aus einer Winkelweite von 90° und mehr von der Sonnenkorona stammt. Die Lebensdauer einer CIR beträgt mehrere Sonnenrotationen.

2.1.3. Koronaler Massenauswurf

Protuberanzen sind bogenförmige Materieströme auf der Sonne, die vom lokalen Magnetfeld getragen werden. Der Gravitation wirkt die magnetische Spannung entgegen, die dafür sorgt, die Länge der Magnetfeldlinien zu minimieren. Bild 2.4 zeigt zwei verschiedene Magnetfeldkonfigurationen (links und rechts), die dies ermöglichen. Ist eine Protuberanz eruptiv, kann es zu einer CME kommen. Die rechte Konfiguration kann dazu führen, indem durch Rekonnexion magnetischer Feldlinien (engl.: magnetic reconnection) an ihrem X-Punkt knapp unter dem Filament Magnetfeldenergie in kine-

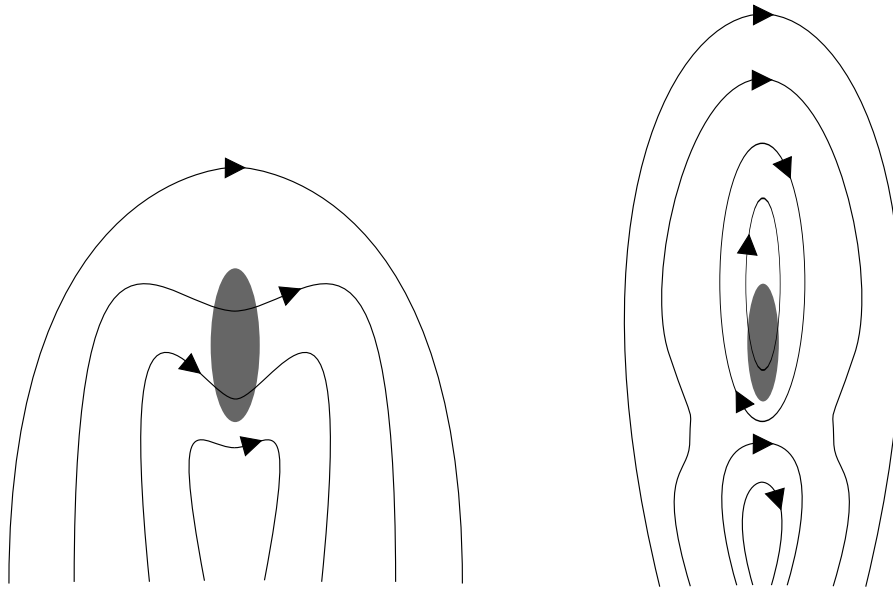


Bild 2.4.: Skizze zweier Magnetfeldkonfigurationen auf der Sonne, die Filamente (graue Flächen) tragen

tische Energie umgesetzt wird. Die linke Konfiguration führt nicht zu einer CME. Bild 2.5 zeigt eine CME als Komposition von Aufnahmen verschiedener Koronografen der STEREO-Mission. Während eines solaren Maximums werden CMEs fast täglich beobachtet. Das Verhältnis der Anzahl an CMEs zwischen solarem Maximum und Minimum ist 15:1. Jeder registrierte CME ist auf folgender Webpage aufgelistet:

http://cdaw.gsfc.nasa.gov/CME_list/.

CMEs, die Einfluss auf die chemische Zusammensetzung der Erdatmosphäre haben, wie es in dieser Arbeit untersucht wird, kommen deutlich seltener vor. In den letzten elf Jahren waren die wichtigsten im Oktober 2003, Januar 2005, Dezember 2006, Januar 2012 und März 2012. Dies liegt zum einen an der Geometrie, also an dem Größenverhältnis der Erde zu einer Sphäre mit 1 AE Durchmesser. Zum anderen an anderen Eigenschaften des Plasmas wie sie auch im Folgenden beschrieben werden.

2.2. Erdmagnetfeld

Das Erdmagnetfeld, auch Magnetosphäre genannt, wird durch die Wechselwirkung von Sonnenwind und dem Magnetfeld des Planeten geformt. Letzteres wird von einem MHD Dynamo erzeugt, der durch die differentielle Rotation des Erdkerns angetrieben wird. Die differentielle Rotation wiederum ist Folge der Konvektion im Erdkern.

Das Erdmagnetfeld lässt sich am besten darstellen, wenn im Bild die Achse Sonne-Erde konstant bleibt, die Erde dagegen um ihre Achse rotieren kann. Die Ausdehnung der Magnetosphäre beträgt ca. zehn Erdradien in Richtung Sonne und mehr als hundert Erdradien in die entgegengesetzte Richtung. Bild 2.6 zeigt verschiedene Grenzen und Regionen des Erdmagnetfelds, die im Folgenden beschrieben werden:

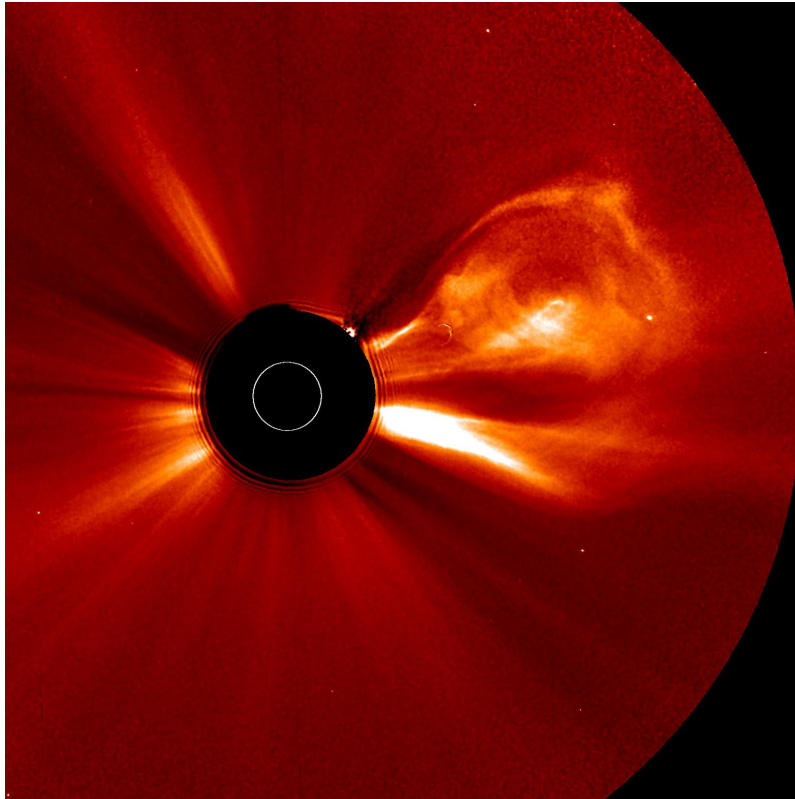


Bild 2.5.: Koronaler Massenauswurf, 20. Mai 2011, beobachtet von STEREO.
Credit:NASA/STEREO

- Bow Shock: Übergangsregion und Stoßwelle zwischen dem Interplanetaren Medium, in dem der Sonnenwind Überschallgeschwindigkeit hat, und dem Magnetosheath, in dem der Sonnenwind Unterschallgeschwindigkeit hat.
- Magnetopause: Die Fläche, an der Druckgleichgewicht zwischen dem kinetischen Druck des Sonnenwinds und dem geomagnetischen Druck besteht.
- Magnetosheath: Die Region zwischen Bow Shock und Magnetopause.
- Polar Cusp: Zwei Singularitäten in der Nord- und Südhemisphäre, an denen das Magnetfeld verschwindet. Sie befinden sich bei einer Breite von 78° , bei einer Lokalzeit von 12 ± 3 Uhr.
- Magnetotail: Der sich auf der Nachseite befindende, langgezogene Teil des Erdmagnetfelds, der auch die offenen Magnetfeldlinien mit einbezieht.
- Plasma Sheet: Die Ebene, die die (offenen) Magnetfeldlinien im Magnetotail in ihrer Richtung trennt.
- Geosphäre: Bereich mit geschlossenen Feldlinien. In ihr dominieren mal Teilchen der Ionosphäre, mal Teilchen des Sonnenwinds.

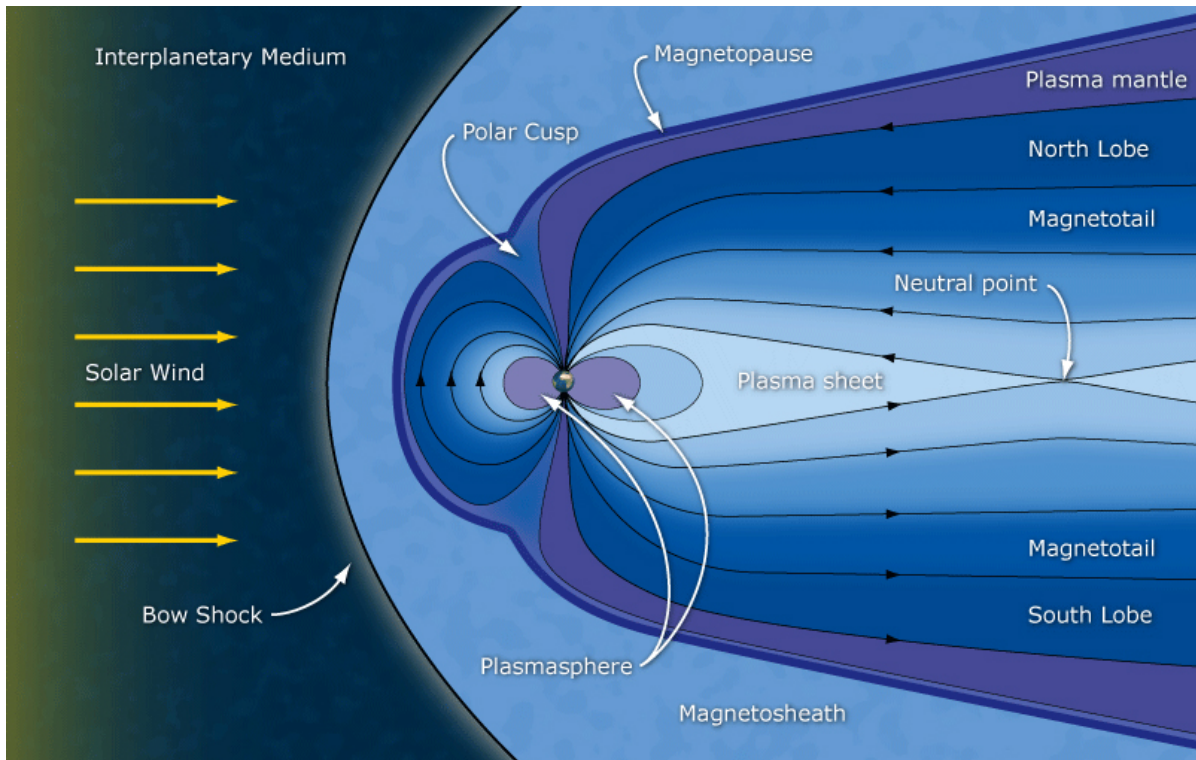


Bild 2.6.: Erdmagnetfeld. Credit: NASA

- Polar caps (Polarkappen): Breitenbereich mit offenen Magnetfeldlinien. Entscheidend ist dabei die Magnetfeldkomponente des Sonnenwinds. Hat diese eine Südkomponente, können durch Rekonnexion durchgängige magnetische Feldlinien von der Sonnenoberfläche zur Erdoberfläche entstehen. Die Magnetosphäre ist damit zur Sonne hin offen. Hat der Sonnenwind dagegen eine Nordkomponente, ist die Magnetosphäre geschlossen und die offenen Magnetfeldlinien sind nur der Sonne entgegengesetzt gerichtet.
- Plasmasphäre: Annähernd symmetrisches Magnetfeld in niedrigen und mittleren Breiten, gefüllt mit Plasma der Ionosphäre. Die Strahlungsgürtel (Kapitel 2.2.1, Bild 2.7) sind umgeben von der Plasmasphäre.

Die Magnetosphäre ist kein festes Gebilde, ihre Ausdehnung ändert sich ständig. Bei der Erklärung der Polarkappen wurde schon erwähnt, dass sie von der Magnetfeldkomponente des Sonnenwinds beeinträchtigt werden. Daneben gibt es noch weitere Variabilitäten. Ein weiterer wichtiger Faktor ist zum Beispiel die Sonnenaktivität. Die Rotationsdauer der Sonne (ca. 27 Tage) und die Dauer der Umpolung des Sonnenmagnetfeldes (11 Jahre) lassen sich also auch in Erdmagnetfeldmessungen wiederfinden. Die Umpolung des Erdmagnetfeldes beträgt ca. 300 000 Jahre und hat auf Messungen, die innerhalb weniger Jahre gemacht werden, keinen Einfluss. Messungen des Erdmagnetfeldes auf dem Erdboden zeigen zudem einen Tagesgang. Dieser ist darauf zurückzuführen, dass auf der Tagseite in der Atmosphäre durch UV Strahlung Ionen entstehen (Ionosphäre) und

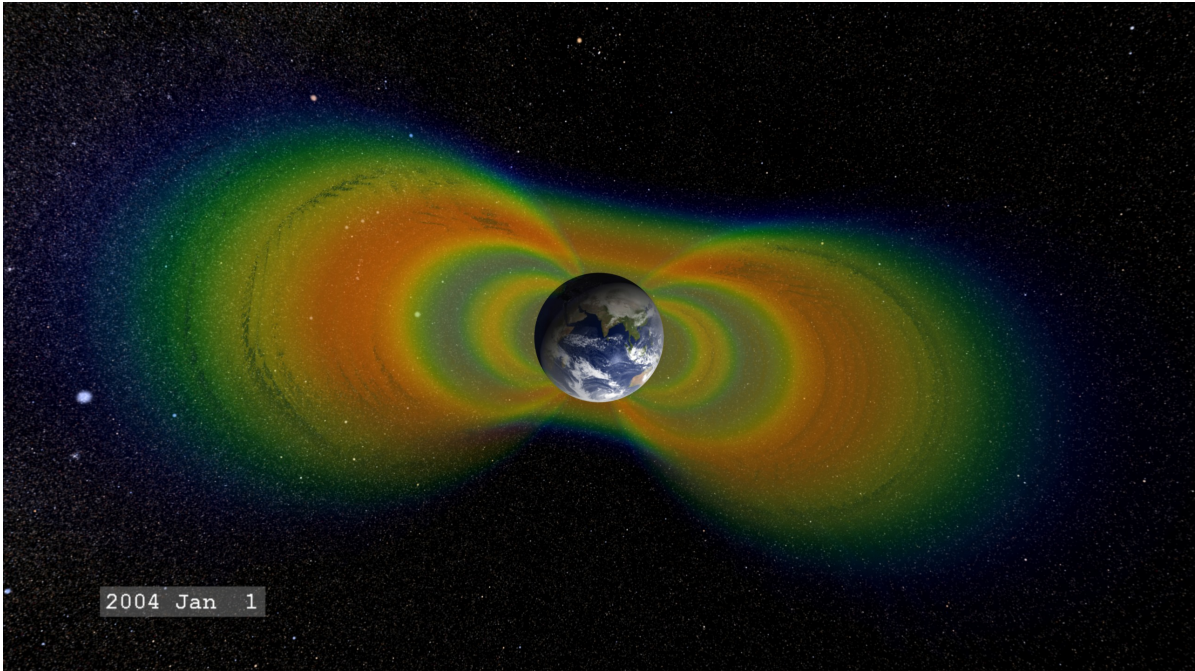


Bild 2.7.: Künstlerische Darstellung der Elektronendichte in den Strahlungsgürteln. Credit: NASA

infolgedessen Ströme, die wiederum das Erdmagnetfeld beeinflussen.

2.2.1. Strahlungsgürtel

Elektronen können im Erdmagnetfeld innerhalb eines Torus gefangen sein. Dasselbe gilt für Protonen, doch ist für diese Arbeit nur der Torus der Elektronen relevant. Er ist künstlerisch durch die Elektronendichte in Bild 2.7 dargestellt, man nennt ihn Strahlungsgürtel. Die Elektronendichte stellt im Bild gleichzeitig auch das Magnetfeld dar, das bis zu einem Abstand von wenigen Erdradien einem Dipolfeld ähnelt. Man erkennt ein inneres und ein äußeres Dichtemaximum. Diese Strukturen sind variabel in ihrem Abstand zur Erde - man spricht von einem inneren und einem äußeren Strahlungsgürtel.

Im Folgenden wird auf die verschiedenen Bewegungen eines geladenen Teilchens im Strahlungsgürtel eingegangen, die u.a. erklären, wieso die geladenen Teilchen dort gefangen sind. Abschließend werden noch Zunahme- und Verlustprozesse der Teilchenpopulation im Strahlungsgürtel erläutert.

Ein geladenes Teilchen mit der Ladung q und der Geschwindigkeit \vec{v} erfährt in einem elektromagnetischen Feld die Lorentzkraft

$$\vec{F}_L = q(\vec{E} + \vec{v} \times \vec{B}). \quad (2.1)$$

Ist das Elektrische Feld $\vec{E} = 0$ und ist die zum Magnetfeld \vec{B} senkrechte Geschwindigkeitskomponente $v_{\perp} \neq 0$ ($\vec{v} = \vec{v}_{\perp} + \vec{v}_{\parallel}$), erfährt das geladene Teilchen eine Kraft, die senkrecht zu \vec{B} gerichtet ist. Ist i) $v_{\parallel} = 0$ oder ii) $v_{\parallel} \neq 0$, bewegt sich das geladene

2. Solare Variabilität

Teilchen i) auf einem Kreis oder ii) auf einer Spirale, beidesmal mit dem Larmorradius:

$$r_L = \frac{mv_{\perp}}{qB} \quad (2.2)$$

Diese, die Magnetfeldlinien umkreisende Bewegung der geladenen Teilchen, nennt man Gyration. Dabei ist das Magnetische Moment

$$\mu = \frac{mv_{\perp}^2}{2B} \quad (2.3)$$

eine Erhaltungsgröße.

In den Strahlungsgürteln ist r_L von der Phase φ der Gyration abhängig, da dort das Erdmagnetfeld einem Dipolfeld ähnelt, damit inhomogen ist und mit zunehmender Höhe abnimmt. Es gibt also eine Komponente von $\vec{\nabla}B$, die senkrecht zu \vec{B} steht. Je geringer die Höhe des geladenen Teilchens ist, desto größer wird B und desto kleiner wird r_L . Dies führt zu einer effektiven Geschwindigkeit, die sowohl senkrecht zu \vec{B} als auch senkrecht zu $\vec{\nabla}B$ gerichtet ist. Diese Bewegung nennt man Drift. Aufgrund ihrer unterschiedlichen Ladung führen Elektronen und Protonen ihre Driftbewegung in entgegengesetzter Richtung aus. Infolgedessen kommt es zu einer Ladungstrennung und zum sogenannten Ringstrom (engl. ring current), der um den Äquator fließt.

Die Magnetfeldlinien verdichten sich in den Strahlungsgürteln in den höheren Breiten, was in Bild 2.7 deutlich zu sehen ist. Es existiert also auch eine Komponente von $\vec{\nabla}B$, die parallel zu \vec{B} steht. Ist $\vec{E} = 0$ so ist die kinetische Energie eines geladenen Teilchens erhalten und es gilt unter der Berücksichtigung von Gleichung 2.3:

$$W_{\text{kin}} = \frac{1}{2}mv^2 = \frac{1}{2}m(v_{\parallel}^2 + v_{\perp}^2) = \frac{1}{2}mv_{\parallel}^2 + \mu B. \quad (2.4)$$

Wenn $v_{\perp} > 0$ ist, gilt $\mu = \text{const.} > 0$. Deshalb muss eine Zunahme von B mit einer Abnahme von v_{\parallel} kompensiert werden. Es gibt also einen Spiegelpunkt, an dem $v_{\parallel} = 0$ ist und das geladene Teilchen infolgedessen wieder zurück in Richtung schwächeres Magnetfeld reflektiert wird. Die Position des Spiegelpunktes wird durch den Pitchangle

$$\tan \alpha = \frac{v_{\perp}}{v_{\parallel}} \quad (2.5)$$

des geladenen Teilchens bestimmt. Der Pitchangle ist abhängig von der geomagnetischen Breite und sein Betrag ist am geomagnetischen Äquator minimal. Im Dipolfeld der Erde gibt es für ein geladenes Teilchen je einen Spiegelpunkt für die geomagnetische Nord- und Südhemisphäre. Das Teilchen wird also von Spiegelpunkt zu Spiegelpunkt hin und her reflektiert. Diese Bewegung nennt man "Bouncen". Die Frequenzen der Elektronen und Protonen, die gyrieren, bouncen und driften, sind in Tabelle 2.2 eingetragen.

In diesem auf den ersten Blick abgeschlossenen System der Strahlungsgürtel, in dem geladene Teilchen gyrieren, driften und bouncen, gibt es dennoch Quellen und Senken der Teilchenanzahl. Im inneren Strahlungsgürtel hat ein Teilchen eine Lebensdauer in der Größenordnung von 100 Tagen, im äußeren Strahlungsgürtel hingegen nur Stunden bis wenige Tage.

2. Solare Variabilität

Tabelle 2.2.: Frequenzen der Bewegungen von Elektronen und Protonen (jeweils von 10^{-3} – 10^3 MeV) in den Strahlungsgürteln

Bewegung	e	p
Gyration	0.01-300 kHz	1-300 Hz
Drift	0.03-300 mHz	0.03-300 mHz
Bounce	0.3-10 Hz	0.01-3 Hz

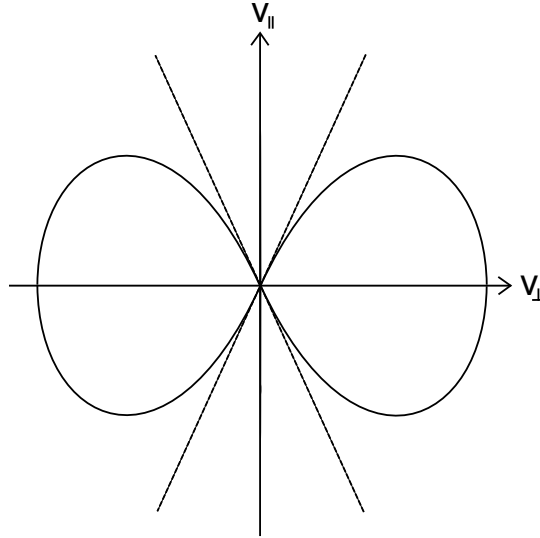


Bild 2.8.: Losscone-Verteilungsfunktion. Die gestrichelten Linien bilden die Grenze und damit den Mantel eines Kegels.

Hat ein Teilchen einen zu kleinen Pitchangle $\alpha < \alpha_{LC}$, dringt es tief in die Erdatmosphäre ein. Durch Streuprozesse in der immer dichter werdenden Atmosphäre kann es den Strahlungsgürteln entweichen. Deshalb haben alle geladenen Teilchen im Strahlungsgürtel einen größeren Pitchangle als α_{LC} . Solch eine Verteilungsfunktion nennt man Losscone-Verteilungsfunktion, welche in Bild 2.8 dargestellt ist. Es ist deutlich erkennbar, dass zu einer isotropen Verteilung ein Kegel um v_{\parallel} fehlt. Resonante Wechselwirkung der geladenen Teilchen mit Plasmawellen (Millan und Thorne, 2007) führt zu einer Pitchangle-Streuung, weshalb jene Teilchen aus den Strahlungsgürteln entweichen können. Während geomagnetischer Aktivität ist die gesamte Struktur der Magnetosphäre in Unruhe, sodass viele Teilchen in den Losscone hinein gestreut werden können. Teilweise wird fast der gesamte äußere Strahlungsgürtel geleert.

Gleichzeitig gibt es während geomagnetischer Aktivität in den äußersten Regionen des äußeren Strahlungsgürtels einen Teilchenfluss in diesen hinein. Er wird also simultan zur Leerung von außen wieder aufgefüllt. Geladene Teilchen im inneren Strahlungsgürtel können auch durch Neutronenzerfall entstehen. Die Neutronen wiederum entstehen durch den Eintritt von kosmischer Strahlung (z.B. 5 GeV-Protonen) in die Erdatmosphäre.

2.3. Teilchenniederschlag

Geladene Teilchen, vor allem Elektronen und Protonen, können aus unterschiedlichen Quellen in die Erdatmosphäre präzipitieren. Das bekannteste Phänomen ist hierbei sicher die in der Einleitung erwähnte Aurora. Hierbei handelt es sich um Elektronen und Protonen aus der Magnetosphäre, die, durch magnetische Rekonnexion am Plasma Sheet und andere zusätzliche Kräften beschleunigt, bis 80 km (Elektronen) bzw. 300-500 km (Protonen) Höhe in die Erdatmosphäre eindringen können. Die Ursachen anderer Kräfte, die zur Beschleunigung der Teilchen beitragen, sind Gegenstand aktueller Forschung (Haerendel, 2011).

In dieser Arbeit werden aber Niederschläge aus anderen Quellen analysiert: Zum einen das direkte Eindringen der Schockfront einer CME in die Polarkappen - solares Protonenereignis (SPE) genannt - zum anderen Elektronenniederschlag (energetic electron precipitation, EEP) aus den Strahlungsgürteln.

Gelangen die geladenen Teilchen einer CME in die Polarkappen, z.B. während der günstigen Vorraussetzung eines offenen Erdmagnetfelds, können diese in die Atmosphäre präzipitieren. Die Energie der Teilchen wird in Ionisation und Wärme umgesetzt. Den Energieverlust dE eines ionisierenden Teilchens pro Weglänge ds beschreibt die Bethe-Bloch-Gleichung:

$$\frac{dE}{ds} = -\frac{e^4}{4\pi\epsilon_0 m_e} \frac{Z^2}{v^2} n_e \left[\ln \frac{2m_e v^2}{\langle E_B \rangle} - \ln(1 - \beta^2) - \beta^2 \right] \quad (2.6)$$

Dabei stehen im ersten Bruch folgende Fundamentalkonstanten: Die Elementarladung e , die elektrische Feldkonstante ϵ_0 und die Masse des Elektrons m_e . Abhängigkeiten bestehen mit der Ladung Z des Teilchens und seiner Geschwindigkeit v . n_e bezeichnet die Elektronendichte im Material (hier: in der Atmosphäre). $\langle E_B \rangle$ ist das mittlere Anregungspotential. Ist v nicht sehr viel kleiner als die Lichtgeschwindigkeit c , so wird die relativistische Korrektur mit $\beta = v/c$ wichtig.

Protonen, Alphateilchen und schwerere Ionen wechselwirken beim Eindringen in die Atmosphäre größtenteils mit den Elektronen der Atome und der Moleküle. Aufgrund des großen Massenunterschieds legen sie deshalb eine gerade Strecke zurück und es kann mit der Bethe-Bloch-Gleichung die Eindringtiefe dieser Teilchen abgeschätzt werden. Hadronische Wechselwirkungen sind selten, aber z.B. relevant für die Produktion von ^{14}C und damit auch für die bekannte ^{14}C -Datierungsmethode. Bei Elektronen hingegen kann die Eindringtiefe nicht mit der Bethe-Bloch-Gleichung abgeschätzt werden, da sie während ihres Niederschlags mehrfach gestreut werden. Dabei wird Röntgenbremsstrahlung produziert, die wiederum freie Elektronen durch Photoeffekt, Comptoneffekt oder Paarbildung in viel tieferen Schichten der Atmosphäre produzieren kann.

Monte-Carlo-Simulationen dazu finden sich z.B. in Berger et al. (1970) und Wissing und Kallenrode (2009). Elektronen, Protonen und Alphateilchen können in die mittlere Atmosphäre eindringen. Um unterhalb 50 km Höhe präzipitieren zu können, benötigen Elektronen >1 MeV, Protonen >20 MeV und Alphateilchen >100 MeV (Brasseur und Salomon, 2005; Turunen et al., 2009).

2. Solare Variabilität

Es gibt verschiedene Messungen, die Hinweise auf Teilchenniederschlag geben können. Das sind zum einen Messungen des Erdmagnetfelds an Bodenstationen, zum anderen Satellitenmessungen des Elektronen- oder Protonenfluss in den Strahlungsgürteln. Diese sollen im Folgenden kurz vorgestellt werden:

- **Ap Index:** Dieser beruht auf Messungen des Erdmagnetfelds von 13 Messstationen, die in geomagnetischen Breiten zwischen 46° und 63° auf der Süd- und Nordhemisphäre liegen. Zwei Messstationen sind auf der Südhalbkugel und elf auf der Nordhalbkugel. In diesen Messstationen wird die größte Abweichung der Magnetogramme zu einem „ruhigen“ Erdmagnetfeld innerhalb eines 3 h Intervalls als quasi-logarithmische Zahl zwischen 0 und 9 als k Index notiert. Diese Zahlen in eine lineare Skala übertragen ergeben den a Index, der Werte zwischen 0 und 400 annehmen kann. Alle acht a Indizes eines Tages arithmetisch gemittelt ergeben den A Index. Die A Indizes der einzelnen Stationen werden gewichtet und zu einem planetaren Ap Index kombiniert. Der erste berechnete Wert des Ap Index stammt aus dem Jahr 1932. Das ganze Verfahren wird in Allen (1982) und Menvielle und Berthelier (1991) genau beschrieben. Der Ap Index kann als Hinweis auf Teilchenniederschlag gesehen werden: Änderungen in den Teilchenflüssen führen zu Änderungen in elektrischen Strömen in der Erdatmosphäre, deren Auswirkungen als Schwankungen mit dem Ap Index gemessen werden. Diese sind häufig mit Teilchenniederschlag verbunden. Teilchenniederschlag führt wiederum zu Strömen, die das Erdmagnetfeld stören und damit zu Schwankungen im Ap Index führen.
- **Dst Index:** Dieser beruht auf stündlichen Messungen des Erdmagnetfelds von 4 Messstationen in folgenden geomagnetischen Breiten: 26°N (Kakioka), 21°N (Honolulu), 28°N (San Juan) und 33°S (Hermarius). Änderungen des Erdmagnetfelds in diesen Breiten werden durch Änderungen des Ringstroms verursacht und sind damit direkt verknüpft mit der Elektronendichte in den Strahlungsgürteln. Eine Verringerung des Ringstroms ist mit einem negativen Dst Index verknüpft, so dass bei einem Teilchenniederschlag der Dst Index negativ wird. Eine genaue Beschreibung zur Berechnung des Dst Index ist in Sugiura und Kamei (1991) zu finden.
- **Belt Index:** Auf den Polar Operational Environmental Satellites (POES) misst der Medium Energy Proton and Electron Detector (MEPED) innerhalb der Strahlungsgürtel den Fluss von Protonen und Elektronen mit acht Detektoren in 22 verschiedenen Kanälen. Dabei werden Protonen mit Energien zwischen 30 keV und 200 MeV und Elektronen mit Energien zwischen 30 keV und 2500 keV gemessen. Die Elektronenkanäle, die den Energiebereich zwischen 120 keV und 2600 keV messen, sind allerdings empfindlich auf den Protonenfluss. Zudem ist der Protonenkanal, der die hochenergetischen Protonen messen soll, empfindlich auf Elektronen, die größere Energien als ~ 1 MeV haben. Dieser Kanal gilt als guter Detektor für relativistische Elektronen. Dennoch ist eine Interpretation der Daten sehr schwierig und führt zu Problemen, gerade im hochenergetischen Bereich. Die kontaminierenden Einflüsse auf die verschiedenen Kanäle sind in Yando et al. (2011) genau beschrieben. NOAA stellt für jeden Kanal einen Belt

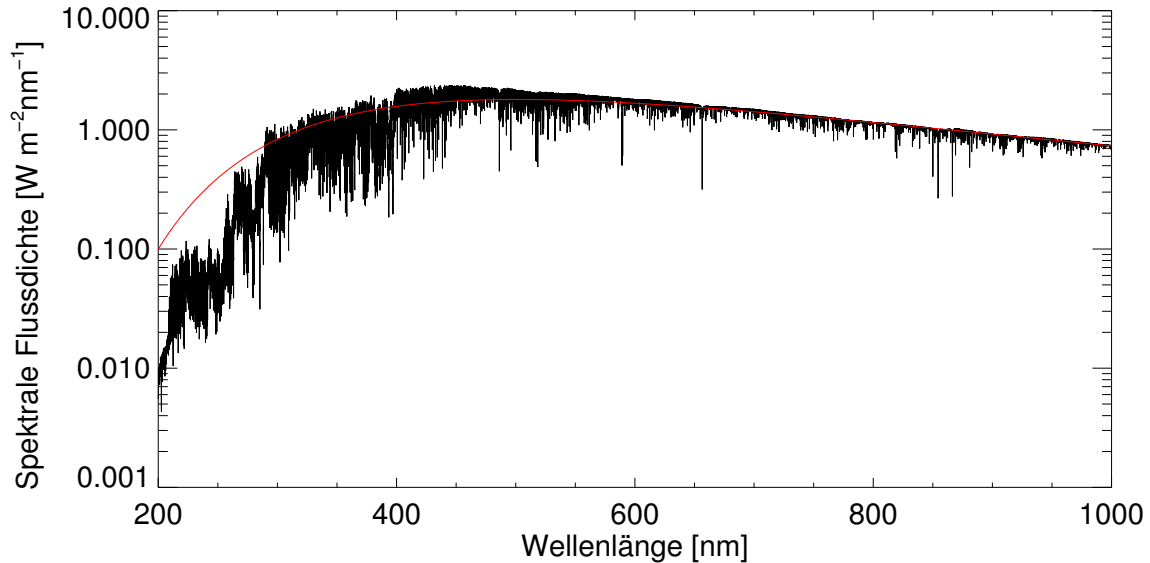


Bild 2.9.: Referenzspektrum der Sonne (schwarz) und eines Schwarzkörpers derselben Größe (rot, $T = 5778\text{ K}$) zwischen 200 nm und 1000 nm bei 1 AE

Index zur Verfügung, der das Verhältnis der Anzahl der gemessenen Teilchen eines Tages zu der Gesamtzahl der gemessenen Teilchen in einem Jahr angibt (<http://www.swpc.noaa.gov/ftpdir/lists/bi/old.bi/README>).

2.4. Sonnenspektrum

Der Schwerpunkt dieser Arbeit liegt zwar auf den Auswirkungen des Teilchenniederschlags auf die mittlere Erdatmosphäre. Dennoch muss die Variation der elektromagnetischen Sonnenstrahlung immer berücksichtigt werden, da diese auch von der Sonnenaktivität abhängig ist und ebenfalls die chemische Zusammensetzung der Erdatmosphäre beeinflussen kann. Diese Variation wurde in Bild 1.1 anhand des 10,7 cm-Radioflusses der Sonne von 1950 bis 2010 veranschaulicht. Weiterhin wurde in der Einleitung schon erwähnt, dass diese Variation wellenlängenabhängig ist. Deshalb wird im Folgenden auf das Spektrum der Sonne eingegangen.

Bild 2.9 zeigt ein aus verschiedenen Messungen berechnetes Referenzspektrum der solaren spektralen Flussdichte bei 1 AE, unbeeinflusst von der Erdatmosphäre (Chance und Kurucz, 2010). Integriert man die Leistung über die Wellenlänge, erhält man die in Kapitel 1 erwähnte Solarkonstante $S_0 = 1367\text{ W/m}^2$. Diese führt zu einer Schwarzkörperstrahlung mit einer Temperatur von 5778 K (rote Kurve), die deshalb als Oberflächentemperatur der Sonne angegeben wird. Das Spektrum der Sonne hat aber verglichen mit dem Schwarzkörperspektrum gravierende Unterschiede:

- Das Sonnenspektrum zeigt sehr viele Absorptionslinien von Atomen, Molekülen, positiven und negativen Ionen.

2. Solare Variabilität

- Die Sonnenatmosphäre befindet sich nicht im thermodynamischen Gleichgewicht, das bedeutet unterschiedliche Atmosphärenschichten mit unterschiedlicher Temperatur tragen zum Sonnenspektrum bei.
- Speziell die um Größenordnungen heißere Sonnenkorona ($\sim 10^6$ K) wird im Schwarzkörperspektrum nicht berücksichtigt, weshalb die extreme UV- und die Röntgenstrahlung der Sonne von einem Schwarzkörperspektrum massiv unterschätzt wird (im Bild nicht gezeigt).
- Effekte des nicht-lokalen thermodynamischen Gleichgewichts, auf das in Kapitel 4.2 eingegangen wird, werden nicht berücksichtigt.
- Von der Sonnenaktivität abhängige Variationen, die vor allem im UV-Bereich auftreten, werden nicht berücksichtigt.

Während des solaren Maximums werden vermehrt dunkle und somit kühlere Flecken auf der Sonnenoberfläche sichtbar. Gleichzeitig mit den Sonnenflecken treten heißere und hellere Regionen auf der Sonnenoberfläche auf, sogenannte faculae (lat. *facula* – kleine Fackel). Im Gesamtstrahlungsfluss S der Sonne überwiegt der Einfluss der faculae, sodass während des solaren Maximums S gegenüber S_0 um $\sim 0,1\%$ erhöht ist, was in Lean (2000) oder auf www.acrim.com nachzulesen bzw. zu sehen ist.

3. Auswirkungen auf die mittlere Atmosphäre

Im vorigen Kapitel wurde beschrieben, wie Elektronen, Protonen und schwerere Ionen in die Erdatmosphäre eindringen können. In dieser hinterlassen sie Spuren - sie verändern ihre chemische Zusammensetzung. Diese wird allerdings maßgeblich von der elektromagnetischen Strahlung der Sonne beeinflusst, sodass man beide Prozesse verstehen muss, um nach Hinweisen für einen Teilchenniederschlag zu suchen. Im Folgenden wird der Aufbau der Erdatmosphäre beschrieben. Danach die für diese Arbeit relevanten Auswirkungen von Teilchenniederschlag und UV-Strahlung auf die obere und mittlere Erdatmosphäre, insbesondere wird auf NO_x eingegangen. Zum Abschluss werden bekannte Zyklen von Spurengasen und der Temperatur beschrieben.

3.1. Struktur und Zusammensetzung der Atmosphäre

Die Erdatmosphäre ist ein Gasgemisch, welches den Festkörper des Planeten Erde umgibt. Druck und Dichte nehmen mit der Höhe ab. Mit Hilfe ihrer höhenabhängigen Temperaturstruktur lässt sie sich in folgende Schichten unterteilen: Troposphäre, Stratosphäre, Mesosphäre, Thermosphäre und Exosphäre (von unten nach oben genannt). In dieser Arbeit wird die Troposphäre untere Atmosphäre genannt. Genaueres zur Troposphäre findet man in Roedel und Wagner (2011). Stratosphäre und Mesosphäre werden mittlere Atmosphäre genannt. Für ihre Chemie und Physik sei Brasseur und Salomon (2005) empfohlen; wichtige Prozesse der mittleren Atmosphäre sind im Folgenden diesem Buch entnommen. Ab der Thermosphäre wird von oberer Atmosphäre gesprochen.

In der Troposphäre nimmt die Temperatur mit der Höhe ab. Das liegt an der Kombination von ausgesandter Strahlung, Konvektion und nach oben gerichtetem Transport von latenter Wärme. Die Troposphäre ist an den Polen annähernd 10 km dick und am Äquator ~ 16 km. Sie enthält ca. 85 % der Gesamtmasse der Erdatmosphäre und besteht aus ~ 78 % Stickstoff, ~ 21 % Sauerstoff, ~ 1 % Argon und anderen Spurengasen. Ihr Wassergehalt beträgt auf Meereshöhe noch ~ 1 -4 %, nimmt mit der Höhe jedoch sehr schnell ab. Den Übergang zwischen Troposphäre und Stratosphäre bezeichnet man als Tropopause.

Bild 3.1 zeigt das zonale Mittel der höhenabhängigen chemischen Zusammensetzung und der Temperatur des Karlsruher dreidimensionalen Chemietransportmodells (K3dCTM) bei $59,6^\circ\text{N}$ am 4. August 2008 (der Modelllauf wurde von Holger Nieder durchgeführt). Dabei ist das Volumenmischungsverhältnis (engl.: volume mixing ratio, VMR) der Gase angegeben. Mit Hilfe dieser Darstellung soll im weiteren Verlauf die

3. Auswirkungen auf die mittlere Atmosphäre

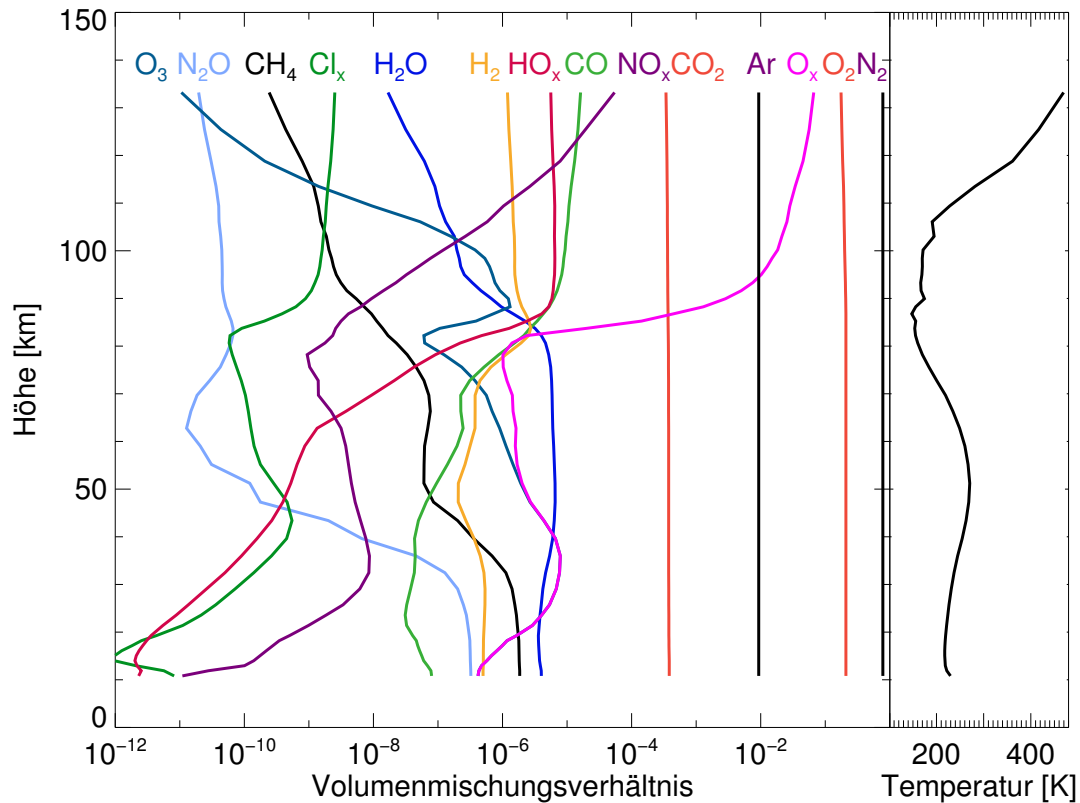


Bild 3.1.: Modellerte chemische Zusammensetzung (links) und Temperatur (rechts) der Erdatmosphäre. Die Daten des K3dCTM-Laufs zeigen jeweils das zonale Mittel bei $59,6^\circ N$ am 4. August 2008. Der Modellauf wurde von Holger Nieder durchgeführt. Argon wurde erst im Bild hinzugefügt.

Struktur der mittleren und oberen Erdatmosphäre beschrieben werden. Die Temperatur wird bei K3dCTM durch das Leibnitz-Institute middle atmosphere (LIMA)-Modell vorgegeben (Berger, 2008).

In der Stratosphäre nimmt die Temperatur mit der Höhe zu. Ausschlaggebender Prozess hierfür ist die Absorption von UV-Strahlung durch Ozon in den Hartley- und Huggins-Banden (200-310 nm, bzw. 310-400 nm). Das VMR von Ozon hat sein Maximum in der Stratosphäre. Im gezeigten Modell bei ca. 10 ppm in 33 km Höhe, wobei man im Bild beachten muss, dass in der Stratosphäre $O_x \simeq O_3$ gilt ($O_x = O + O_3$). Erzeugt wird Ozon durch die Reaktion von molekularem und atomarem Sauerstoff, wobei letzterer durch die Dissoziation von molekularem Sauerstoff entsteht ($\lambda < 242,2$ nm). Als Senke spielt Photolyse die wichtigste Rolle, daneben aber auch katalytische Abbauprozesse, beispielsweise durch HO_x ($H + OH + HO_2$), NO_x ($N + NO + NO_2$) und Chlorradikale (später für NO_x in den Reaktionen 3.13-3.15 gezeigt). Auch NO_x hat ein Maximum mit ca. 10 ppb bei ~ 30 km Höhe.

3. Auswirkungen auf die mittlere Atmosphäre

Die chemische Zusammensetzung der mittleren Atmosphäre (Strato- und Mesosphäre) ist in ihren häufigsten Gasen (N_2 , O_2 , Ar und CO_2) ähnlich der der Troposphäre. Allerdings ist die Häufigkeit von Wasser nur noch im niedrigen ppmv-Bereich. Die Stratosphäre reicht bis ~ 40 km am Winterpol und ~ 50 km am Sommerpol. Die Grenze zwischen Stratosphäre und Mesosphäre wird Stratopause genannt.

In der Mesosphäre nimmt die Temperatur wiederum mit der Höhe ab, was vor allem durch Strahlungskühlung verursacht wird (z.B. durch CO_2). Durch die mit der Höhe abnehmende Dichte von Ozon verliert der in der Stratosphäre einflussreiche Heizprozess durch UV-Absorption mit zunehmender Höhe an Bedeutung. In den obersten Höhen der Mesosphäre (Mesopause) werden während des Sommers die kältesten Temperaturen der Erde erreicht (~ 130 K). Sie reicht bis zu ~ 85 km am Sommerpol und ~ 100 km am Winterpol. Messungen von Gasen in der Mesosphäre sind eine spezielle Herausforderung. Flugzeuge und Ballone erreichen diese Höhe nicht, Satelliten sind dagegen für eine stabile Umlaufbahn noch nicht weit genug entfernt. Somit eignen sich ausschließlich Raketenexperimente für in situ-Messungen in der Mesosphäre. Für kontinuierliche Messungen über einen längeren Zeitraum benötigt man Methoden der Fernerkundung. Eine Spektralanalyse von thermischen Emissionslinien im Infraroten und im Mikrowellenbereich wird durch die mit der Höhe abnehmende Temperatur in der Mesosphäre erschwert; diese Arbeit basiert aber darauf.

In der oberen Atmosphäre ist der Temperaturgradient wieder positiv. Ursache hierfür ist vor allem die Absorption energiereicher UV-Strahlung durch O_2 in den Schumann-Runge-Banden (175-200 nm) und dem Schumann-Runge-Kontinuum (130-175 nm). Die Temperatur kann in der oberen Thermosphäre je nach Sonnenaktivität 800-2000 K betragen. Auch ändert sich nun die chemische Zusammensetzung mit der Höhe. Atomarer Sauerstoff ist ab ~ 85 km häufiger als CO_2 , ab ~ 115 km häufiger als O_2 . NO und atomarer Stickstoff steigen um mehrere Größenordnungen an. Unterhalb 100 km verhindert ständiges Vermischen durch Stöße und Turbulenzen eine gravitative Trennung der Luftbestandteile. Deshalb nennt man diesen Teil der Atmosphäre auch Homosphäre. Oberhalb 100 km beginnt Diffusion immer wichtiger zu werden. Schwere und leichte Teilchen beginnen sich langsam mit der Höhe zu entmischen; ab 100 km Höhe spricht man deshalb von der Heterosphäre.

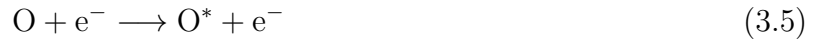
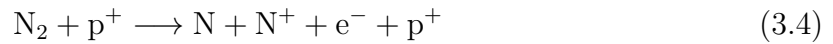
3.2. Teilchenniederschlag in der mittleren Atmosphäre

In Kapitel 2.3 wurde auf die Ursachen des Teilchenniederschlags eingegangen. Ferner wurde gezeigt, wie tief Teilchen in die Erdatmosphäre präzipitieren können. In diesem Kapitel werden die chemischen und physikalischen Auswirkungen auf die mittlere Atmosphäre besprochen. Eine Zusammenfassung der bisher bekannten Auswirkungen findet sich in Sinnhuber et al. (2012), nach deren Aufbau auch hier vorgegangen wird.

Während ihres Niederschlags führen energetische Teilchen zu Anregung (3.1), Ionisation (3.2), Dissoziation (3.3) und dissoziativer Ionisation (3.4) von Molekülen oder zu Anregung (3.5) und Ionisation (3.6) von Atomen; hauptsächlich von N_2 , O_2 und O. Als Beispiel soll ein Proton auf ein Stickstoffmolekül und ein Elektron auf atomaren Sauerstoff

3. Auswirkungen auf die mittlere Atmosphäre

erstoff treffen. N_2^+ , N , N^+ , O und O^+ in den Reaktionen 3.2, 3.3, 3.4 und 3.6 können dabei auch angeregt sein:



(Ionen-)chemische Reaktionen führen dabei zu einer effektiven NO_x -Produktion. Die wichtigsten Folgeprozesse sind die Rekombination von Molekülen (z.B. Reaktion 3.7), Ladungsaustausch (z.B. Reaktion 3.8) oder die Reaktion von neutralen Molekülen mit Ionen (z.B. Reaktion 3.9):



wobei die Reaktionsprodukte wieder durch Rekombination, Ladungsaustausch oder anderen Reaktionen weiter reagieren können. Angeregter atomarer Stickstoff reagiert unmittelbar zu NO :



Ist der atomare Stickstoff im Grundzustand, konkurriert die Reaktion



welche stark temperaturabhängig ist, mit der "kannibalistischen" Reaktion:



die 2 NO_x vernichtet. In der mittleren Atmosphäre entstehen als Folge dieser Reaktionsketten 1,1–1,8 NO_x -Teilchen pro Ionenpaar wie verschiedene theoretische Studien zeigen (Porter et al., 1976; Rusch et al., 1981; Sinnhuber et al., 2012). In Kapitel 6 und 7 wird u.a. versucht die NO_x -Produktionsrate aus Messungen abzuleiten und damit die Theorie zu überprüfen.

Neben NO_x entstehen unmittelbar nach dem Niederschlag energetischer Teilchen 2 HO_x pro Ionenpaar in der mittleren Erdatmosphäre. Dies ist die Folge der Ionisation von O_2 und der Bildung von H_2O -Clusterionen (Sinnhuber et al., 2012). Die Produktion von NO_x und HO_x führt zu Folgereaktionen, die viele Spurengase in der mittleren Erdatmosphäre betreffen. Prominentestes Beispiel ist der katalytische Ozonabbau. Als Beispiel sei der Ozonabbau durch Stickstoffradikale aufgezeigt:



3. Auswirkungen auf die mittlere Atmosphäre

HO_x hat verschiedene katalytische Ozonabbauzyklen; dazu sei auf Brasseur und Salomon (2005) verwiesen. Weitere bekannte Beeinträchtigungen von Spurengasen sind die Produktion von NO_y ($\text{N} + \text{NO} + \text{NO}_2 + \text{HNO}_3 + 2\text{N}_2\text{O}_5 + \text{ClONO}_2 + \text{HNO}_4$), N_2O und verschiedene Chlorverbindungen.

SPE-induzierte Beeinträchtigungen von Spurengasen in den Breiten der Polarkappen wurden von verschiedenen Instrumenten gemessen, z.B. von MIPAS, AURA-MLS oder GOMOS. Folgendes wurde dabei beobachtet:

- NO_x -Produktion (Jackman et al., 2005, 2011; Funke et al., 2011; von Clarmann et al., 2013)
- N_2O_5 -Produktion (López-Puertas et al., 2005; Funke et al., 2011; von Clarmann et al., 2013)
- N_2O -Produktion bei ~ 40 km (Funke et al., 2008; von Clarmann et al., 2013)
- HNO_3 -Produktion oberhalb 35 km (López-Puertas et al., 2005; Funke et al., 2011; Verronen et al., 2011b; von Clarmann et al., 2013)
- HNO_4 -Produktion oberhalb 35 km (von Clarmann et al., 2013)
- OH-Produktion (Verronen et al., 2006; Jackman et al., 2011)
- H_2O_2 -Produktion (Funke et al., 2011; Jackman et al., 2011)
- ClO-Produktion an Breiten mit Sonneneinstrahlung, ClO-Reduktion bei Polarnacht. (von Clarmann et al., 2005; Damiani et al., 2012)
- ClONO_2 -Produktion in der oberen Stratosphäre (von Clarmann et al., 2005; Damiani et al., 2012; von Clarmann et al., 2013)
- HCl-Reduktion in der nördlichen Polarkappe in der Mesosphäre (Winkler et al., 2009)
- HOCl-Produktion bei $80\text{-}90^\circ$ N in der oberen Stratosphäre (von Clarmann et al., 2005; Damiani et al., 2012)
- O_3 -Reduktion (z.B. Jackman et al., 2005; Funke et al., 2011; von Clarmann et al., 2013)

Messungen von Auswirkungen auf die chemische Zusammensetzung der mittleren Erdatmosphäre als Folge von Elektronenniederschlag gibt es deutlich weniger. Bisher wurden folgende Beeinträchtigungen gemessen:

- OH-Produktion oberhalb 52 km (Verronen et al., 2011a; Andersson et al., 2012)
- NO-Produktion zwischen 70 km und 80 km (Newnham et al., 2011)

3. Auswirkungen auf die mittlere Atmosphäre

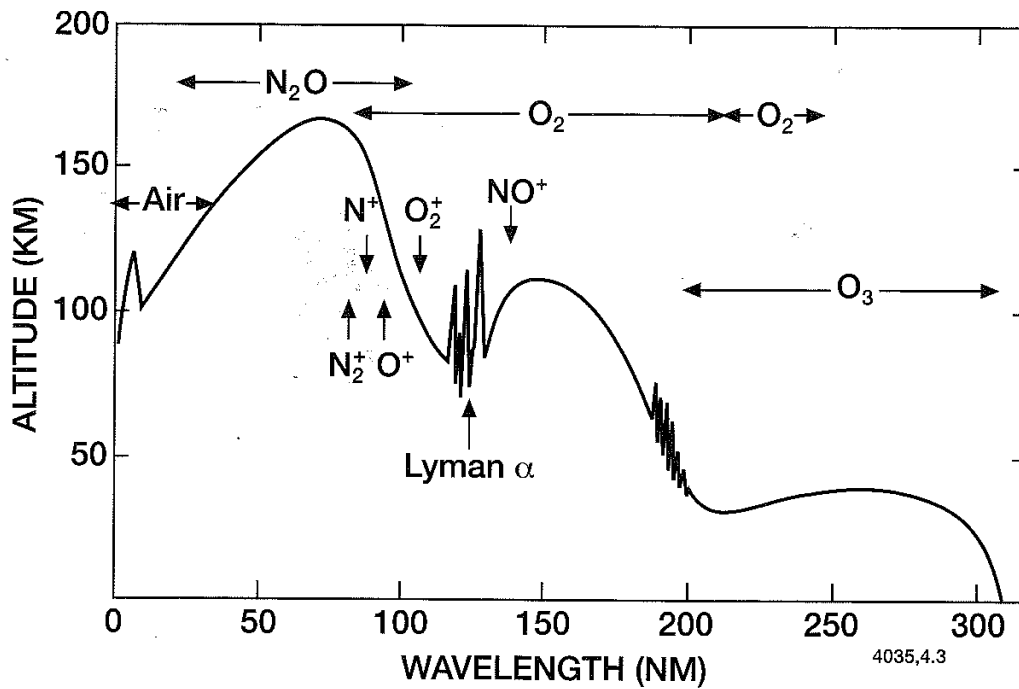


Bild 3.2.: Eindringtiefe von solarer elektromagnetischer Strahlung in die Erdatmosphäre als Funktion ihrer Wellenlänge. Die Kurve gibt eine Abschwächung der Strahlung auf $1/e$ an. Zusätzlich sind die Hauptabsorber und die Ionisationsgrenzen angegeben (Figure 4.3, Brasseur und Salomon, 2005). Mit freundlicher Genehmigung von Springer Science+Business Media.

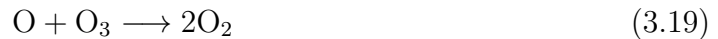
Renard et al. (2006) beobachteten einen Anstieg von stratosphärischem NO_2 im Zeitraum Januar – April 2004 und führten ihn auf Elektronenniederschlag zurück, doch Funke et al. (2007) konnten zeigen, dass dieser durch den Abwärtstransport thermosphärischer Luft verursacht wurde. Dieses Phänomen wird in Kapitel 3.4 beschrieben. Clilverd et al. (2009) berichteten von zusätzlicher NO_x -Produktion durch Elektronenniederschlag im Winter 2004, dennoch bleibt es unklar, inwieweit auch hier Abwärtstransport thermosphärischer Luft verantwortlich ist. Sinnhuber et al. (2014) zeigten, dass man wahrscheinlich nur ein Sampling-Artefakt von GOMOS gesehen hat.

Eine Modellstudie von Jackman et al. (2007) zeigt, dass ein Ozonabbau von 10-70% in der Mesosphäre nach einem starken SPE zu einem Temperaturabfall um bis zu 2,6 K führt. Joulische Erwärmung, verursacht durch den Energieverlust von geladenen Teilchen, die sich in einem elektrischen Feld bewegen, spielt dagegen eine untergeordnete Rolle. Zonale, meridionale und vertikale Windgeschwindigkeiten können sich als Folge um bis zu 25% ändern. Die Änderungen in Temperatur und Wind halten 4-6 Wochen lang an.

3.3. UV-Strahlung in der mittleren Atmosphäre

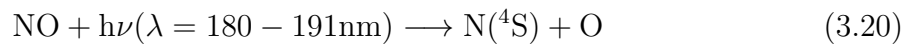
Bild 3.2 (Brasseur und Salomon, 2005) zeigt die Eindringtiefe elektromagnetischer Strahlung in die Erdatmosphäre. Die Kurve zeigt die Höhe an, bei der die Strahlung auf $1/e$ gedämpft wird. Elektromagnetische Strahlung mit einer Wellenlänge $\lambda \lesssim 170$ nm wird in der Thermosphäre durch N_2 , O_2 und O absorbiert. UV-Strahlung mit größerer Wellenlänge ist hingegen in der Lage bis in die mittlere Atmosphäre einzudringen. Sie wird dort hauptsächlich von O_2 und O_3 absorbiert. Bei O_2 von dem Schumann-Runge-Kontinuum (130-175 nm), den Schumann-Runge-Banden (175-200 nm) und dem Herzberg-Kontinuum (200-242 nm), bei O_3 von den Hertley-Banden (200-310 nm) und den Huggins-Banden (310-400 nm).

Chapman (1930) formulierte zuerst eine zusammenhängende Sauerstoffchemie für die mittleren Atmosphäre, den sogenannten Chapman-Zyklus:



Die Reaktionen führen zu einem konstanten Verhältnis von O , O_2 und O_3 in einer reinen Sauerstoffatmosphäre, welches abhängig von der Temperatur und vom Strahlungsfluss ist. Diese Vereinfachung zeigt, dass eine Änderung des Strahlungsflusses Einfluss auf die Häufigkeit von Ozon hat. In der realen Atmosphäre kann diese Änderung auch Einfluss auf andere Moleküle haben.

Der solare Strahlungsfluss zwischen 180 nm und 191 nm (maximale Wellenlänge für Prädissoziation von NO) ist während des solaren Maximums durchschnittlich um $\sim 8\%$ größer als während des solaren Minimums (Marsh et al., 2007). Die NO-Photolyse



in der oberen und mittleren Atmosphäre ist also abhängig von der Sonnenaktivität. Bild 3.2 zeigt, dass UV-Strahlung bis 191 nm bis in die obere Stratosphäre eindringen kann. Variabilitäten im solaren Strahlungsfluss können folglich Auswirkungen auf NO_y -Moleküle bis in diesen Höhenbereich haben. Gleichzeitig beeinflusst thermosphärisches NO den Strahlungsfluss ($\lambda = 180 - 191\text{nm}$) in der Mesosphäre und Stratosphäre (Menschwaner und Siskind, 1993). Eine Erhöhung von thermosphärischem NO z.B. durch aurorale Produktion oder EUV-Strahlung führt den Autoren zufolge zu einer geringeren NO-Photolyserate in der mittleren Atmosphäre. NO-Photolyse führt zu einem Verlust von 2 NO-Molekülen, wenn Reaktion 3.12 folgt. Wenn Reaktion 3.11 folgt, wird die NO-Teilchenanzahl effektiv nicht beeinflusst. Welche der beiden Reaktionen dominiert, ist stark temperaturabhängig. Darauf wird auch in Kapitel 6 eingegangen.

3.4. NO_x in der mittleren Atmosphäre

NO_x hat in der mittleren Atmosphäre zwei wesentliche Quellen. Zum einen die direkte Produktion durch



Zum anderen wird NO_x-reiche Luft aus der Thermosphäre im polaren Vortex während der Winterzeit oder nach einer plötzlichen Stratosphärenenerwärmung (engl.: sudden stratospheric warming, SSW) im Winter in die Mesosphäre und in die Stratosphäre transportiert, was im Folgenden erläutert wird:

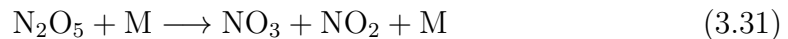
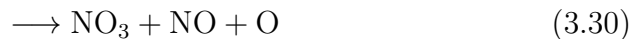
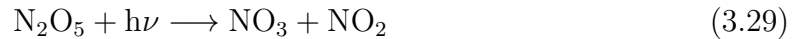
Thermosphärische Luft enthält in hohen Breiten gegenüber der Luft der mittleren Atmosphäre um Größenordnungen mehr NO_x in Form von NO, da NO in auroralen Breiten in der unteren Thermosphäre durch Teilchenniederschlag erzeugt wird (z.B. Siskind et al., 1989). Messungen des Student Nitric Oxide Explorers (SNOE, et al., 1996) sehen das Maximum der NO-Produktion bei ca. 110 km Höhe (Barth et al., 2003). Messungen von MIPAS sehen es ebenfalls bei ca. 110 km (Bermejo-Pantaleón et al., 2011). OSIRIS (Optical Spectrograph and Infrared Imaging System) sieht ein jahreszeitabhängiges Maximum der NO-Teilchendichte zwischen 95 km und 100 km. OSIRIS kann aber nicht oberhalb von 100 km beobachten, was deshalb zu Fehlern führen kann; verschiedene Modelle sehen das Maximum bei ca. 105-110 km (Sheese et al., 2011, 2013). Ferner wird NO_x in der Thermosphäre auch durch Röntgenstrahlung erzeugt (Barth et al., 2003). Diese Luft wird im polaren Vortex in die mittlere Atmosphäre transportiert. Modellvorhersagen von Solomon et al. (1982) dazu wurden kurz danach von Russell III et al. (1984) experimentell bestätigt. Datensätze von langjährigen Satellitenexperimenten bestätigten anschließend diesen, von Randall et al. (2007) genannten „indirekten EEP-Effekt“ (z.B. Siskind und Russell III, 1996; Randall et al., 1998). Sinnhuber et al. (2011) zeigten, dass die Menge der stratosphärischen NO_x-Erhöhung in Abhängigkeit zur geomagnetischen Aktivität steht. Ein Vergleich von geomagnetischer Aktivität und Bodentemperaturen der Jahre 1957-2006 zeigt eine signifikante Beeinträchtigung der Bodentemperaturen in gewissen Regionen der nördlichen Polarkappe um bis zu 4,5 K (Seppälä et al., 2009). Als Erklärungsansatz werden Änderungen im Strahlungshaushalt der Erde genannt, die durch NO_x-induzierten Ozonabbau hervorgerufen werden.

Weitere Quellen von NO_x in der mittleren Atmosphäre sind die in Kapitel 3.2 beschriebenen SPEs und EEPs.

Es wurde gezeigt, dass NO_x eine wichtige Rolle für den Ozonabbau in der mittleren Atmosphäre spielt (Reaktionen 3.13 und 3.14). NO und NO₂ können sich dabei ineinander umwandeln. Darüber hinaus bilden NO und NO₂ in der mittleren Atmosphäre mit den anderen NO_y-Gasen eine Familie, in der sich die einzelnen Gase ineinander umwandeln

3. Auswirkungen auf die mittlere Atmosphäre

können. Neben den schon genannten sind dabei die wichtigsten Reaktionen:



Die Photolyse von NO_3 und N_2O_5 ist dabei sehr effektiv. Das VMR dieser Gase steigt also während der Nacht an. Doch sobald Sonnenstrahlung eintritt, dissoziieren diese Moleküle. NO_y kann auch noch mit den HO_x -Gasen reagieren und bildet z.B. HNO_3 . Es treten zusätzlich auch Reaktionen mit Halogeniden auf, doch beides hat auf die Variabilität der NO_y -Familie in der mittleren Atmosphäre eine untergeordnete Auswirkung.

Als Senke von NO_x spielt die „kannibalistische“ Reaktion 3.12 die dominierende Rolle, wobei N durch Photolyse von NO (Reaktion 3.20) oder durch Teilchenereignisse (Kapitel 3.2) erzeugt wird.

3.5. Zyklen in der mittleren Atmosphäre

Bestimmte Frequenzen oder Perioden in Zeitreihen der Temperatur oder des VMR von Spurengasen lassen auf ihre Ursache schließen. Eine Periode von 24 h bzw. 365 d ist direkt verknüpft mit der Erdrotation bzw. der Erdachsenneigung und der Erdumlaufbahn. 27 d bzw. 11 a sprechen für eine Abhängigkeit von solaren Parametern, die durch die Sonnenrotation bzw. Sonnenaktivität moduliert werden. Im Folgenden wird anhand einzelner Beispiele näher erläutert, wo diese Signale in der mittleren Erdatmosphäre zu beobachten sind. Das Hauptaugenmerk liegt dabei wieder auf den NO_y -Molekülen, da diese Hauptbestandteil im analytischen Teil der Arbeit sind.

Tageszyklus

Bild 3.3 zeigt den von TOMCAT modellierten Tagesgang des VMRs verschiedener NO_y -Spezies in 56 km Höhe bei 63°N und 0°E am 27. und 28. August 2004. In dieser Höhe reagiert NO und O_3 zu NO_2 (Reaktion 3.13). Am Tag ist jedoch die Dissoziation von NO_2 zu NO (Reaktion 3.22, mit $\lambda < 405 \text{ nm}$) deutlich schneller. Folglich überwiegt am Tag der NO-Anteil an NO_y , in der Nacht der NO_2 -Anteil und das VMR von NO und NO_2 besitzt jeweils einen ausgeprägten Tagesgang. Ferner steigt in der Nacht das VMR von NO_3 und N_2O_5 durch die Reaktionen 3.23 und 3.28 stark an. Doch zu Tagesbeginn

3. Auswirkungen auf die mittlere Atmosphäre

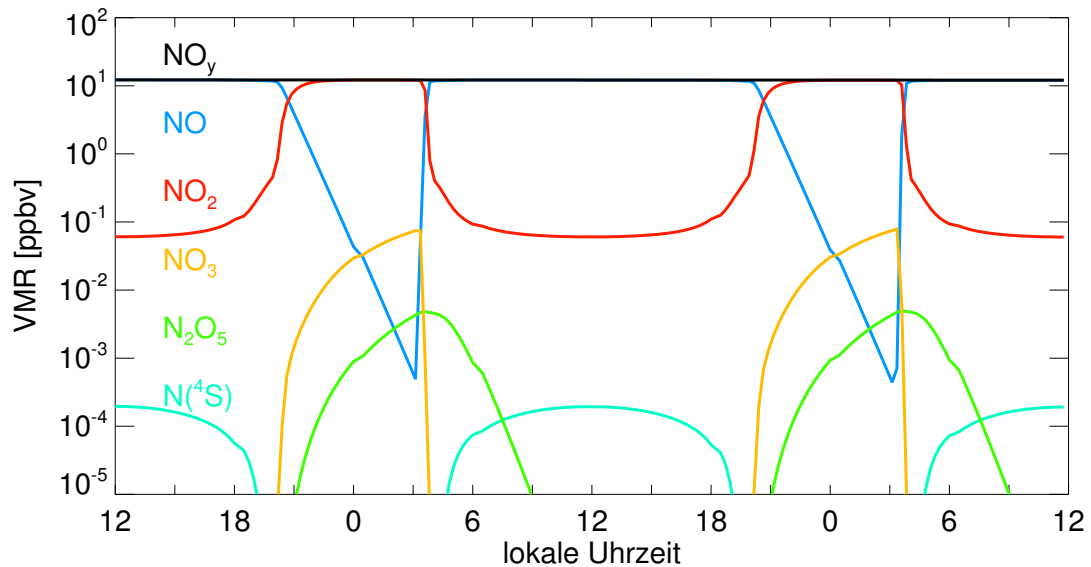


Bild 3.3.: Verlauf von NO_y -VMR und den einzelnen NO_y -Komponenten in ppbv vom 26. August 2004, 12 Uhr, bis 28. August 2004, 12 Uhr. TOMCAT-Modelllauf, 63° N geografische Breite, 0° E Länge, 56 km Höhe.

führt die Photolyse dieser Gase zu einem verschwindend geringen VMR. Photolyse von NO lässt das VMR von $\text{N}(^4\text{S})$ während Sonneneinstrahlung ansteigen. Die VMRs aller hier gezeigten NO_y -Gase sind also stark abhängig von der Lokalzeit und zudem abhängig von dem Sonnenzenitwinkel. Aufgrund der Druck- und Temperaturabhängigkeit der Reaktionsraten ist das VMR der Gase auch abhängig von der Höhe. Da sich die Gase aber ineinander umwandeln, bleibt das VMR von NO_y durch die genannten Reaktionen unbeeinflusst und zeigt keinen Tagesgang.

Jahreszyklus

Bild 3.4 zeigt das von MIPAS/ENVISAT gemessene VMR von NO_x in ppbv als zonales Mittel der geografischen Breite $60 \pm 5^\circ$ N zwischen 18 und 64 km Höhe im Zeitraum vom 01.01.2007-31.12.2011. In jeder Höhe zeigt sich ein Jahresgang. Oberhalb 40 km entsteht um die Jahreswende ein Maximum. Die Ursache dafür ist der zuvor beschriebene Abwärtstransport NO_x -reicher thermosphärischer Luft im polaren Vortex im Winter. Im Sommer bildet sich im ganzen Höhenbereich ein Maximum, da zum einen die NO -Produktion durch N_2O (Reaktion 3.21) an die Länge der Sonnenscheindauer gekoppelt ist. Zum anderen bildet sich durch Sonneneinstrahlung zusätzliches NO_x aus dem NO_y -Reservoir (vor allem HNO_3 und N_2O_5) der Winterhemisphäre.

3. Auswirkungen auf die mittlere Atmosphäre

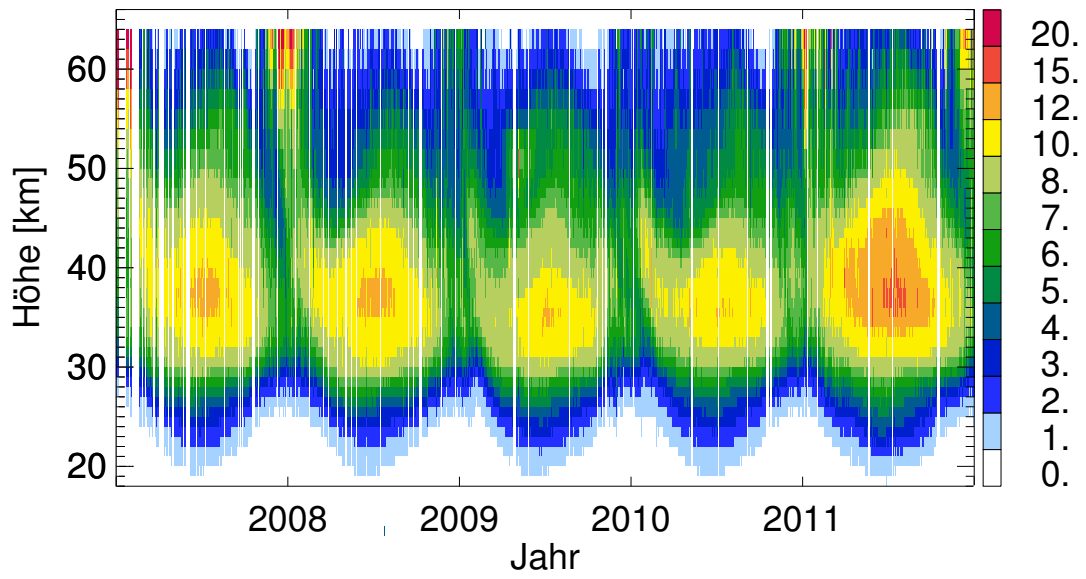


Bild 3.4.: Zeitreihe des von MIPAS/ENVISAT gemessenen NO_x-VMR 2007-2011 in ppbv in 18-64 km Höhe und 60±5°N geografische Breite (zonales Mittel).

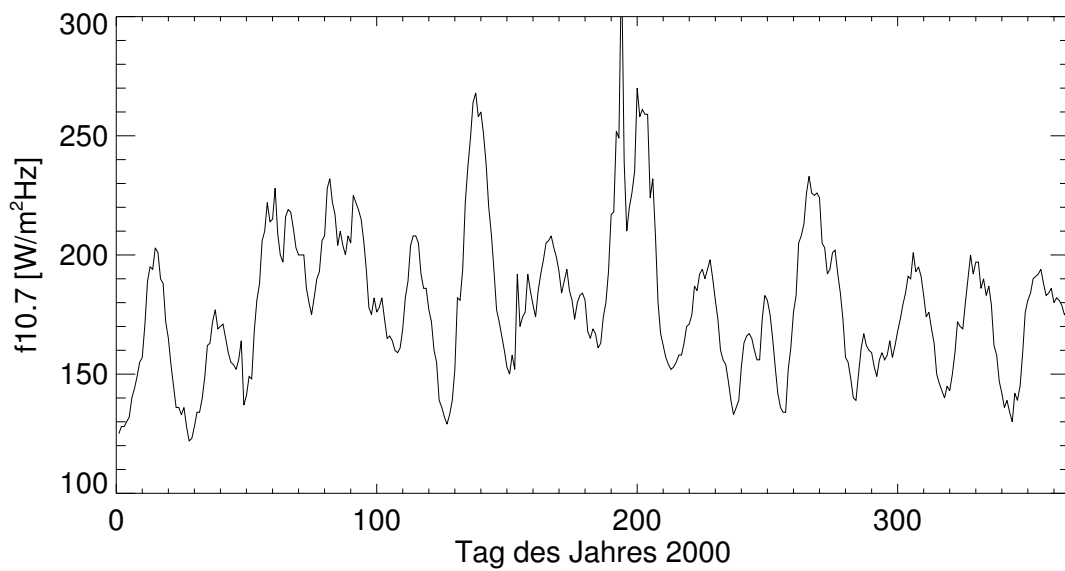


Bild 3.5.: Solarer Radiofluss bei 10,7 cm im Jahr 2000

27-Tage-Zyklus

Bild 3.5 zeigt den solaren Radiofluss bei 10,7 cm im Jahr 2000. Viele Maxima haben zueinander einen Abstand von 27 d; deutlich sichtbar bei den letzten drei. Zudem ist dieser 27-Tage-Zyklus sowohl in anderen Wellenlängen als auch im solaren Teilchenfluss zu beobachten. Auswirkungen auf die Erdatmosphäre lassen sich vor allem in der oberen aber auch in der mittleren Atmosphäre beobachten.

Keating et al. (1986) entdeckten den 27-Tage-Zyklus in Zeitreihen von HNO_3 und NO_2 in äquatorialen Breiten bei ~ 30 km Höhe. Sie erklärten ihn mit einer von der Sonnenaktivität abhängigen Photolyserate für die Moleküle.

In einer anderen Studie wurde der 27-Tage Zyklus in der Temperatur der äquatorialen Mesopause entdeckt (von Savigny et al., 2012). Die Autoren erklärten ihn mit einer direkten Reaktion der Temperatur auf Änderungen im solaren Strahlungsfluss.

Gruzdev et al. (2009) suchten nach dem 27-Tage-Zyklus in NO und NO_2 mit Hilfe eines dreidimensionalen Chemie-Klima-Modells. Sie fanden Abhängigkeiten unterhalb 40 km und oberhalb 60 km Höhe, aber kein signifikantes Signal dazwischen.

Ein Bestandteil dieser Dissertation ist es nach dem 27-Tage Zyklus in den NO_y -Gasen der mittleren Atmosphäre zu suchen.

11-Jahre-Zyklus

In Bild 1.1 ist der 11-Jahre-Zyklus in der Sonnenfleckenanzahl, im 10,7 cm Radiofluss und im Ap Index deutlich sichtbar. Es ist offensichtlich, dass Messungen in der Atmosphäre eine jahrzehntelange Zeitreihe erfordern, um jenen Zyklus darstellen zu können. Messungen der NO -Säule von 50-130 km Höhe in den Jahren 2003-2010 von OSIRIS auf dem Satelliten Odin zeigen eine gute Übereinstimmung, also eine positive Korrelation zwischen dem solaren Zyklus und jener NO -Säule (Sheese et al., 2013). Dennoch bilden die Messungen keinen ganzen Zyklus ab, sodass man bei der Interpretation der Daten sehr vorsichtig sein muss. Auch die in Bild 3.4 dargestellte Zeitreihe ist zu kurz, um fundierte Aussagen über den 11-Jahre Zyklus in der mittleren Erdatmosphäre treffen zu können.

Quasi-biennale Oszillation

Als Quasi-biennale Oszillation (QBO) bezeichnet man eine atmosphärische Welle des zonalen Windes in niedrigen Breiten in der Stratosphäre mit einer Periode von ungefähr zwei Jahren. Die QBO ist unter anderem auch in stratosphärischem NO_2 und NO_3 unterhalb 40 km zu beobachten (Hauchercorne et al., 2010).

4. Molekülspektren und Strahlungstransport

Dieses Kapitel stellt eine Brücke zwischen den Auswirkungen solarer Variabilität auf die chemische Zusammensetzung der mittleren Erdatmosphäre (Kapitel 3) und den Messungen von MIPAS/ENVISAT (Kapitel 5) dar. Bevor beschrieben werden kann, wie die chemische Zusammensetzung der mittleren Erdatmosphäre gemessen wird, muss erläutert werden, was gemessen werden kann.

Bis auf Raketenexperimente sind in-situ Messungen in der Mesosphäre nicht möglich, weshalb man bei ihrer Erforschung auf Methoden der Fernerkundung angewiesen ist - z.B. mit Hilfe von Satellitenexperimenten. Daher werden im Folgenden die zum späteren Verständnis der Fernerkundung wichtigsten physikalischen Prozesse und Zusammenhänge beschrieben: das Molekülspektrum (Kapitel 4.1), die Modifikationen des Spektrums im gegebenen Umfeld (Kapitel 4.2 und 4.3) und der Strahlungstransport in den Weltraum (Kapitel 4.4).

4.1. Molekülspektren

Moleküle bestehen aus mehreren Atomen, die bei den Temperaturen der mittleren Erdatmosphäre durch kovalente und/oder ionische Bindung zusammengehalten werden. Es wird unterschieden zwischen homogenen Molekülen, die aus denselben Atomen bestehen (z.B. N_2), und heterogenen Molekülen, die aus unterschiedlichen Atomen bestehen (z.B. NO). Für ein grundlegendes Verständnis der Molekülphysik seien Lehrbücher, z.B. von Hertel und Schulz (2008, 2010) empfohlen. Im Folgenden soll die Charakteristik eines diatomaren heterogenen Molekülspektrums aufgrund seiner Wechselwirkung mit elektromagnetischer Strahlung erläutert werden. Weiterhin sollen die wesentlichen Prozesse beschrieben werden, die für die Eigenschaften des Spektrums verantwortlich sind.

Das Spektrum eines Moleküls zeigt Linien in unterschiedlichen Wellenlängenbereichen, vom UV bis hin zum Mikrowellenbereich. Je nach Wellenlänge sind unterschiedliche Prozesse für die Emission/Absorption eines Photons verantwortlich. Übergänge von

$$\left. \begin{array}{l} \text{Elektronenzuständen} \\ \text{Vibrationszuständen} \\ \text{Rotationszuständen} \end{array} \right\} \text{erzeugen Linien} \left\{ \begin{array}{l} \text{im UV und im Sichtbaren} \\ \text{im Infraroten} \\ \text{im Bereich der Mikrowellen} \end{array} \right. .$$

Um ein reines Rotationsspektrum ausbilden zu können, benötigen Moleküle ein Dipolmoment. Das zweiatomige homonukleare Molekül N_2 besitzt dieses z.B. nicht und hat

deshalb kein reines Rotationsspektrum. NO dagegen besitzt ein Rotationsspektrum, da es als diatomares heterogenes Molekül ein elektrisches Dipolmoment besitzt. Die Besetzungszahlen der Rotationszustände sind im lokalen thermodynamischen Gleichgewicht (engl.: local thermal equilibrium, LTE) durch die Boltzmannverteilung bestimmt, deren allgemeine Form im nächsten Abschnitt gegeben wird (Gleichung 4.1). Der Entartungsgrad $g = J \cdot (J + 1)$, wobei J den Rotationszustand bezeichnet, sorgt dafür, dass die Besetzungszahl mit dem Rotationsniveau ansteigt. Der von der Temperatur abhängige Boltzmannfaktor sorgt dafür, dass die Besetzungszahl mit dem Rotationsniveau abnimmt. Daher sieht man in Rotationsbanden ein Maximum der Besetzungszahlen.

Es gilt zu beachten, dass bei der Absorption oder Emission eines Photons der Drehimpuls $\pm\hbar$ auf das Molekül übertragen wird. Bei reinen Vibrationsübergängen verändert sich der Drehimpuls aber nicht. Nur Rotationsübergänge können den Drehimpuls kompensieren. Deshalb hat z.B. N_2 auch kein Vibrationspektrum. Bei zweiatomigen heterogenen Molekülen wie z.B. NO ist dies aber möglich. Den Vibrationsübergängen müssen hier wegen der Änderung des Drehimpulses Übergänge von Rotationszuständen überlagert sein. Letztere sind mit sehr viel kleineren Energien verbunden. Deshalb liegen die einzelnen Linien von Vibrationsübergängen mit unterschiedlichen Rotationsübergängen im Spektrum eng beieinander und bilden sogenannte Banden. In Bild 4.1 ist dargestellt, wie eine solche Bande entsteht. Die Auswahlregeln für die Rotations-Vibrationsübergänge eines reinen, harmonischen Oszillators sind $\Delta J = \pm 1$ und $\Delta v = \pm 1$, wobei v den Vibrationszustand bezeichnet. Die Wellenlänge, die der Energie eines reinen Vibrationsübergangs entspricht, bezeichnet man als Bandenursprung oder Q-Zweig. Dies ist ein verbotener Übergang bei zweiatomigen Molekülen. Im Bild ist dieser Übergang durch die mittlere Linie gekennzeichnet. Linien mit $\Delta J = +1$ bei Absorption eines Photons sind gegenüber dem Q-Zweig zu kleineren Wellenlängen verschoben und bilden den R-Zweig (rechte Seite des Bildes). Linien mit $\Delta J = -1$ bei Absorption eines Photons sind zu größeren Wellenlängen verschoben und bilden den P-Zweig (linke Seite des Bildes).

Die Zustände des elektronisch nicht angeregten NO-Moleküls spalten sich noch weiter auf (im Bild nicht gezeigt). Da der Kernspin I des $^{14}N^{16}O$ -Isotops, das über 99% aller NO-Moleküle bildet, $I = 1$ ist und der Elektronenspin $S = 1/2$, bildet sich die Hyperfeinstruktur mit den Zuständen $F = 1/2$ und $F = 3/2$ aus.

Vibrations-Rotationsübergänge überlagern die elektronischen Übergänge, weshalb auch im UV und im visuellen Bereich Banden in den Spektren zu sehen sind. Da beim elektronischen Übergang für die Änderung des Bahndrehimpulses $\Delta l = \pm 1$ gilt, sieht man auch bei denjenigen Molekülen einen Q-Zweig im Spektrum, bei denen man in den Vibrationsbanden keinen sieht.

4.2. LTE+NLTE

Im LTE werden die Besetzungszahlen einzelner Zustände durch Stöße im Gas und somit von der kinetischen Temperatur T_{kin} kontrolliert. Ist ein Molekül in der mittleren Atmosphäre im LTE, so ist das Verhältnis der Besetzungszahlen zweier Zustände n_j und n_i mit

4. Molekülspektren und Strahlungstransport

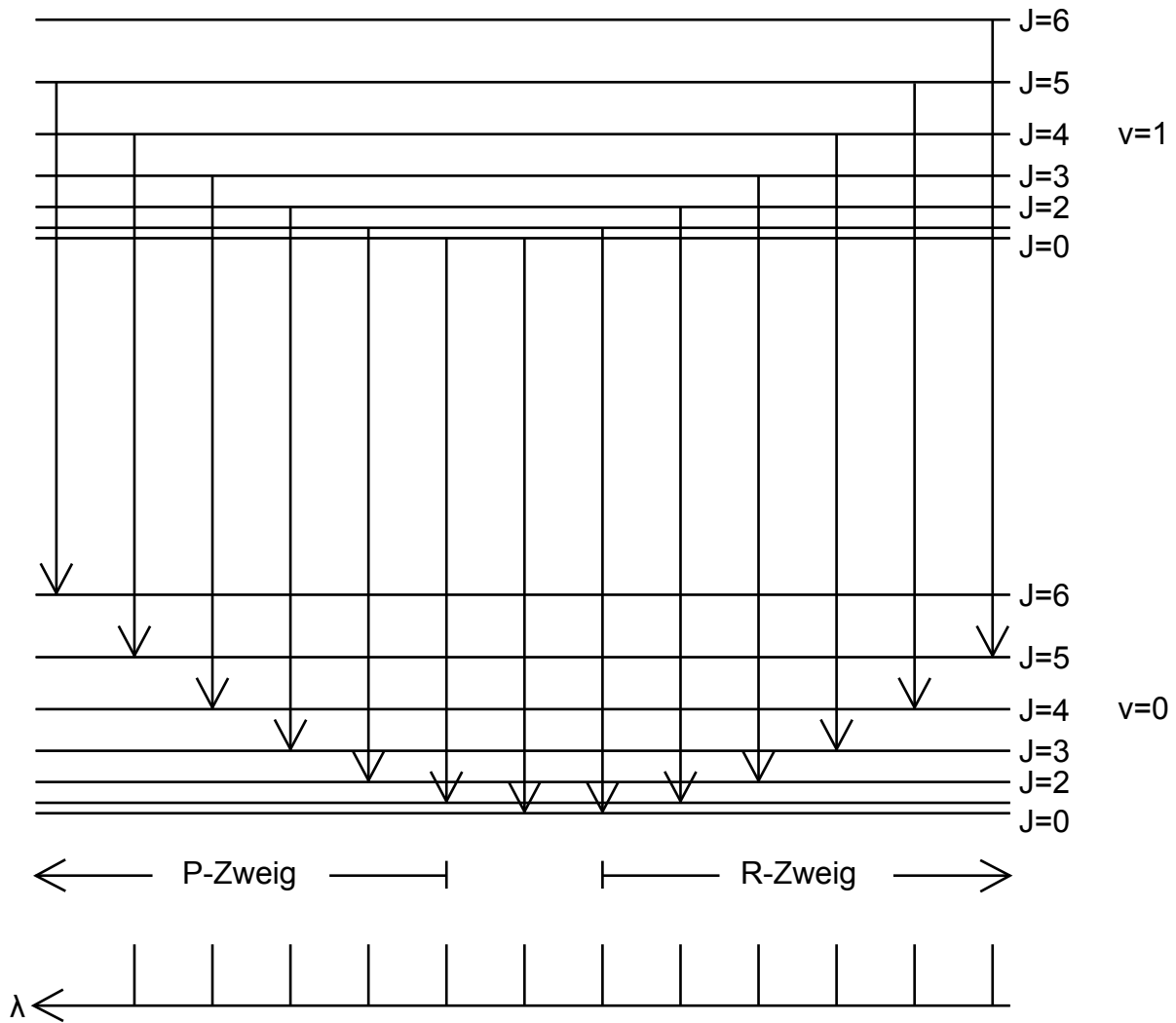


Bild 4.1.: Qualitatives Rotationsvibrationsspektrum eines heterogenen diatomaren Moleküls.

$j > i$, deren Energiedifferenz $E_j - E_i$ sein soll, gegeben durch die Boltzmann-Verteilung:

$$\frac{n_j}{n_i} = \frac{g_j}{g_i} \exp\left(-\frac{E_j - E_i}{k_B T_{\text{kin}}}\right). \quad (4.1)$$

g_j und g_i bezeichnen den jeweiligen Entartungsgrad des Zustands. Dabei können Elektronen-, Vibrations-, Rotations- und Spinzustände gemeint sein. Mit abnehmendem Druck, das heißt mit zunehmender Höhe in der Erdatmosphäre werden die Besetzungszahlen einzelner Zustände nicht mehr ausschließlich durch T_{kin} geregelt. So können sie durch Absorption und Emission elektromagnetischer Strahlung geregelt werden, durch (photo-)chemische Reaktionen oder weitere nicht-thermische Prozesse. Einzelne Niveaus können somit - verglichen mit den Besetzungszahlen im LTE - über- oder unterbesetzt sein. Ist dies der Fall, befindet sich ein Gas im Non-LTE (NLTE). Dann lassen sich die

Besetzungszahlen nur noch mit Hilfe des statistischen Gleichgewichts der Raten aller beteiligten Prozesse berechnen. Aus dem Verhältnis der Besetzungszahlen der einzelnen Vibrations-, Rotations- und Spinzustände zum Grundzustand werden die Temperaturen T_{vib} , T_{rot} und T_{spin} berechnet, die im NLTE von T_{kin} abweichen und es deshalb in der Gleichung 4.1 ersetzen. Je stärker das NLTE ausgeprägt ist, desto stärker ist auch die Abweichung der Temperaturen.

Einige Zustände von NO und NO₂ sind in der mittleren Atmosphäre im NLTE. Bei der NO(1→0)-Bande bei 5.3 μm treten NLTE-Effekte schon ab 20 km Höhe auf, da bei der NO-Produktion durch NO₂-Photolyse angeregte Vibrationszustände überbesetzt werden (Kaye und Kurner, 1987; Funke et al., 2005). Bei der NO₂($v_3 \rightarrow v_3 - 1$)-Bande bei 5.3 μm sind je nach Tages- und Jahreszeit die ersten angeregten Zuständen ab 50-60 km Höhe im NLTE (Funke et al., 2005, 2012).

4.2.1. GRANADA

Der Generic RAdiative traNsfer AnD non-LTE population Algorithm (GRANADA, Funke et al., 2012), berechnet T_{vib} , T_{rot} und T_{spin} sowie die Verhältnisse der Besetzungszahlen der Vibrations-, Rotations- und Spinzustände im NLTE zu denen im LTE. Als Input benötigt GRANADA Höhenprofile der Temperatur und der zu berücksichtigenden Gase sowie Photolyse- oder Reaktionsraten. GRANADA berechnet die Gleichungen des statistischen Gleichgewichts und des Strahlungstransportes und bietet dabei zwei verschiedene Lösungsansätze: Invertierung mittels der Curtismatrix und λ -Iteration. Der Strahlungstransport kann entweder line-by-line oder in der statistischen Bande berechnet werden.

4.3. Linienverbreiterung

Spektrallinien sind nicht auf eine exakte Wellenlänge begrenzt, sie haben eine gewisse Breite, die u.a. durch verschiedene Eigenschaften (z.B. Druck oder Temperatur) der Umgebung beeinflusst wird. Aufspaltungen von Linien, verursacht durch ein Magnetfeld oder ein elektrisches Feld, spielen in der Erdatmosphäre eine untergeordnete Rolle. Die verschiedenen Prozesse, die zu einer Linienverbreiterung führen, sollen im folgenden beschrieben werden:

Natürliche Linienverbreiterung

Jeder angeregte Zustand hat eine endliche Halbwertszeit $t_{1/2}$ bzw. eine endliche Lebensdauer $\tau = \frac{t_{1/2}}{\ln(2)}$, da er sich irgendwann abregt, z.B. durch spontane Emission. Die Heisenbergsche Unschärferelation

$$\Delta E \cdot \tau \geq \hbar \quad (4.2)$$

zeigt, dass auch ΔE einen endlichen Wert hat und größer als 0 sein muss. Der Energieunterschied E zwischen zwei Zuständen ist also nicht exakt definiert, sondern schwankt um

ΔE . Dies führt zu einer natürlichen Linienverbreiterung. Es kann also keine unendlich scharfe Linie geben.

Dopplerverbreiterung

Die Maxwell-Boltzmann-Verteilung beschreibt die statistische Verteilung der Geschwindigkeit v eines Moleküls bei einer Temperatur T . Aus ihr folgt, dass die mittlere thermische Geschwindigkeit v_{th} eines Moleküls in der Erdatmosphäre

$$v_{\text{th}} = \sqrt{\frac{2k_{\text{B}}T}{m_{\text{Mol}}}}. \quad (4.3)$$

beträgt. Dabei steht k_{B} für die Boltzmannkonstante, T für die Temperatur der Luft und m_{Mol} für die Masse des Moleküls. Die Ruhewellenlänge λ_0 ist somit auf folgende Wellenlänge dopplerverschoben:

$$\lambda_{\text{th}} = \lambda_0 \left(1 + \frac{v_{\text{th}}}{c}\right). \quad (4.4)$$

Dabei steht c für die Lichtgeschwindigkeit. Für einen Beobachter ist die Radialgeschwindigkeit der Moleküle entscheidend. Sie liegt zwischen $-v_{\text{th}}$ und v_{th} und führt schließlich zu einer Linienverbreiterung. Das gaußförmige, temperaturabhängige Dopplerprofil Φ_{D} eines Übergangs lässt sich folgendermaßen berechnen:

$$\Phi_{\text{D}}(\lambda, T) = \lambda_0 \sqrt{\frac{m_{\text{Mol}}}{2\pi k_{\text{B}}T}} \cdot \exp \left[- \left(\frac{\lambda - \lambda_0}{\lambda_0} \right)^2 \frac{c^2 m_{\text{Mol}}}{2k_{\text{B}}T} \right] \quad (4.5)$$

Druckverbreiterung

Die Lebenszeit τ eines angeregten Zustandes ist von den Stoßraten der Atome und Moleküle in der Luft abhängig. Diese sind wiederum abhängig vom Druck p . Somit ist τ abhängig von p und die Linienbreite vergrößert sich bei zunehmendem Druck. Mathematisch darstellen lässt sich die Druckverbreiterung einer Linie mit einem Lorentzprofil

$$\Phi_{\text{L}}(\lambda, p, T) = \frac{1}{\pi} \left(\frac{\alpha_{\text{L}}(p, T)}{(\lambda^{-1} - \lambda_0^{-1})^2 + \alpha_{\text{L}}(p, T)^2} \right), \quad (4.6)$$

wobei α_{L} die Halbwertsbreite der Lorentzfunktion darstellt, die für jeden Übergang charakteristisch ist und von Temperatur und Druck abhängig ist.

Voigtprofil

Die Faltung eines Gaußprofils mit einem Lorentzprofil wird Voigtprofil Φ_{V} genannt. Die Faltung der zuvor beschriebenen Profile:

$$\Phi_{\text{V}} = \Phi_{\text{L}}(\lambda, p, T) * \Phi_{\text{D}}(\lambda, T) \quad (4.7)$$

ergibt also ein Voigtprofil und ist analytisch nicht mehr darstellbar.

4.4. Strahlungstransport

Während der Ausbreitung elektromagnetischer Strahlung können verschiedene Prozesse geschehen, die es in der Fernerkundung zu beachten gilt. Das im Weltraum beobachtete Spektrum eines Gases aus der mittleren Atmosphäre kann durch Absorption und Emission in den darüber liegenden Luftschichten beeinflusst werden. Streuprozesse werden hierbei nicht berücksichtigt. Diese Prozesse sind in der integrierten Strahlungstransportgleichung zusammengefasst und werden im Folgenden vorgestellt:

$$S_{\Theta}(\lambda, l_{\text{obs}}) = S_{\Theta}(\lambda, l_0)\tau(\lambda, l_{\text{obs}}, l_0) + \int_{l_{\text{obs}}}^{l_0} J(\lambda, l)\sigma(\lambda, l)\tau(\lambda, l_{\text{obs}}, l)dl \quad (4.8)$$

dabei ist:

λ	die Wellenlänge,
l_{obs}	die Position des Beobachters,
l_0	die Position der Strahlungsquelle,
l	die Wegkoordinate,
dl	das Wegelement,
S_{Θ}	die spektrale Strahlungsdichte für den Blickwinkel Θ ,
J	die Quellfunktion,
$\sigma(\lambda, l)$	der Absorptionskoeffizient zwischen l und $l + dl$.
$\tau(\lambda, l_{\text{obs}}, l_0)$	der Transmissionsgrad zwischen l_{obs} und l_0 für λ .

S_{Θ} an der Position l_{obs} ist die zu beobachtende Größe. Diese ist zu allererst abhängig vom Blickwinkel Θ . Dann hängt sie von der Strahlungsdichte am Ort l_0 ab und von den Prozessen, die dazwischen geschehen. Dabei kann elektromagnetische Strahlung emittiert, absorbiert oder gestreut werden. Diese Prozesse ändern sich in Richtung des Beobachters für jedes Wegsegment mit der Dicke dl . Dabei ist die Sichtlinie des Beobachters aufgrund von atmosphärischer Lichtbrechung keine gerade Linie.

Die Quellfunktion J entspricht im LTE der Planckfunktion B mit $T = T_{\text{kin}}$ an der Position l :

$$B(\lambda, T) = \frac{2hc^2}{\lambda^5} \frac{1}{\exp\left(\frac{hc}{\lambda k_{\text{B}}T}\right) - 1} \quad (4.9)$$

Im NLTE verändert sich J gegenüber dem LTE in Abhängigkeit der Veränderungen in den Besetzungszahlen der Übergänge, die relevant für λ sind.

Der Absorptionskoeffizient $\sigma(\lambda, l)$ gibt an, welcher Anteil der Strahlung der Wellenlänge λ in der Luftschicht an der Position l absorbiert wird. Der Faktor $J(\lambda, l)\sigma(\lambda, l)$ gibt also die wellenlängenabhängige Strahlungsdichte an, die aus der Luftschicht an der Position l emittiert wird. Im Transmissionsgrad $\tau(\lambda, l_{\text{obs}}, l)$ werden wellenlängenabhängige Absorptions-, und Streuprozesse in den Luftschichten zwischen dem Beobachter und der Position l berücksichtigt. $\tau(\lambda, l_{\text{obs}}, l)$ gibt also den Anteil der Strahlungsdichte an, der beim Beobachter an der Position l_{obs} aus der Luftschicht an der Position l ankommt.

4.4.1. KOPRA

Für die folgenden Kapitel ist es notwendig, ein im Weltraum aufgenommenes Spektrum der Erdatmosphäre beschreiben zu können. Mit Hilfe der Strahlungstransportgleichung (Gleichung 4.8) lässt sich genau dies tun. Die Lösung jener Gleichung verlangt jedoch ein optimiertes Verfahren für spezielle Anwendungen. Im Fall von MIPAS/ENVISAT sind dies Limb-Messungen, also Messungen, in denen die Sichtlinie horizontal durch die Erdatmosphäre geht.

Der Karlsruhe Optimized and Precise Radiative transfer Algorithm (KOPRA, Stiller, 2000) ist ein FORTRAN90-Programm, das die Strahlungstransportgleichung löst und am Institut für Klimaforschung (IMK) entwickelt wurde. Dabei wird die Integration nicht analytisch, sondern für dünne Atmosphärenschichten durchgeführt. KOPRA berechnet die Infrarotstrahlung durch alle Schichten von der boundary layer bis 200 km Höhe mit einem line-by-line-Ansatz. KOPRA berücksichtigt insbesondere die Abplattung der Erde und die Änderungen des Brechungsindex in der nicht-sphärischen Erdatmosphäre. Auch der Einfluss des Instrumentes auf das Spektrum durch z.B. ein begrenztes Sichtfeld und die optischen Elemente wird beachtet. Die in Kapitel 4.3 erwähnten Linienverbreiterungen werden berücksichtigt: Die Linien werden mit einem Voigtprofil modelliert. Der spektroskopische Input kommt von der HITRAN-Datenbank (Rothman et al., 2013). Von GRANADA (Kapitel 4.2.1) berechnete NLTE-Populationen können zusätzlich als Input dienen. Neben den Ro-Vibrationslinien werden von KOPRA auch andere Übergänge berücksichtigt: Zum einen stoßinduzierte Absorptionsbanden durch Wechselwirkung der Paare N_2-N_2 und O_2-O_2 . Zum anderen die Überlagerung von Linienflügel starker Absorptionsbanden und kontinuumartige Beiträge von schweren Molekülen. Detaillierte Informationen finden sich auf der KOPRA-Homepage: <http://www.imk-asf.kit.edu/english/312.php>.

5. MIPAS/ENVISAT

Der Umweltsatellit ENVISAT (Environmental satellite) der europäischen Weltraumorganisation (engl.: European Space Agency, ESA) startete an Bord einer Ariane-5 Rakete am 1. März 2002 vom europäischen Weltraumbahnhof in Kourou, Französisch-Guayana. Der Satellit wurde auf eine sonnensynchrone Umlaufbahn mit einer Inklination von 98° in ~ 800 km Höhe (~ 783 km seit Oktober 2010) gebracht. Für einen Umlauf benötigte er ca. 100 min, weshalb er etwas mehr als 14 Orbits am Tag absolvierte. Auf der Tagseite überflog er die Erde um ca. 10 Uhr Lokalzeit, auf der Nachseite um ca. 22 Uhr. Den Äquator überflog er um 10 Uhr Lokalzeit Richtung Süden. Nach über 50 000 Orbits ging der Kontakt zu ENVISAT am 8. April 2012 verloren. Die Mission wurde daraufhin am 9. Mai 2012 für beendet erklärt. Einzelne Details zur Mission finden sich auf: www.esa.int/Our_Activities/Observing_the_Earth/Envisat/.

Das Michelson Interferometer for Passive Atmospheric Sounding (MIPAS) war ein Fourier-Transform-Infrarotspektrometer (FTIR-Spektrometer) an Bord von ENVISAT. Das Experiment MIPAS/ENVISAT wird in Fischer et al. (2008) beschrieben. Deshalb sind die meisten Informationen zu MIPAS daraus entnommen. Das Ziel des Experiments war es vertikale Profile der Temperatur und der VMRs von mindestens 25 Spurengasen zu bestimmen. Mehr als 30 Spurengase wurden bisher ausgewertet. Die Profile können je nach Gas von der oberen Troposphäre bis in die untere Thermosphäre reichen.

Im Folgenden wird der Aufbau und das Messverfahren von MIPAS ausführlich beschrieben (Kapitel 5.1). Die Methode zur Auswertung der Daten, auch Retrieval genannt, wird daraufhin in Kapitel 5.3 beschrieben.

5.1. Instrument

MIPAS ist ungefähr 1,36 m lang, 1,46 m hoch und 0,74 m tief. In Bild 5.1 ist ein schematischer Aufbau von MIPAS gezeigt: Sowohl die optischen Elemente als auch der Strahlengang lassen sich erkennen. Zusätzlich zum gezeigten Aufbau befinden sich noch Kühler und Blenden am Instrument, die entsprechend für eine möglichst tiefe Temperatur und für eine Minimierung des Streulichts sorgen.

MIPAS ist ein Limb-Sounder, das heißt, es schaut horizontal durch die Erdatmosphäre. MIPAS beobachtet also die Strahlung, die von der Erdatmosphäre emittiert wird. Die Sichtlinie tangiert dabei je nach Blickwinkel unterschiedliche Höhen der Erdatmosphäre, die von der oberen Troposphäre bis in die untere Thermosphäre reichen können. Auf die exakten Höhen, die mit verschiedenen Messmodi verbunden sind, wird später in diesem Kapitel eingegangen.

Die von der Erdatmosphäre emittierte Strahlung trifft auf die Azimuth Scan Unit

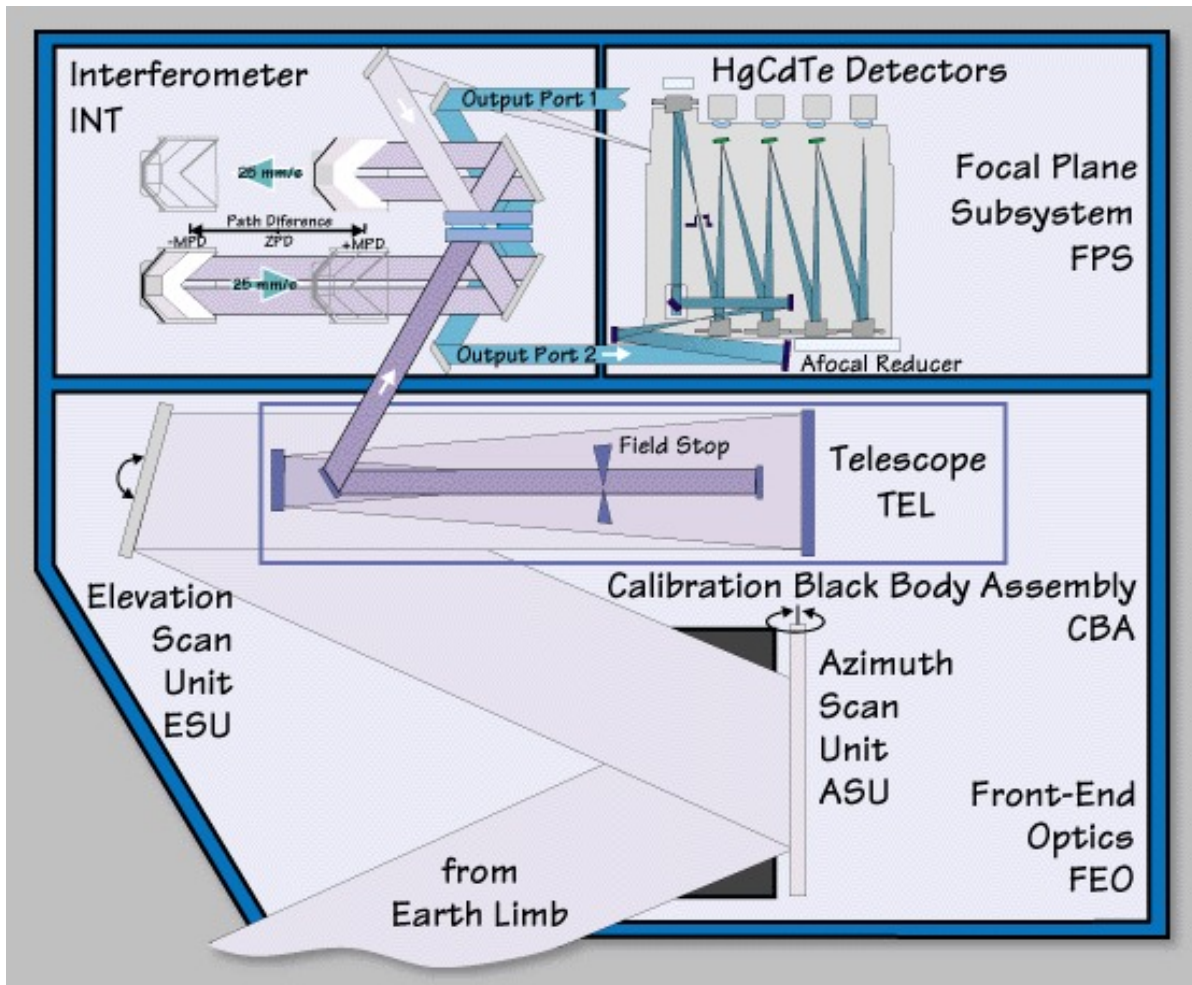


Bild 5.1.: Schematischer Aufbau von MIPAS: optische Elemente und Strahlengang (<https://earth.esa.int/instruments/mipas/descr/concept.html>)

(ASU). Die ASU ist ein flacher Spiegel, durch dessen Drehung man entscheiden kann, welche Öffnung des Gehäuses man auswählt, also welchen Blickwinkel man zur Erde wählt. Es gibt zwei Öffnungen: Die eine ist nach hinten gerichtet, also entgegen der Flugrichtung, die andere zur Seite und entgegengesetzt zur Sonne. Die meisten Messungen wurden durch die entgegen der Flugrichtung geöffnete Luke gemacht. Alternativ kann die ASU auch zur Kalibrierung in Richtung eines schwarzen Körpers gedreht werden. Von der ASU geht der Strahlengang zur Elevation Scan Unit (ESU). Auch die ESU ist ein flacher Spiegel. Durch dessen Drehung wird gesteuert, welche Tangentenhöhe der Erdatmosphäre beobachtet wird. Von der ESU trifft die Strahlung auf ein Teleskop, das die Strahlung bündelt. In dem Teleskop ist eine Blende (im Bild „Field Stop“ genannt), die das Sichtfeld von MIPAS bestimmt ($3 \text{ km} \times 30 \text{ km}$).

Das in MIPAS eingebaute FTIR-Interferometer ist ein Michelson-Interferometer. In einem Michelson Interferometer durchläuft eine in zwei gleich intensive Teile aufgeteilte Lichtwelle unterschiedliche optische Wege. Die verschiedenen Wegstrecken können mit

einem bewegbaren Spiegel variiert werden. Somit kann der Weglängenunterschied der optischen Wege ebenfalls variiert werden. Ändert man den Weglängenunterschied kontinuierlich und bringt man anschließend die aufgeteilten Lichtstrahlen zur Interferenz, erhält man ein Interferogramm. Aus diesem kann man mittels Fouriertransformation ein hochaufgelöstes Lichtspektrum erhalten.

Das FTIR-Interferometer hat somit als Michelson-Interferometer zwei Eingangs- und zwei Ausgangsöffnungen. Störende Infrarotstrahlung der zweiten Eingangsöffnung wird mit Hilfe eines auf 70 K gekühlten schwarzen Körpers unterdrückt. Alle optischen Elemente des Interferometers sind in doppelter Ausgabe spiegelsymmetrisch zueinander angeordnet, bis auf den Strahlteiler, der auf der Symmetrieachse positioniert ist. Veränderungen der Strahlung nach dem Strahlteiler, verursacht durch dessen wellenlängenabhängigen Brechungsindex, werden durch ein zweites Element kurz nach ihm behoben.

Die vom Teleskop gebündelte Strahlung trifft nun auf den Strahlteiler. Die Strahlung wird vom ihm nach unten und oben aufgeteilt und trifft nun auf einen flachen Spiegel rechts unten (oben). Von diesem wird die Strahlung auf einen beweglichen Winkelreflektor nach links gelenkt und zurückreflektiert. Dabei verschieben sich die Winkelreflektoren oben und unten um 180° phasenversetzt. Vom Spiegel rechts unten (oben) trifft die Strahlung nun wieder auf den Strahlteiler, der die Strahlung von oben und unten zusammenfügt. Die überlagerten Strahlen interferieren, weshalb die Intensität des zusammengefügt Strahls eine Funktion der Weglängendifferenz der vorher aufgeteilten Strahlen ist. Diese Funktion ist ein Interferogramm. Sie ist die Fouriertransformierte des Spektrums der von der Erdatmosphäre emittierten Strahlung. Die Auflösung des Spektrums wird von der größt möglichen Weglängendifferenz bestimmt. Im Fall von MIPAS ist diese 20 cm, da die Schienenlänge 5 cm beträgt. Die Auflösung beträgt dann $0,025 \text{ cm}^{-1}$, was 0,005 nm bei $4,15 \mu\text{m}$ entspricht.

Der Strahl trifft nun auf einen weiteren flachen Spiegel unten (oben). Von diesem Spiegel wird die Strahlung zu den Ausgangsöffnungen (Output Port) 1 und 2 gelenkt. Die Intensitäten an beiden Öffnungen ergeben aufsummiert die Eingangsintensität. Im Bild ist nur noch der Strahlengang nach der Ausgangsöffnung 2 gezeigt, denn nach Ausgangsöffnung 1 ist der Detektoraufbau äquivalent. In dem auf 70 K gekühlten Bereich wird der Strahl nun viergeteilt und auf vier (berücksichtigt man beide Ausgangsöffnungen: acht) Quecksilber-Cadmium-Tellurid (HgCdTe)-Detektoren gelenkt. Diese vier (acht) Halbleiterdetektoren (A, B, C und D) messen nun die Intensität der Strahlung und sind dabei auf jeweils einen Teilbereich zwischen $4,15 \mu\text{m}$ und $14,6 \mu\text{m}$ spezialisiert. Der Bereich zwischen $6,5 \mu\text{m}$ und $14,6 \mu\text{m}$ wird von den Detektoren A und B in den beiden Strahlengängen unterschiedlich abgedeckt, so dass man einen Bereich erhält an dem sich Detektor A aus dem einen Strahlengang und Detektor B aus dem anderen überlappen. Dies ist am oberen Ende des Bilds 5.2 eingetragen, welches im Folgenden erläutert wird.

Im Wellenbereich zwischen $4,15 \mu\text{m}$ und $14,6 \mu\text{m}$ nimmt MIPAS die Spektren auf. Da die Planck-Funktion für Temperaturen der Erdatmosphäre bei $\sim 10 \mu\text{m}$ annähernd maximal wird (graue Linien für 200-260 K), liegt der von MIPAS gemessene Bereich im oder nahe beim Intensitätsmaximum der von der Erdatmosphäre emittierten Strahlung. MIPAS kann deshalb sowohl bei Tag als auch bei Nacht messen. Bild 5.2 zeigt

5. MIPAS/ENVISAT

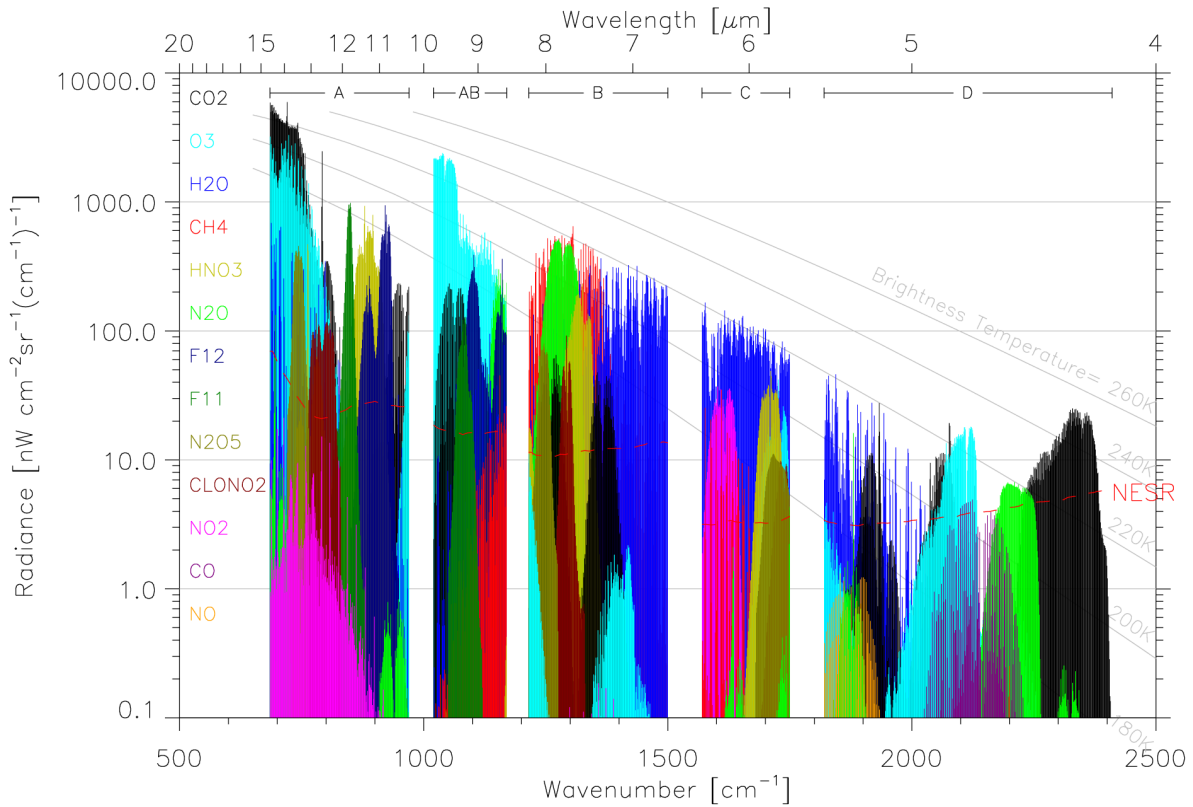


Bild 5.2.: Wellenbereich, der von den in MIPAS eingebauten HgCdTe-Detektoren erfasst wird. Die Emissionsbeiträge der wichtigsten Moleküle sind farblich unterschiedlich dargestellt. Das Bild ist von Fischer et al. (2008) entnommen.

Spektren von folgenden verschiedenen Spurengasen der Erdatmosphäre, die in diesem Wellenlängenbereich Photonen emittieren: CO_2 , O_3 , H_2O , CH_4 , HNO_3 , N_2O , F11, F12, N_2O_5 , ClONO_2 , NO_2 , CO und NO . Die von MIPAS aufgenommenen Spektren zeigen aber auch deutlich schwächere Linien. Beispielsweise wurden in den Spektren sogar Linien von NO^+ (López-Puertas et al., 2006), SO_2 (Höpfner et al., 2013) und BrONO_2 (Höpfner et al., 2009) entdeckt und in den letzten beiden Fällen auch ausgewertet.

Vom 1. Juli 2002 bis zum 26. März 2004 nahm MIPAS Spektren mit voller Auflösung (engl.: full resolution, FR) auf. Die FR beträgt 0.025 cm^{-1} , was 0.05 nm bei $4,15 \mu\text{m}$ entspricht. Die Messzeit betrug pro Scan $4,5 \text{ s}$. Ab dem 26. März 2004 ließ sich ein beweglicher Winkelreflektor nicht mehr vollständig auf seiner Schiene bewegen. Die Weglängendifferenz der aufgeteilten Strahlen verkürzte sich von 20 cm auf 8 cm . Da die Auflösung des Interferometers von der Weglängendifferenz abhängt, bedeutet eine verkürzte Weglänge der Winkelreflektoren eine reduzierte Auflösung (engl.: reduced resolution, RR) des Interferometers. Vom 10. Januar 2005 bis zum 8. April 2012 nahm MIPAS also Spektren mit RR auf, welche 0.065 cm^{-1} betrug, was 0.12 nm bei $4,15 \mu\text{m}$ entspricht. Die Messzeit betrug dafür pro Scan nur noch $1,8 \text{ s}$. Man versuchte die verkürzte Messzeit dahingehend auszunutzen, dass die Höhenauflösung durch mehr Messungen verbessert

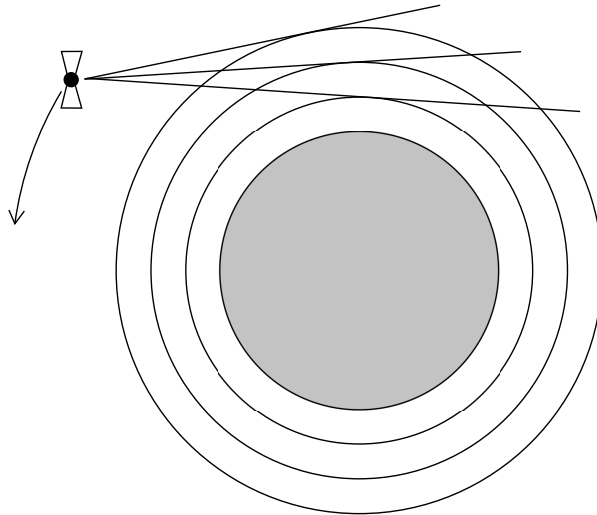


Bild 5.3.: Skizze der MIPAS/ENVISAT-Limbbeobachtungen. In grau ist die Erde dargestellt, die konzentrischen Kreise stellen verschiedene Atmosphärenschichten dar.

werden sollte. Die Beobachtungsstrategie von MIPAS/ENVISAT war auf verschiedene Moden ausgelegt. Es gab verschiedene Sequenzen, die bestimmten, in welchen Höhen bei einer Geolokation gemessen wird, bevor sich die Sequenz bei einer anderen Geolokation wiederholt. Tabelle 5.1 zeigt die Modi, bei denen regelmäßig gemessen wurde. Diese sind der nominelle Modus (NOM) für FR und RR, sowie der Modus für die obere Atmosphäre (engl.: upper atmosphere, UA) und für die mittlere Atmosphäre (engl.: middle atmosphere, MA). Auf die Messtage wird in Kapitel 5.3 eingegangen. Da die Scans einer Sequenz von oben nach unten erfolgt sind, konnte durch die Flugrichtung eine größere Verschiebung der Geolokation des Tangentenpunktes innerhalb einer Sequenz ausgeglichen werden. Dies ist in Bild 5.3 dargestellt, wenn man die Flugrichtung des Satelliten mit berücksichtigt.

5.2. Level 0, Level 1B und Level 2 Produkte

Zwischen den von den HgCdTe-Detektoren gemessenen Intensitäten und dem Spektrum, das ausgewertet werden kann, sind noch verschiedene Prozessierungsschritte notwendig, die im Folgenden genannt werden sollen.

Level 0

Noch auf dem Satelliten wurde das gemessene Interferogramm einigen Prozessierungsschritten unterzogen, die im Wesentlichen das Ziel hatten, die Datenmenge, die an die Erde gesendet wird, zu reduzieren. So wurde das Interferogramm in folgender Reihenfolge verstärkt, analog gefiltert, digitalisiert, numerisch gefiltert und komprimiert, angeglichen und zusammengefügt (wegen der verschiedenen Detektoren), formatiert und an die Erde

5. MIPAS/ENVISAT

Tabelle 5.1.: MIPAS Scans in km (<http://www.atm.ox.ac.uk/group/mipas>)

Scan	NOM FR	NOM RR	UA RR	MA RR
1	68	72	172	102
2	60	67.5	167	99
3	52	63	162	96
4	47	59	157	93
5	42	55	152	90
6	39	51	147	87
7	36	47	142	84
8	33	44	137	81
9	30	41	132	78
10	27	38	127	75
11	24	35	122	72
12	21	32	117	69
13	18	30	112	66
14	15	28	107	63
15	12	26	102	60
16	9	24	99	57
17	6	22	96	54
18		20.5	93	51
19		19	90	48
20		17.5	87	45
21		16	84	42
22		14.5	81	39
23		13	78	36
24		11.5	75	33
25		10	72	30
26		8.5	69	27
27		7	66	24
28			63	21
29			60	18
30			57	
31			54	
32			51	
33			48	
34			45	
35			42	

gesendet (Kleinert et al., 2007). Nach diesen Prozessierungen spricht man vom Level0 Produkt.

Level 1B

Die Level 1B-Daten sind die aus den Level0-Daten produzierte Spektren der Erdatmosphäre. Das heißt sie stellen die spektrale Strahldichte (y -Achse) als Funktion der Wellenzahl oder der Wellenlänge (x -Achse) dar. In Kleinert et al. (2007) wird der Prozessor, der die Level 1B-Daten berechnet, beschrieben. Die folgenden Informationen sind daraus entnommen. Um ein hochwertiges Spektrum zu erhalten sind eine radiometrische (y -Achse) und eine spektrale (x -Achse) Kalibrierung notwendig. Eine exakte Bestimmung der beobachteten Geolokationen ist für die spätere Analyse der Daten ebenfalls erforderlich. Dies hatte auch Auswirkungen auf die Messstrategie von MIPAS. Die Level 1B-Prozessierung wird von der ESA durchgeführt.

Die radiometrische Kalibrierung wird mittels zweier schwarzer Strahler vorgenommen, von denen die Temperatur bekannt ist (Revercomb et al., 1988). Als „kalter“ Strahler diente der Weltraum, der nach 4 Messsequenzen jeweils drei mal durch beide Öffnungen gemessen wurde um das Signal-Rausch-Verhältnis zu minimieren. Als „warmer“ Strahler diente der Körper, den man mit der ASU auswählen konnte und der einmal die Woche gemessen wurde. Die spektrale Kalibrierung wurde mit Hilfe von Standardmessungen der Erdatmosphäre zwischen 29 km und 35 km vorgenommen. Bekannte Linienpositionen von O_3 und H_2O dienten dann zur Kalibrierung. Wöchentliche Kalibrierungsmessungen der Sichtlinie von MIPAS dienten zur späteren Bestimmung der Geolokation. Zudem werden im Prozessor Nicht-Linearitäten der Detektoren, die zuvor am Boden bestimmt wurden und die für das Level0 Produkt vorgenommenen Verstärkungen und Komprimierungen, berücksichtigt. Darüber hinaus wird noch die Linienform des Instruments (engl.: instrumental line shape, ILS) berücksichtigt, die von zwei Parametern abhängt: Zum einen von der linearen Scherung über die Scanrichtung, zum anderen von der Achsenverschiebung zwischen der optischen Achse und der Ausrichtung des Zentrums des Gesichtsfelds. Dies ist notwendig, da die Detektoren die Faltung zwischen dem Spektrum der Atmosphäre und der ILS messen. Die ILS wird einmal pro Orbit für jede Höhe bestimmt.

Level 2

Die Spektren, die der Level 1B-Prozessor berechnet hat, werden anschließend apodisiert. Das bedeutet, dass das Spektrum mit einer Fensterfunktion gefaltet wird, die zum Ziel hat die Nebenmaxima zu unterdrücken, die durch die ILS hervorgerufen werden. Aus den Spektren können nun die Höhenprofile von Temperatur, Druck und die VMRs von verschiedenen Gasen bestimmt werden. Dies wird von den Level2-Prozessoren getan. Zuerst wird die spektrale Verschiebung bestimmt und die Temperatur (mittels CO_2 -Übergänge) und die Scanhöhe ausgewertet (von Clarmann et al., 2003). Der Druck wird über das hydrostatische Gleichgewicht ausgerechnet. Die Retrievalstrategie der Spektren ist folgendermaßen: Es werden nicht alle Gase auf einmal ausgewertet, sondern jedes

Gas für sich. Zuerst werden die im Spektrum dominierenden Gase wie CO₂, H₂O und O₃ ausgewertet (vgl. dazu Bild 5.2); erst anschließend lassen sich die Banden anderer Gase auswerten, die für kleinere Beiträge im IR-Spektrum verantwortlich sind.

5.3. Retrieval von NO und NO₂

Im Folgenden soll auf das Retrieval von NO und NO₂ eingegangen werden. Eine ausführliche Beschreibung dazu ist in Funke et al. (2005) zu finden, was auch die Grundlage dieses Unterkapitels darstellt. Modifikationen des Retrievals werden in Funke et al. (2011) beschrieben. Eine Optimierung des NO-Retrievals des UA Modus wurde im Zuge dieser Arbeit durchgeführt und wird in Kapitel 5.3.1 vorgestellt.

Die Strahlungstransportgleichung (Gleichung 4.8) beschreibt, wie sich die Strahlung bestimmter Moleküle aus einer bestimmten Region abhängig der physikalischen Parameter ausbreitet. Man spricht hierbei von einem Vorwärtsproblem. Die Strahlungstransportgleichung kann allgemein für Limb-Messungen folgendermaßen beschrieben werden:

$$\mathbf{y}_{\text{mess}} = \mathbf{F}(\mathbf{x}) + \boldsymbol{\epsilon}. \quad (5.1)$$

Dabei ist:

\mathbf{y}_{mess}	der Vektor der Messung, also das Spektrum mit der Dimension m ,
\mathbf{x}	der Vektor der Parameter, die ausgewertet werden, mit der Dimension n ,
$\mathbf{F}(\mathbf{x})$	das Vorwärtsmodell, das \mathbf{x} (n -dim) als Spektrum (m -dim) abbildet,
$\boldsymbol{\epsilon}$	der Vektor, der sowohl statistische als auch durch das Instrument erzeugte Fehler der Parameter angibt.

Um von \mathbf{y}_{mess} auf \mathbf{x} schließen zu können, muss man also \mathbf{F} invertieren. In der Theorie der Inversion (Rodgers, 2000) linearisiert man zuerst das Strahlungstransportproblem um \mathbf{x}_0 :

$$\mathbf{y}_{\text{mess}} = \mathbf{F}(\mathbf{x}_0) + \frac{\partial \mathbf{F}(\mathbf{x})}{\partial \mathbf{x}}(\mathbf{x} - \mathbf{x}_0) + \boldsymbol{\epsilon}. \quad (5.2)$$

Dabei ist:

\mathbf{x}_0	der Vektor der Startwerte, später auch als a priori Vektor \mathbf{x}_a bezeichnet.
$\frac{\partial \mathbf{F}(\mathbf{x})}{\partial \mathbf{x}}$	die ausgeschriebene Form der Jacobimatrix \mathbf{K} mit der Dimension $m \times n$.

Die Startwerte \mathbf{x}_0 können z.B. aus einem Modell oder vorigen Messungen stammen. Terme höherer Ordnung werden vernachlässigt. Im Falle der Fernerkundung kann das Problem entweder über- oder unterbestimmt sein, da $m \neq n$ gilt und einige Parameter auch voneinander abhängig sind. Eine exakte Lösung ist also nicht möglich.

Um die Parameter \mathbf{x} aus dem Spektrum zu bestimmen wird zuerst χ^2 als die Summe der Quadrate der Differenzen zwischen Messung und Vorwärtsproblem definiert:

$$\chi^2 = (\mathbf{y}_{\text{mess}} - \mathbf{F}(\mathbf{x}))^2 \quad (5.3)$$

Dann ist es eine übliche Methode χ^2 - gewichtet mit der Kovarianzmatrix der Messfehler \mathbf{S}_y - zu minimieren:

$$\frac{\partial}{\partial \mathbf{x}} \left([\mathbf{y}_{\text{mess}} - \mathbf{F}(\mathbf{x})]^T \mathbf{S}_y [\mathbf{y}_{\text{mess}} - \mathbf{F}(\mathbf{x})] \right) = 0. \quad (5.4)$$

Das Ausrechnen dieser Gleichung führt zu folgendem iterativen Lösungsansatz für die Parameter \mathbf{x} :

$$\mathbf{x}_{i+1} = \mathbf{x}_i + \left(\mathbf{K}^T \mathbf{S}_y^{-1} \mathbf{K} \right)^{-1} \times \left(\mathbf{K}^T \mathbf{S}_y^{-1} (\mathbf{y}_{\text{mess}} - \mathbf{F}(\mathbf{x}_i)) \right) \quad (5.5)$$

Um \mathbf{x} möglichst genau an die Messergebnisse anfitzen zu können, benötigt man also ein Vorwärtsmodell und dessen Jacobimatrix. Gleichung 5.5 kann schon ein vollständiger Lösungsansatz sein (Methode der kleinsten Quadrate). Im Falle der MIPAS NO- und NO₂-Retrieval stehen aber noch zusätzliche Informationsquellen zur Verfügung: Höhenprofile aus Modellen, die zum einen als a priori Information dienen, zum anderen aber als zusätzliche Bedingung gelten sollen, um z.B. unphysikalische Lösungen zu vermeiden. Diese Höhenprofile dienen also zur Regularisierung.

Das Retrieval wird mit dem Datenprozessor des IMK und des Instituts für Astrophysik Andalusien (span.: Instituto de Astrofísica de Andalucía, IAA) betrieben. Dieser beruht auf einem Algorithmus nach der Methode der kleinsten Quadrate mit Levenberg-Marquardt-Dämpfung. Dabei wird ein modelliertes Spektrum an ein gemessenes angefitet und mit jeder Iteration i angepasst. Die Parameter des Retrievals \mathbf{x} werden im Iterationsschritt $i + 1$ folgendermaßen verändert:

$$\mathbf{x}_{i+1} = \mathbf{x}_i + \left(\mathbf{K}^T \mathbf{S}_y^{-1} \mathbf{K} + \mathbf{R} + \lambda \mathbf{I} \right)^{-1} \times \left(\mathbf{K}^T \mathbf{S}_y^{-1} (\mathbf{y}_{\text{mess}} - \mathbf{F}(\mathbf{x}_i)) - \mathbf{R}(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_a) \right). \quad (5.6)$$

Dabei ist:

- \mathbf{R} die Regularisierungsmatrix,
- $\lambda \mathbf{I}$ der Levenberg-Marquardt-Dämpfungsterm, bestehend aus einem Skalar λ und der Einheitsmatrix \mathbf{I} , wobei im letzten Iterationsschritt $\lambda = 0$ ist,
- \mathbf{x}_a der a priori Vektor, der auch zur Initialisierung verwendet wird ($\mathbf{x}_0 = \mathbf{x}_a$).

NO, NO₂ und die photochemischen Anregungsraten von NO₂ werden auf einem Höhenraster mit einem Abstand von 1 km berechnet. Es wird eine Tikhonov-Regularisierung angewendet (Tikhonov, 1963). Das Höhenprofil wird also mittels der ersten Ableitung der a priori Information regularisiert. NTLE-Populationen der emittierenden Moleküle werden mit dem Model GRANADA (Kapitel 4.2.1) in jedem Iterationsschritt neu berechnet. Das Vorwärtsmodell und dessen Jacobimatrix werden mit KOPRA (Kapitel 4.4.1) berechnet.

Zur Fehlerabschätzung von \mathbf{x} schreibt man:

$$\mathbf{x} = \mathbf{x}_0 + \mathbf{G}(\mathbf{y}_{\text{mess}} - \mathbf{F}(\mathbf{x}_0)), \quad (5.7)$$

wobei die Gain-Matrix \mathbf{G} folgenden Ausdruck beschreibt:

$$\mathbf{G} = \left(\mathbf{K}^T \mathbf{S}_y^{-1} \mathbf{K} + \mathbf{R} \right)^{-1} \mathbf{K}^T \mathbf{S}_y^{-1}. \quad (5.8)$$

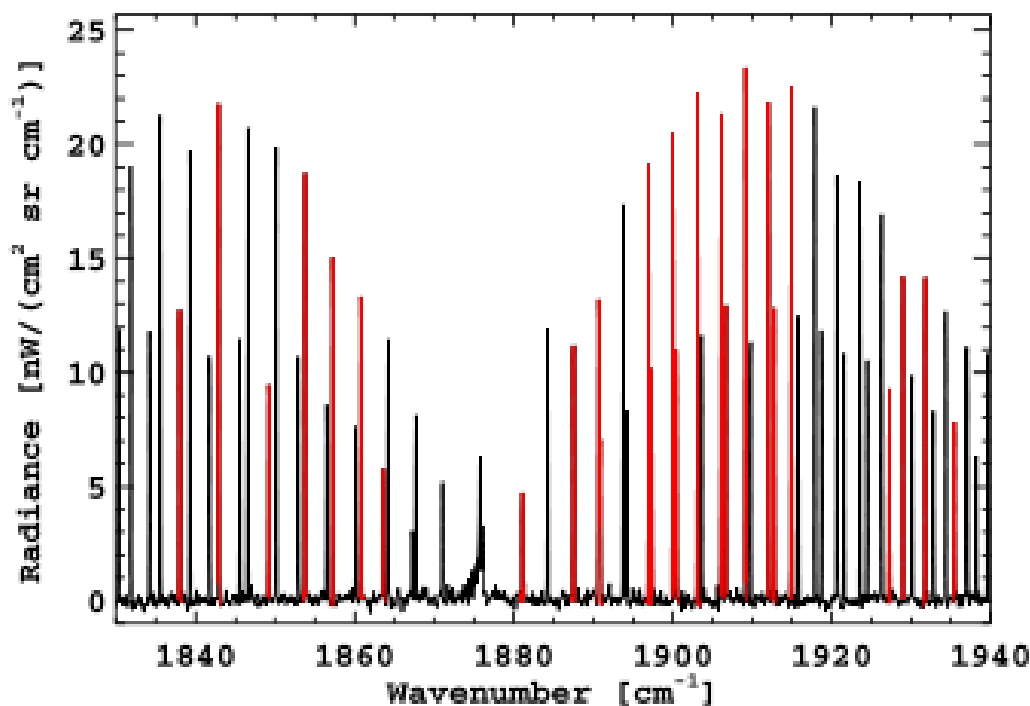


Bild 5.4.: Ein Mittel von MIPAS/ENVISAT aufgenommenen Spektren (21. Januar 2005, 70-90°S Breite, 120 km Höhe). Es zeigt die NO-Bande in der 5.3 μm -Region. Die Microwindows (Kapitel 5) sind rot hervorgehoben. Das Bild stammt aus Bermejo-Pantaleón et al. (2011).

Statistische Fehler des Retrievals, die auf das Rauschen des Instruments zurückzuführen sind, können durch die Kovarianzmatrix beschrieben werden:

$$\mathbf{S}_{\text{statist.}} = \mathbf{G}\mathbf{S}_y\mathbf{G}^T. \quad (5.9)$$

Fehler, die auf Unsicherheiten ϵ der a priori Parameter \mathbf{a} zurückzuführen sind, lassen sich folgendermaßen beschreiben:

$$\Delta\mathbf{x} = \mathbf{G}[\mathbf{F}(\mathbf{x}, \mathbf{a} + \epsilon) - \mathbf{F}(\mathbf{x}, \mathbf{a})]. \quad (5.10)$$

Der Beitrag der Regularisierung auf das Ergebnis des Retrievals wird durch die Averaging-Kernel-Matrix \mathbf{A} beschrieben:

$$\mathbf{A} = \mathbf{G}\mathbf{K}. \quad (5.11)$$

Ihre Elemente \mathbf{A}_{ij} beschreiben die Auswirkung von Veränderungen des a priori Parameters i auf den ausgewerteten Parameters j . Die Höhenauflösung des Retrievals kann demnach durch die Halbwertsbreite der Spalten von \mathbf{A} bestimmt werden. Üblicherweise werden Daten, bei denen die Diagonalelemente von \mathbf{A} , $\text{AVKD} < 0.03$ sind, nicht berücksichtigt, da in diesen Daten zu viel Information des a priori Profils steckt oder anders ausgedrückt zu wenig Information aus dem Spektrum.

Aus Gründen der Effizienz können nicht alle gemessenen Punkte des Spektrums angefitet werden. Deshalb wählt man einen Microwindow-Ansatz. Position und Breite der kleinen Fenster werden höhenabhängig so gewählt, dass die wichtigsten Linien darin enthalten sind. In Bild 5.4 sind die gewählten Microwindows für das NO(1 → 0)-Band bei 5.3 μm in 120 km rot dargestellt (Bermejo-Pantaleón et al., 2011).

Zusätzlich zu diesen Beschreibungen soll noch folgende Anmerkungen zum NO- und NO₂-Retrieval gemacht werden (Funke et al., 2011): Die Retrievalgröße von NO und NO₂ ist log(VMR). Dann werden Sichtlinienvariationen der NO_x-Partitionierung nahe beim Tag-Nacht-Übergang berücksichtigt. Und horizontale Gradienten werden zusammen gefittet. Spezielle Eigenschaften der Retrieval werden im Folgenden erläutert:

NO₂: NO₂-VMRs werden mit Hilfe der Emissionen des NO₂($v_3 \rightarrow v_3 - 1$)-Bands ausgewertet. Dazu werden 14 Microwindows zwischen 6,11 μm und 6,29 μm verwendet. Die Anregung des NO₂(001)-Niveaus durch troposphärische Strahlung und damit auch das a priori Profil werden von GRANADA (Kapitel 4.2.1) berechnet. Dabei werden Emissionen von H₂O, CH₄, O₂ und NO₂ berücksichtigt und durch Wolken verursachte Beeinträchtigungen des Strahlungsflusses beachtet. Die Genauigkeit einer einzelnen Messung liegt bei 5-10 %, die Höhenauflösung bei 4-5 km zwischen 20 km und 50 km Höhe, darüber bei ca. 10 km.

NO: Nachdem NO₂ ausgewertet ist, werden NO-VMRs mit Hilfe der Emissionen des NO(1 → 0)-Bands ausgewertet. Dazu werden 14 Microwindows im NOM Modus zwischen 5,22 μm und 5,43 μm verwendet (in Bild 5.4 sind abweichend andere Microwindows des UA Modus dargestellt). Damit die NLTE Effekte der NO-Produktion durch NO₂-Photolyse von GRANADA richtig berücksichtigt werden, wird das NO₂-Höhenprofil eingelesen. Das a priori Profil wird somit aus dem NO₂-Höhenprofil und der Photochemie berechnet. Thermosphärisches NO kann für bis zu 50 % des Gesamtsignals bei Limbmessungen in der Stratosphäre verantwortlich sein. Deshalb wird im Retrieval mit Hilfe des empirischen Modells NRLMSISE-00 (Picone et al., 2002) von 70 km bis 200 km das a priori-Höhenprofil erzeugt. Die Genauigkeit einer einzelnen Messung liegt bei 10 %, die Höhenauflösung bei 4-7 km zwischen 20 km und 50 km Höhe, darüber bei ca. 15 km.

Tabelle 5.2 zeigt an, für welche Tage der MIPAS/ENVISAT-Mission NO- und NO₂-Spektren ausgewertet und Höhenprofile für den gesamten Tag erstellt wurden. „N“ steht dabei für Höhenprofile des nominellen Modus NOM und „U“ für den UA Modus. „N“ bezeichnet Tage, an denen aufgrund des SSW Anfang 2009 je zur Hälfte im NOM und UA-Modus gemessen wurde. Deutlich erkennbar ist die Messlücke zwischen dem 27. März 2004 und dem 10. Januar 2005, auf die zuvor eingegangen wurde. Weitere Lücken lassen sich zum einen damit erklären, dass in anderen Moden gemessen wurde, welche in dieser Arbeit nicht berücksichtigt werden, zum anderen mit operationellen Gründen.

5.3.1. Das Nacht-Tag-Verhältnis von NO in der Thermosphäre

Das a priori Profil von NO im NO-Retrieval des UA Modus von 100 km bis 200 km (NOT-Retrieval genannt) orientiert sich am Nitric Oxide Empirical Model (NOEM, Marsh

5. MIPAS/ENVISAT

Tabelle 5.2.: Kalender der MIPAS Scans, N steht für den nominellen Modus, U steht für den UA-Modus

	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18	19	20	21	22	23	24	25	26	27	28	29	30	31
2002 07						N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N
08	N	N	N	N	N	N																N	N	N	N	N	N	N	N	N	N
09	N	N	N	N	N	N	N	N				N	N	N	N	N	N		N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N
10											N	N	N	N	N	N	N		N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N
11	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N		N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N
12	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N
2003 01	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N
02	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N		N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N
03	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N		N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N
04	N					N	N	N	N	N	N		N	N	N	N	N	N	N	N	N	N		N	N	N	N	N			N
05	N	N	N	N	N	N		N	N	N	N	N	N	N	N	N	N		N		N										
06					N	N	N	N	N			N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N		N	N	N	N	N	N	N
07	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N
08	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N		N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N
09	N	N		N			N					N	N	N				N		N	N	N				N	N	N	N	N	N
10	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N
11	N	N	N	N	N	N				N	N	N						N	N	N	N	N				N	N	N			N
12		N	N		N		N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N
2004 01	N	N	N		N	N	N	N	N		N				N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N			N	N
02		N						N	N	N					N	N						N	N	N	N	N	N	N	N	N	N
03		N	N	N	N		N		N	N	N	N		N		N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N
04																															
05																															
06																															
07																															
08																															
09																															
10																															
11																															
12																															
2005 01																						U	U					N	N		
02							N					N	N	N		N	N					N	N								
03		N	N				N	N														N	N								
04					N	N						U	U												N						
05			N		N									N	N	N						N	N								
06			N		N			N					N		N				N				N				N		N		N
07			N				N						N		N							U									
08	N		N				N		N																						N
09																															
10																															U
11	U																														
12																							N	N							U
2006 01											N	N																			
02																															
03											N	N										U									
04																															
05		N		N																									N	N	N
06												N	N	N									U								
07			N	N	N						N	N	N																		
08																								N	N	N				N	N
09	N																					U			N	N	N				
10		N	N	N	N	N												N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N
11	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N
12	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N											U	U					N	N		

5. MIPAS/ENVISAT

	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18	19	20	21	22	23	24	25	26	27	28	29	30	31		
2007	01	N	N	N	N	N																	N	N	N	N					N	N	
	02	N	N	N																		N	N	N	N		N		N				
	03	N	N	N		N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N		N	N					U		N	N	N		N			
	04	N											N	N	N				N	N				N	N	N		N		N			
	05				N	N	N				N	N			N	N	N				N	N				N	N	N		N			
	06						N	N	N	N		N	N	N		N	N	N					U	U		N	N	N		N		N	
	07	N	N	N	N		N	N	N		N	N	N			N	N	N						N	N	N	N	N	N		N		
	08	N	N	N		N	N	N	N		N	N	N		N	N	N						N	N	N	N	N	N		N		N	
	09	N	N	N	N	N		N	N		N	N	N	N							N	N	U	U	U		N	N		N		N	
	10	N	N	N	N	N		N	N	N			N	N											N	N	N	N	N		N		
	11	N	N	N	N	U	N	N	N	N		N	N	N		U	N	N	N	N					N	N	N	N	N		N		
	12	N	N	N		N	N	N	N	U		N	N	N		N	N	N	N				U	N	N	N	N	N	N		U		
2008	01	N	N	N	N	N			U	N	N	N	N	N	N	U		N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	U		N	N	N	
	02	N	N	N	N		U	N	N	N	N	N	N	N		U		N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	U		N	N	N	
	03	N	N	N	N		U	N	N	N	N	N	N	N	N		U		N	N	N	N	N	N	N	N	N	U		N	N	N	
	04		N	N	N		U	N	N	N	N	N	N	N		U		N	N	N	N	N	N	N	N	N	U		N	N	N	N	
	05						N	N	N	N	N	N	N	N		U		N	N	N	N	N	N	N	N	N	U		N	N	N	N	
	06	N	N		N	N	N	U	N	N	N	N	N	N	N		U		N	N	N	N	N	N	U		N	N	N	N	N	N	
	07	N	N	N	N			N	N	N	N	N	N	N		U		N	N	N	N	N	N	N	N	U		N	N	N	N	N	
	08	N	N	N		U	N	N	N	N	N	N	N	N		U		N	N	N	N	N	N	N	N	U		N	N	N	N	N	
	09	N	N		U		N	N	N	N	N	N	N	N		U		N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	
	10	N	N		U	N				N					U		N	N	N	N	N	N	N	N	N	U		N	N	N	N	N	
	11	N		U	N	N	N	N	N	N					U		N	N	N	N	N	N	N	N	U		N	N	N	N	N	N	
	12	N		U	N	N	N	N	N	N					U		N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	
2009	01	N	U	N	N				N	N	N	U		N	N	N	N	N	N	U	U	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	
	02	N	N	N	N		U	N	N	N	N	N	N	N		U		N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	U		N	N	N	
	03	N	N	N	N	N		U	N	N	N	N	N	N	N		U		N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	U		N	N	N
	04	N	N	N	N	N		U	N	N	N	N	N	N	N		U		N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	
	05	N	N	N	N	N		U	N	N	N	N	N	N	N		U		N	N	N	N	N	N	N	N	N	U		N	N	N	
	06	N	N	N	N		U	N	N	N	N	N	N	N	N		U		N	N	N	N	N	N	N	N	U		N	N	N	N	
	07	N	N	N	N			N	N	N	N	N	N	N		U		N	N	N	N	N	N	N	N	U		N	N	N	N	N	
	08		U	N	N	N	N	N	N	N		U		N	N	N	N	N	N	N	N	N	U		N	N	N	N	N	N	N	N	
	09	U	N	N	N	N	N	N	N		U		N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	U		N	N	N	N	N	N	N	
	10	U	N	N	N	N	N	N	N		U		N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	U		N	N	N	N	N	N	U	
	11	N	N	N	N					N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	
	12	N	N	N	N	N	N	N	U		N	N	N	N		N	N	N	N	U		N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	
2010	01	N	N	N			N	N	U		N	N	N		N	N	U		N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	
	02	N	N	N	N	N	N	N	N	N		N	N	N	N	N	U		N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	
	03	N	N	N	N	N	N	N	U		N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	U	N	
	04	N	N	N		N	N	N	U		N	N	N		N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	
	05	N	N	N							N	N			N	N	N	N	N	N	U		N	N	N	N	N	N	N	U		N	
	06	N	N		N	N	N	U		N	N	N	N		N	N	N	U		N	N	N	N	N	N	N	N	U		N	N	N	
	07	N	N				N	N	N	N	N	N	N	N		U		N	N	N	N	N	N	N	N	N	U		N	N	N	N	
	08	N		N	N	N	U		N	N	N	N		N	N	N	U		N	N	N	N	N	N	N	N	U		N	N	N	N	
	09		N		U		N	N	N	N	N	N	N	N		U		N	N	N	N	N	N	N	N	N	U		N	N	N	N	
	10	N	N	N	N	U		N	N	N	N					N	N				N	N				N	N	N	N	N	N	N	
	11	N	N	N	N	U		N	N	N	N				U		N	N	N	N		N	N	N	U		N	N	N	N	N	N	
	12	N	N	N	N	U		N	N	N	N				U		N	N	N	N		N	N	N	U		N	N	N	N	N	N	
2011	01	N	N	N	U		N	N	N			N	N	U		N	N	N	N		N	N	N	U		N	N	N	N	N	U	U	
	02	U		N	N	N	N	N	N		N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	
	03	N	N	N	N	U		N	N	N	N		N	N	N	U		N	N	N	N	N	N	N	N	U		N	N	N	N	N	
	04	N	N	N			N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	
	05	N	N	N	U		N	N	N		N	N	N	U		N	N	N	N	N					N	N	N	N	N	N	N	N	
	06	N	N	U		N	N	N	N		N	N	N	U		N	N	N	N	N	N	N	U		N	N	N	N	N	N	N	N	
	07	N	N	U		N	N	N			N	N	N	U		N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	U		N	N	N	N	
	08		N	N	U		N	N	N	N	U		N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	U		N	N	N	N	N	N	N	N	
	09	U		N	N	N	N	N	N	N	U		N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	U		N	N	N	N	N	N	N	N	
	10	U		N	N	N	N	N	N	N	U		N								N	N	U		N	N	N	N	N	N	N	U	
	11	N	N	N			N	N	N	U						N	N	N	N	N	U		N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	
	12	N	N	N	N	U		N	N	N	N				N	N	N	N	N	U		N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	
2012	01	N	N	N			N	N	U		N	N	N	N		N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	U		N	U	U	U	
	02	U		N	U		U		N	N	N	N		N	N	N	N	N	N	N	U		N	N	N	N	N	N	N	N	U	N	
	03	N	N	N			N	N	N	U					N	N	N	N	N	N	N	U		N	N	N	N	N	N	N	N	U	N
	04	N	N		N	N	N	N	U																								

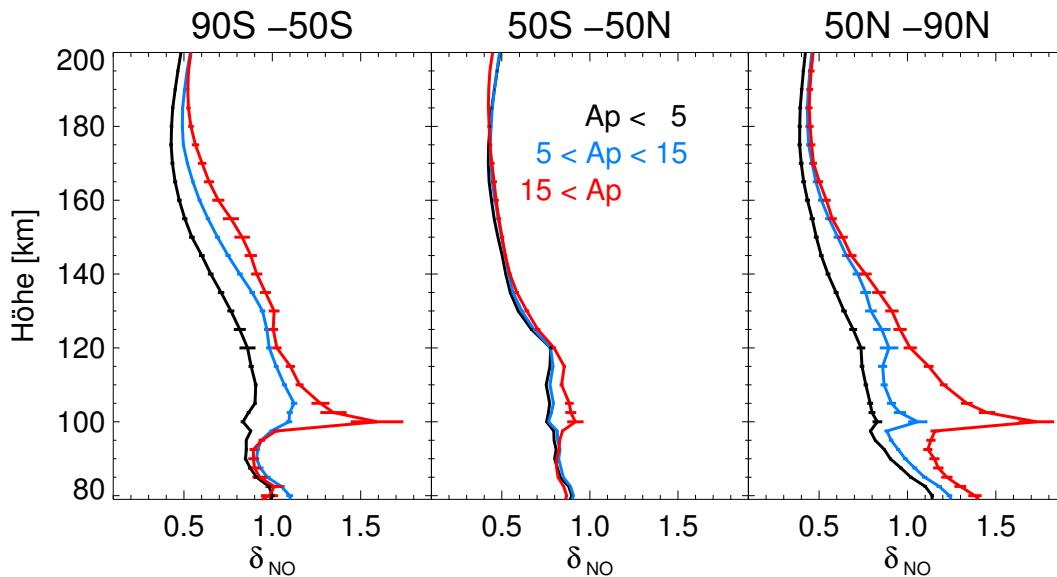


Bild 5.5.: Über die MIPAS-UA Messungen (2005-2009) gemitteltes Nacht-Tag-Verhältnis von NO, δ_{NO} , in Abhängigkeit der Höhe und der geomagnetischen Aktivität für drei zoneale Mittel: 90S-50S (links), 50S-50N (Mitte) und 50N-90N (rechts).

et al., 2004), das wiederum auf Messungen von SNOE (1998-2003) basiert. SNOE beobachtete Gammabandemissionen von NO mit einem UV-Spektrometer bei 10:30 Uhr Lokalzeit. Nachts konnte SNOE keine Messungen von NO machen. Folglich beruhen das NOEM-Modell und damit auch das a priori Profil, welches zusätzlich zur Regularisierung dient (Gleichung 5.6), auf Tagesmessungen von NO in der Thermosphäre. Ausgewertete MIPAS-Daten zeigen jedoch, dass NO in der Thermosphäre einen starken Tagesgang besitzt (Bermejo-Pantaleón et al., 2011; Bermejo-Pantaleón, 2011).

Um den Tagesgang nachzuvollziehen, muss man die Quellen und Senken von NO betrachten. Die NO-Produktion findet in der Thermosphäre durch die Reaktionen 3.10 und 3.11 statt, wobei $\text{N}(^4\text{S})$ und $\text{N}(^2\text{D})$ durch Röntgenstrahlung oder Teilchenniedererschlag erzeugt werden. Die Senken von NO bilden Photolyse und die kannibalistische Reaktion 3.12. Sowohl Produktionsreaktionen als auch Verlustreaktionen sind auf der Tagseite wesentlich schneller und konkurrieren dort. Auf der Nachtseite wird vertikale Umverteilung wichtiger. Die genannten Reaktionen sind sehr stark von der Temperatur abhängig. Der starke Tagesgang der Temperaturen in der Thermosphäre, der durch die Sonneneinstrahlung verursacht wird, führt dazu, dass für das Nacht-Tag-Verhältnis von NO, im Folgenden δ_{NO} genannt, überwiegend gilt: $\delta_{\text{NO}} < 1$.

Zur Optimierung des UA NOT-Retrievals der Nachtspektren wird im Folgenden eine Funktion gesucht, die in der Thermosphäre das NO-Höhenprofil bei Nacht in Abhängigkeit des NO-Höhenprofils am Tag abbildet. Das gesuchte Nacht-Tag-Verhältnis von NO, δ_{NO} , für MIPAS Messungen auf 22 Uhr und 10 Uhr Lokalzeit bezogen, ist in Bild 5.5 als Höhenprofil bei unterschiedlicher geomagnetischer Aktivität für drei zonale Mittel (links: 90S-50S, Mitte: 50S-50N, rechts: 50N-90N) dargestellt. Die Fehlerbalken zeigen den Feh-

ler des Mittelwerts an. Dabei wurden Daten aus Breiten mit Polartag und Polarnacht nicht berücksichtigt. Ein Kriterium für die Diagonalelemente der Averaging Kernel Matrix (AVKD) wurde nicht angewendet. Es wurden dafür alle MIPAS UA Level 2-Daten von 2005 bis 2009 (siehe Tabelle 5.2) der Version V4O_NOT_611 verwendet. δ_{NO} wird von folgenden Parametern bestimmt:

- Geomagnetische Breite und Ap-Index: NO wird in der unteren Thermosphäre in hohen geomagnetischen Breiten durch Elektronen der Aurora produziert. Die Elektronen werden von der Nachtseite hin zur Erde beschleunigt. Auf der Nachtseite wird deshalb im Bereich der Aurora mehr NO produziert als auf der Tagseite, was dazu führen kann, dass dort $\delta_{\text{NO}} > 1$ werden kann. Dies sieht man in Bild 5.5 zwischen 100 km und 110 km in hohen Breiten, auch wenn in diesem Bild geographische zonale Mittel dargestellt sind. Zudem sieht man deutlich, dass δ_{NO} in niedrigen Breiten (Mitte) keine starke Abhängigkeit zur geomagnetischen Aktivität zeigt. In höheren Breiten wird δ_{NO} mit zunehmender geomagnetischen Aktivität größer.
- Höhe: δ_{NO} ist aufgrund der temperaturabhängigen chemischen Reaktionen und der höhenabhängigen Photolyseraten in der Thermosphäre von der Höhe h abhängig. Zwischen 100 km und 170 km wird δ_{NO} mit der Höhe kleiner und erreicht mit ~ 0.4 ein Minimum bei ~ 170 km Höhe in allen drei zonalen Mitteln. Zusätzlich ist die im letzten Punkt erwähnte NO Produktion durch Elektronen höhenabhängig. In Bild 5.5 ist δ_{NO} in schwarz für Tage mit $\text{Ap} < 5$ dargestellt. Die blaue Kurven stehen für Tage, an denen $5 < \text{Ap} < 15$ gilt, die rote Kurve steht für Tage, an denen $15 < \text{Ap}$ gilt. In diesem Bild sieht man die stärkste Abhängigkeit zum Ap Index in 100 km Höhe, wo ungefähr auch das Maximum der auroralen NO-Produktion liegt.
- Datum und geographische Breite: Das Datum bestimmt abhängig von der geographischen Breite die Tages- und Nachtlänge. Insbesondere bestimmt es die Breiten von Polartag und Polarnacht, an denen es kein Nacht-Tag-Verhältnis geben kann. Der Abstand von Erde und Sonne variiert mit dem Datum und mit Datum und geographischer Breite lässt sich auch der Sonnenzenitwinkel berechnen. Von beidem können photochemische Reaktionen abhängig sein.

Bild 5.6 zeigt einige Schritte, die zur Bestimmung der Modellparameter dienen. MIPAS-Daten mit AVKD $> 0,03$ sowie Daten in Breiten der Polarnacht und des Polartags wurden nicht berücksichtigt. Bild 5.6 a) zeigt genau wie Bild 5.5 das Höhenprofil von δ_{NO} , gemittelt über die Messungen von 2005 bis 2009, zusammen mit dem Fehler des Mittelwerts. In diesem Bild ist δ_{NO} jedoch vom Ap Index unabhängig. δ_{NO} wurde jeweils für niedrige Breiten (50S-50N, „Äquator“), für den Winterpol („WiPol“), den Sommerpol („SoPol“) und den Äquinoxpol („ÄqPol“) gemittelt, wobei für die geographische Breite ϕ der Pole gilt: $|\phi| > 50^\circ$. Man erkennt, dass es für den Genauigkeitsanspruch eines a priori Profils genügt, wenn man die dargestellte Aufteilung nicht macht und ein Profil über alle Daten erstellt („Gesamt“). Ein Polynomfit der dritten Ordnung wurde an diese Kurve gelegt:

$$\delta_{\text{NO,xray}}(h) = a_0 + a_1 h + a_2 h^2 + a_3 h^3. \quad (5.12)$$

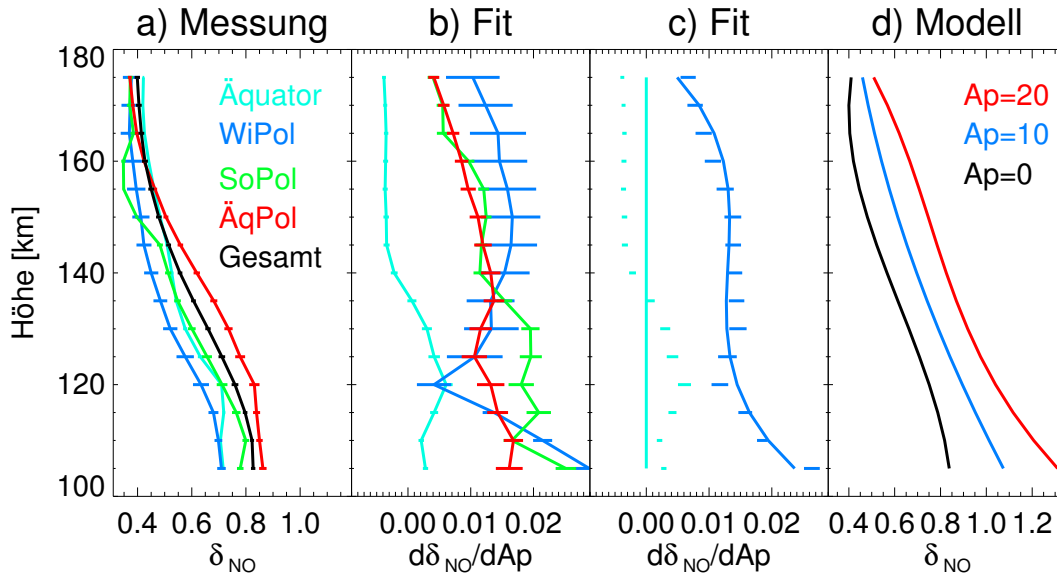


Bild 5.6.: a) Aus den MIPAS-UA Messungen (2005-2009) ermitteltes Nacht-Tag-Verhältnis von NO (δ_{NO}) als Höhenprofil. „Äquator“ steht für 50S-50N, „WiPol“, „SoPol“ und „ÄqPol“ für den Winterpol, den Sommerpol und den Äquinopol, wobei für die geographische Breite ϕ gilt: $|\phi| > 50^\circ$. Die Fehlerbalken stellen den Fehler des Mittelwerts dar.

b) Durch einen linearen Fit ermittelte Ableitung von δ_{NO} nach dem Ap Index ($d\delta_{NO}/dAp$). Die Farbkodierung ist dieselbe wie in a). Die Fehlerbalken zeigen das 1σ -Vertrauensintervall der Ableitungen an.

c) $d\delta_{NO}/dAp$ für niedrige Breiten (hellblau) und für hohe Breiten (dunkelblau). Die Fehlerbalken zeigen das jeweilige 1σ -Vertrauensintervall der ermittelten Ableitungen an. Die durchgezogenen Linien zeigen das Modell für $d\delta_{NO}/dAp$ an.

d) δ_{NO} -Modell für drei verschiedene Ap-Werte (0, 10 und 20). Die Größe der Ap-Werte und die Farbkodierung dienen zum Vergleich mit Bild 5.5.

Der Fit ist als schwarze Kurve in Bild 5.6 d) zu sehen. Für die Koeffizienten wurden folgende Werte bestimmt:

$$\begin{aligned} a_0 &= -5.3923, \\ a_1 &= 0.1524 \text{ km}^{-1}, \\ a_2 &= -1.198 \cdot 10^{-3} \text{ km}^{-2}, \\ a_3 &= 2.944 \cdot 10^{-6} \text{ km}^{-3}. \end{aligned}$$

Die in Bild 5.5 gesehene Abhängigkeit von δ_{NO} soll nun näher bestimmt werden. Dazu werden wie in Bild 5.6 a) niedrige Breiten, Winterpol, Sommerpol und Äquinopol separat betrachtet. Eine lineare Funktion

$$\delta_{NO,e^-}(h, Ap) = \frac{d\delta_{NO}}{dAp}(h) \cdot Ap, \quad (5.13)$$

die an die Daten separat für jede Höhe h angefitet wurde, liefert nun $d\delta_{\text{NO}}/d\text{Ap}(h)$. $d\delta_{\text{NO}}/d\text{Ap}(h)$ ist in Bild 5.6 b) als Höhenprofil aufgetragen. Die Fehlerbalken stellen das 1σ -Vertrauensintervall der Ableitungen dar. Die Farben sind Bild 5.6 a) entsprechend gewählt. Wiederum liegen die Kurven so nah beieinander, dass es für die Genauigkeit eines a priori Profils genügt, wenn man alle Pole gemeinsam betrachtet. In niedrigen Breiten werden die bestimmten Abhängigkeiten nicht berücksichtigt, da sie zu klein sind. Ein Polynomfit der dritten Ordnung soll nun die Höhenabhängigkeit von $d\delta_{\text{NO}}/d\text{Ap}$ bestimmen:

$$\frac{d\delta_{\text{NO}}}{d\text{Ap}}(h) = b_0 + b_1h + b_2h^2 + b_3h^3. \quad (5.14)$$

Der Fit ist in Bild 5.6 c) für die Gesamtheit aller Pole als durchgezogene blaue Linie dargestellt. Die hellblaue Linie bei $d\delta_{\text{NO}}/d\text{Ap}(h) = 0,00$ zeigt die angenommene Unabhängigkeit gegenüber dem Ap Index von δ_{NO} in niedrigen Breiten. Die Fehlerbalken stellen das 1σ -Vertrauensintervall der entsprechenden Ableitungen dar. Dabei wurden für die Koeffizienten des Fits folgende Werte bestimmt:

$$\begin{aligned} b_0 &= 0.5705, \\ b_1 &= -1.152 \cdot 10^{-2} \text{ km}^{-1}, \\ b_2 &= 7.970 \cdot 10^{-5} \text{ km}^{-2}, \\ b_3 &= -1.843 \cdot 10^{-7} \text{ km}^{-3}. \end{aligned}$$

Für geomagnetische Breiten $< 50^\circ$ ist $d\delta_{\text{NO}}/d\text{Ap}(h) = 0$, zwischen 50° und 60° wird linear interpoliert. Zum Polartag und zur Polarnacht hin wird $\delta_{\text{NO}}(h)$ in einem zonalen Band mit der Breite 10° linear an 1 interpoliert. Ein Modell kann δ_{NO} also folgendermaßen berechnen:

$$\delta_{\text{NO}}(h, \text{Ap}) = \delta_{\text{NO,xray}}(h) + \delta_{\text{NO,e}^-}(h, \text{Ap}), \quad (5.15)$$

wobei die Interpolationen in dieser Formel nicht enthalten sind. Für Höhen oberhalb 170 km gilt für die gesuchte Funktion: $\delta_{\text{NO}}(h > 170) = \delta_{\text{NO}}(h = 170)$, da die höchste UA-Messung bei 172 km erfolgte (Tabelle 5.1). Das Modell ist für hohe Breiten und für drei verschiedene Ap-Index-Werte (0, 10 und 20) in Bild 5.6 d) dargestellt. Die schwarze Kurve (Ap=0) entspricht dem Modell in niedrigen Breiten. Farben und Werte orientieren sich an Bild 5.5.

In Bild 5.7 ist der Vergleich zwischen dem NOT-Retrieval und dem Retrieval mit dem neu bestimmten a priori Profil (im Bild NO-Retrieval genannt) für Nachtmessungen vom 22. Juli 2005 dargestellt. An diesem Tag war Ap = 32.9. Aufgrund des Polartags gibt es in hohen nördlichen Breiten keine Messungen. Ein weiterer Orbit konnte nicht ausgewertet werden (zwischen 30°N und 40°N). In der oberen Reihe findet sich das ausgewertete NO-VMR des NO-Retrievals (links) und des NOT-Retrievals (Mitte). Rechts findet sich die Differenz der beiden Bilder in %. In der mittleren Reihe findet sich dasselbe für das a priori Profil. Links ist das neu bestimmte a priori Profil für das NO-Retrieval abgebildet, in der Mitte das alte für das NOT-Retrieval, das aus den Tagmessungen abgeleitet wurde. Rechts ist die Differenz der a priori Profile in % abgebildet. Das Bild rechts stellt also das Modell des Nacht-Tag-Verhältnisses von NO (δ_{NO}) dar. In der unteren Reihe ist die Differenz zwischen ausgewertetem NO und dem a priori Profil in % dargestellt: Für das NO-Retrieval links und für das NOT-Retrieval in der Mitte.

5. MIPAS/ENVISAT

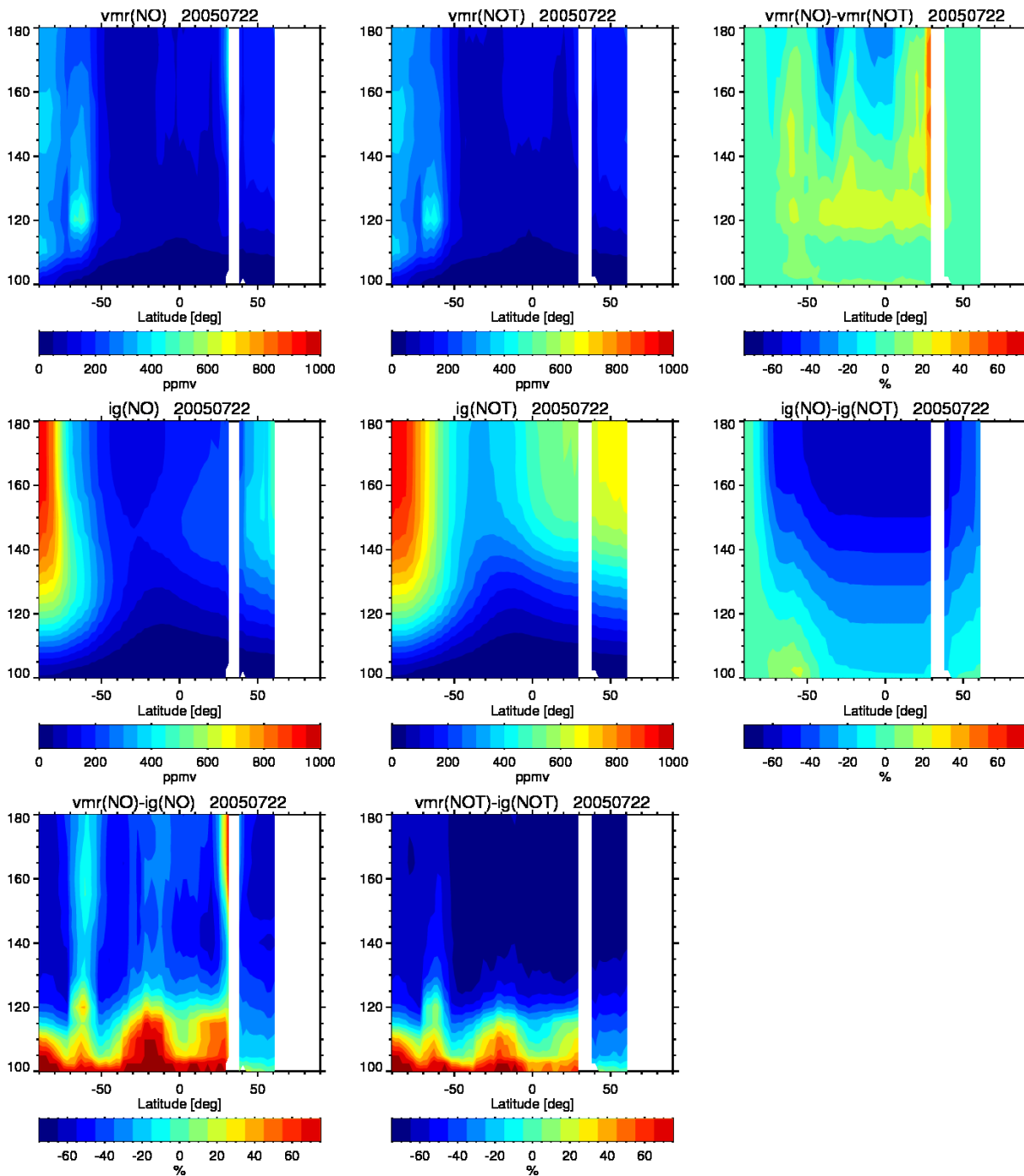


Bild 5.7.: NO-Retrieval (NOT-Retrieval mit verbessertem a priori Profil) und NOT-Retrieval von Nachtmessungen des UA Modus am 22. Juli 2005 von MIPAS. Oben: Ausgewertetes VMR von NO in ppm, Mitte: a priori Profil von NO (initial guess: ig) in ppm, unten: Differenz zwischen ausgewertetem NO und dem a priori Profil in %. Links: NO-Retrieval, Mitte: NOT-Retrieval, rechts: Differenz zwischen NO und NOT in %.

In den a priori Profilen zeigt sich in hohen Breiten ein erhöhtes VMR von NO. Dort ist die NO-Produktion durch Teilchenniederschlag erhöht, wofür auch der hohe Wert des Ap Index (32,9) ein Indikator ist. Den Unterschied der a priori Profile (mittlere Reihe rechts) zeigt die Funktion $\delta_{\text{NO}}(h, \text{Ap})$ an. Um den Südpol herrscht Polarnacht. Hier gibt es kein Tag-Nachtverhältnis, weshalb $\delta_{\text{NO}}(h, \text{Ap}) = 1$ angenommen wurde. Richtung Norden wird zu auroralen Breiten hin auf einem 10° breitem zonalen Band interpoliert. Zwischen 100 km und 110 km ist $\delta_{\text{NO}}(h, \text{Ap}) > 1$ aufgrund der bestimmten Abhängigkeit zum Ap Index. Zu niedrigen geomagnetischen Breiten hin wird wieder auf einem 10° breitem zonalen Band interpoliert, was in der Darstellung mit geographischen Breiten zu einem ca. 20° breitem zonalen Band verschmiert. In den niedrigen Breiten erkennt man deutlich das dafür bestimmte Höhenprofil von $\delta_{\text{NO,xray}}(h)$.

Das ausgewertete NO zeigt in beiden Fällen ein deutlich geringeres VMR gegenüber den a priori Profilen in hohen Breiten oberhalb 110 km. NOEM überschätzt also die NO-Produktion an diesem Tag. Dagegen wird in beiden a priori Profilen das VMR von NO in allen Breiten zwischen 100 km und ~ 110 km unterschätzt. In beiden beschriebenen Bereichen ändert sich das VMR des ausgewerteten NO so gut wie nicht. Auffällig ist, dass in Breiten mit $|\phi| < 60^\circ$ zwischen 120 km und 140 km Höhe ein bis zu 30 % größeres VMR im neuen Retrieval bestimmt wird. Oberhalb 160 km wird es teilweise kleiner. In diesem Bereich nähern sich das ausgewertete Höhenprofil und das a priori Profil des neuen Retrievals an. Differenzen von über 80 % zwischen dem alten NO-Retrieval und dem alten a priori Profil liegen mit dem neuen Retrieval nur noch zwischen 20 % und 40 %.

An dieser Stelle sei daran erinnert, dass beim Retrieval eines Höhenprofils Veränderungen des VMR in höheren Schichten Auswirkungen auf das ausgewertete VMR in den darunter liegenden Schichten haben. Es sei auch daran erinnert, dass die Tikhonov-Regularisierung angewendet wird. Das bedeutet, es wird nach der Steigung und nicht nach den Werten des a priori Profils regularisiert. Beides kann dazu führen, dass das ausgewertete VMR größer wird, obwohl das a priori VMR lokal kleiner wird.

Ergebnisse dieses neuen Retrievals werden in der High Energy Particle Precipitation in the Atmosphere (HEPPA) II Studie verwendet (<http://heppa.iaa.es/>). Sie wurden bis jetzt noch in keiner Zeitschrift veröffentlicht, sondern erst auf Konferenzen vorgestellt (z.B. von Manuel López-Puertas am 10. September 2013 in Edinburgh beim Living Planet Symposium).

6. SPE 2003

In diesem Kapitel wird die NO_x -Datenanalyse der MIPAS/ENVISAT Messungen vor, während und nach dem „Halloween“-SPE im Oktober-November 2003 beschrieben. Dieser Teil der Arbeit wurde in *Atmospheric Chemistry and Physics* [Friederich et al., 2013] veröffentlicht (Anhang A). Aufbau und Inhalt ähneln daher dieser Veröffentlichung.

Der Halloween-SPE 2003 wurde in verschiedenen Arbeiten untersucht (Seppälä et al., 2004, 2007; Jackman et al., 2005; López-Puertas et al., 2005; Baumgaertner et al., 2010; Funke et al., 2011). Bis heute gab es keinen vergleichbar starken SPE mehr. Der Ap Index und der Dst Index des Jahres 2003 sind in Bild 6.1 dargestellt. Die Indizes nahmen während des SPEs am 28. Oktober (Tag 301) Werte an, die bis heute nicht mehr erreicht wurden. Der Dst Index wurde kleiner als -200, der Ap Index größer als 200. Am 18. November (Tag 322) trat zudem noch ein kleinerer SPE auf.

Vergleiche zwischen Modellen der mittleren Atmosphäre und Messungen ergeben dabei verschiedene Abweichungen in den Auswirkungen auf NO_x . In der Studie von Funke et al. (2011) überschätzen z.B. alle Modelle die gemessene NO_x -Erhöhung in der oberen Stratosphäre und unteren Mesosphäre in hohen nördlichen Breiten ($70^\circ\text{N} - 90^\circ\text{N}$). Die Abweichungen zwischen Modellen und Messung liegen durchschnittlich bei 30% und erreichen bis zu 50% in ~ 60 km Höhe. In komplexen Modellen ist es aber schwierig, die Ursache dafür zu finden. In dieser Analyse werden deshalb aus den MIPAS-Messungen

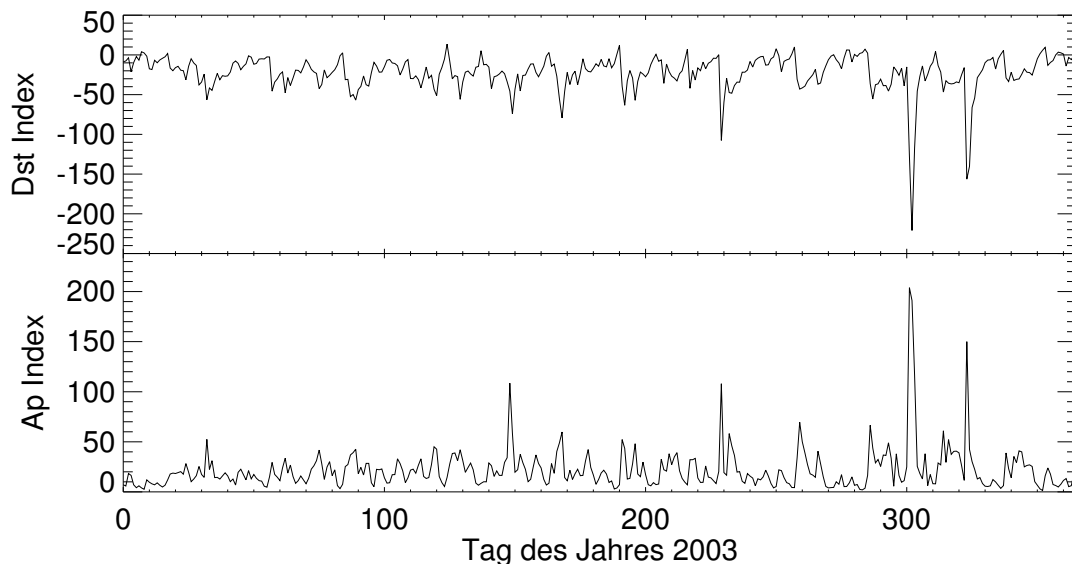


Bild 6.1.: Dst Index (oben) und Ap Index (unten) im Jahr 2003

die NO_x -Lebensdauer (Kapitel 6.1) sowie die NO_x -Produktionsrate (Kapitel 6.2) mit Hilfe eines 3d Modells für Ionisationsraten abgeleitet. Dazu werden an die Messungen einfache Funktionen angefügt, die von den zu suchenden Parametern abhängig sind. Die ermittelten höhenabhängigen NO_x -Lebensdauern und -Produktionsraten können in Zukunft zur Überprüfung von Modellen dienen. Da der Halloween-SPE 2003 der SPE war, der im Zeitraum der MIPAS Messungen (2002-2012) die mittlere Atmosphäre am stärksten beeinflusst hat, wurde dieses Ereignis für die Analyse ausgesucht.

Für die Analyse der Daten werden 6-Stunden- und 24-Stunden-Mittelwerte der südlichen Polarkappe (50°S – 90°S) untersucht. Verwendet werden die Versionen V30_NO_14 und V30_NO2_13/14. Es gilt nach der Definition von NO_x :

$$\text{VMR}(\text{NO}_x) = \text{VMR}(\text{NO}) + \text{VMR}(\text{NO}_2). \quad (6.1)$$

Zur Filterung der Daten werden die Diagonalelemente der Averaging Kernel Matrix $\text{AVKD}(\text{NO}_x)$ als Mittel von $\text{AVKD}(\text{NO})$ und $\text{AVKD}(\text{NO}_2)$ berechnet und mit dem entsprechenden VMR gewichtet:

$$\text{AVKD}(\text{NO}_x) = \frac{\text{VMR}(\text{NO}) \cdot \text{AVKD}(\text{NO}) + \text{VMR}(\text{NO}_2) \cdot \text{AVKD}(\text{NO}_2)}{\text{VMR}(\text{NO}) + \text{VMR}(\text{NO}_2)}. \quad (6.2)$$

Im Folgenden werden zonale Mittel der südlichen Polarkappe (50°S – 90°S) sowohl vom VMR als auch von der Teilchenzahldichte

$$n = \frac{\text{VMR} \cdot p}{k_B T} \quad (6.3)$$

berechnet, wobei p den Druck [Pa], k_B die Boltzmannkonstante [J/K] und T die Temperatur [K] angibt. Diese Mittel werden nur berechnet, wenn mindestens drei Messungen von verschiedenen Geolokationen vorliegen und das Mittel von $\text{AVKD}(\text{NO}_x)$ größer als 0,03 ist. Alle NO_x -Werte werden unabhängig ihres Sonnenzenitwinkels (engl.: solar zenith angle, SZA) in die Analyse einbezogen.

6.1. Lebensdauer von NO_x

Der SPE war verantwortlich für eine starke NO_x -Erhöhung in polaren Breiten oberhalb ~ 45 km, welche von MIPAS/ENVISAT beobachtet wurde (López-Puertas et al., 2005). Das Maximum des NO_x -VMRs wurde je nach Höhe am 30./31. Oktober beobachtet. Anschließend wurde ein ca. vier Tage andauernden Abfall beobachtet, der höhenabhängig unterschiedlich ablief.

Die Lebensdauer von NO_x beträgt in Höhen zwischen 42 km und 64 km typischerweise wenige Tage unter Einfluss von Sonnenstrahlung (Basseur und Salomon, 2005). Die große Anzahl an Messungen pro Tag von MIPAS erlaubt es daher die Lebenszeit von NO_x in diesen Höhen zu bestimmen.

Für die Analyse werden 6-Stunden-Mittel von jeder einzelnen Höhe des Retrievalgitters berechnet. Diese Höhen sind 42 km, 43 km, 44 km, 45 km, 46 km, 47 km, 48 km,

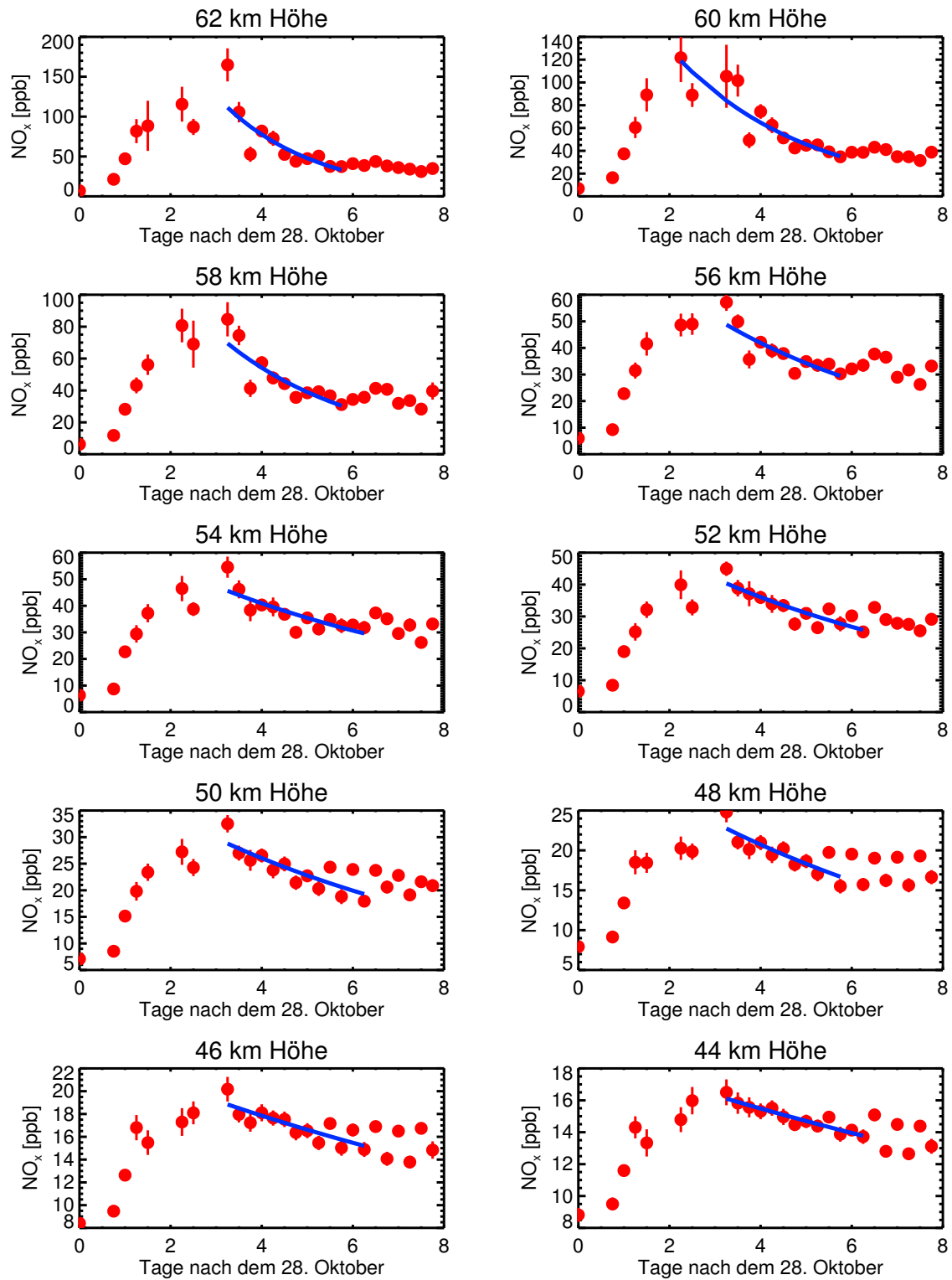


Bild 6.2.: MIPAS Messungen von NO_x-VMR (rot) im Oktober-November 2003 zwischen 50°S und 90°S und die Fits einer Exponentialfunktion (blaue Kurve). Die Fehlerbalken geben den Fehler des Mittelwertes der zonalen 6-h-Mittel an.

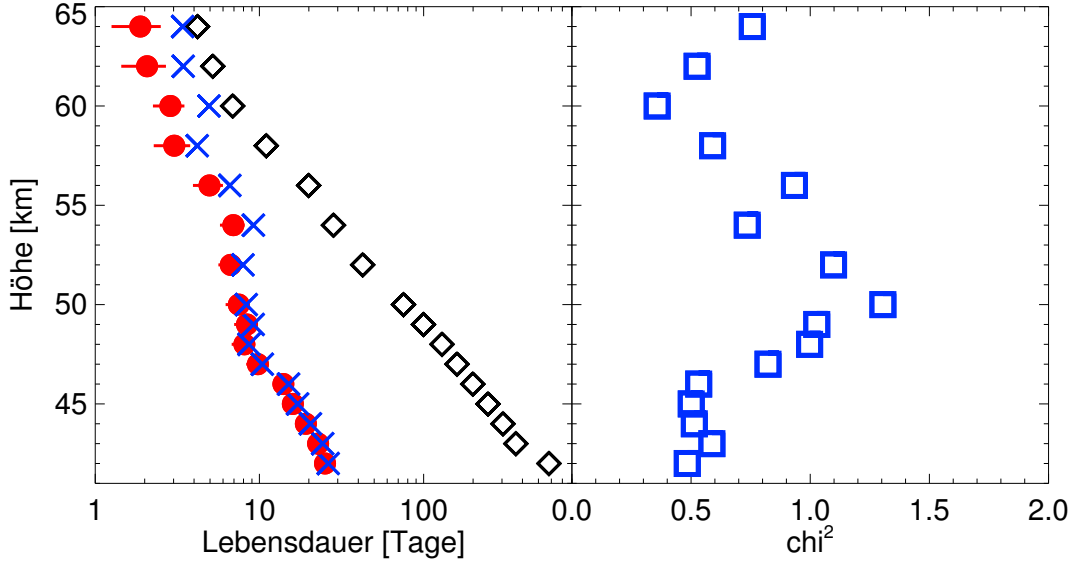


Bild 6.3.: Links: Höhenabhängige Lebensdauer (rot) von NO_x nach dem SPE am 30. Oktober 2003 zwischen 50°S und 90°S . Die Fehlerbalken geben den $1\text{-}\sigma$ -Bereich des Wertes wieder. In schwarzen Rauten ist τ_{phot} dargestellt, in blauen Kreuzen τ_{dyn} . Rechts: Höhenabhängige χ^2 -Werte zwischen Messung und Fit.

49 km, 50 km, 52 km, 54 km, 56 km, 58 km, 60 km, 62 km und 64 km. Maximal werden 61 Geolokationen gemittelt, während des SPE im Mittel ungefähr 35 bis 40. Die Mittel sind in Bild 6.2 als rote Punkte für die Höhen 44 km bis 64 km in 2 km-Schritten dargestellt. Die Fehlerbalken geben den Fehler des Mittelwerts an. Ab dem 28. Oktober steigt das NO_x -VMR in allen Höhen rapide an. In allen Höhen bis auf 60 km wird das Maximum in der Südhemisphäre am 31. Oktober erreicht. Danach sinkt das NO_x -VMR wieder. Die Exponentialfunktion

$$\text{VMR}(t) = \text{VMR}(t_0) \cdot \exp\left(\frac{t - t_0}{\tau}\right) + c. \quad (6.4)$$

wird an die gemessenen Werte des NO_x -VMR gefittet. Der Einfachheit halber steht in der Gleichung VMR anstatt $\text{VMR}(\text{NO}_x)$. In ihr steht t_0 für den Zeitpunkt des Maximums und τ für die höhenabhängige Lebensdauer von NO_x . Der Fit hat drei Freiheitsgrade: $\text{VMR}(t_0)$, τ und die Konstante c . Er wird so berechnet, dass jeder Wert mit seiner inversen Varianz gewichtet wird. Der Fit ist als blaue Kurve in Bild 6.2 für die entsprechenden Höhen dargestellt. Die durch den Fit ermittelte höhenabhängige Lebensdauer τ von NO_x ist in Bild 6.3 (links) durch rote Punkte dargestellt. Die Fehlerbalken geben den $1\text{-}\sigma$ -Fehlerbereich an, der sich aus dem Fitfehler ergibt. Die χ^2 -Werte zwischen Messung und Fit werden durch folgende Formel ermittelt:

$$\chi^2 = \frac{1}{n - f} \sum_i \frac{(\bar{x}_i - y_i)^2}{\sigma_i^2} \quad (6.5)$$

und sind in Bild 6.3 (rechts) dargestellt. n bezeichnet die Anzahl der zu Verfügung stehenden Messwerte, f die Anzahl der Freiheitsgrade. x_i sind die einzelnen Messwerte und y_i die entsprechende Werte des Fits. σ_i^2 steht für die Varianz des entsprechenden Werts. χ^2 nimmt Werte zwischen 0,3 und 1,4 an. Die Annahme des exponentiellen Abfalls der NO_x -VMR ist also vernünftig. Die Werte, die kleiner als 1 sind, belegen, dass der Standardfehler des Mittelwerts überschätzt wird, wenn man die gewöhnliche Abschätzfunktion (Standardabweichung geteilt durch die Wurzel der der Probengröße) wählt - wie es auch in Toohey und von Clarmann (2013) besprochen wird. Ist $\chi^2 > 1$, nimmt die Wahrscheinlichkeit mit größer werdendem χ^2 zu, dass der Fit außerhalb der Fehlerbereiche einzelner Werte liegt.

Die Lebensdauer von NO_x , die durch die MIPAS-Messungen bestimmt wurde, hängt von der höhenabhängigen NO-Photolyserate und von der Reaktionsrate der „kannibalistischen“ Reaktion 3.12 ab. Außerdem hängt τ von einem dynamischen Anteil ab, der durch Vermischung und horizontalem Transport bestimmt wird. Dieser dynamische Anteil ist verantwortlich für die Verteilung von durch den SPE produziertem NO_x außerhalb der Polarkappe. In dieser Analyse wird folgende vereinfachte Annahme gemacht: Die Quelle von NO_x befindet sich innerhalb der Polarkappe. Außerhalb der Polarkappe kommt es nicht zu einem Anstieg des NO_x -VMR. Auch ändert sich die gewöhnliche NO_x -Produktion in den drei Tagen nach dem SPE nicht. Das heißt insbesondere, dass es in den drei Tagen nach dem SPE keinen erhöhten Teilchenniederschlag gibt. Deshalb kann man mit diesen Annahmen sowohl für den photochemischen Verlust als auch für die NO_x -Abnahme durch dynamische Effekte einen exponentiellen Ansatz wählen.

Folgende Beziehung gilt für die Lebensdauer von NO_x :

$$\frac{1}{\tau} = \frac{1}{\tau_{\text{phot}}} + \frac{1}{\tau_{\text{dyn}}}. \quad (6.6)$$

Die photochemische Lebensdauer von NO_x , τ_{phot} , wird zum einen durch die $\text{N}(^4\text{S})$ -Produktion durch NO-Photolyse berechnet, zum anderen durch den $\text{N}(^4\text{S})$ -Verlust bei der Reaktion mit NO (Reaktion 3.12). Weiterhin muss die Reaktion von $\text{N}(^4\text{S})$ mit O_2 berücksichtigt werden (Reaktion 3.11). Abhängig davon, ob Reaktion 3.11 oder 3.12 dominiert, kann der photochemische Verlust zwischen 0 und 2 NO pro Photon betragen. τ_{phot} kann folgendermaßen berechnet werden:

$$\tau_{\text{phot}} = \frac{1}{2 \cdot J_{\text{NO}} \cdot br_{3.12}} \quad (6.7)$$

J_{NO} bezeichnet die höhenabhängige Photolyserate von NO. $br_{3.12}$ beschreibt das Verzweigungsverhältnis (engl.: branching ratio) der Reaktion 3.12 verglichen mit beiden Reaktionen, bei denen $\text{N}(^4\text{S})$ ein Reaktant ist (Reaktionen 3.11 und 3.12):

$$br_{3.12} = \frac{k_{3.12}[\text{NO}]}{k_{3.12}[\text{NO}] + k_{3.11}[\text{O}_2]}. \quad (6.8)$$

Sander et al. (2006) geben die Ratenkonstanten mit $k_{3.11} = 1.5 \times 10^{-11} \cdot e^{-\frac{3600}{T}}$ und $k_{3.12} = 2.1 \times 10^{-11} \cdot e^{-\frac{100}{T}}$ an, wobei T für die Temperatur steht. $br_{3.12}$ ist also sehr stark von T abhängig.

Holger Nieder hat mit K3dCTM J_{NO} für die entsprechende Zeit und für die entsprechenden Geolokation berechnet. K3dCTM interpoliert dabei vorberechnete J_{NO} einer vierdimensionalen Wertetabelle. Die Dimensionen sind dabei Druck, Temperatur, O₃-Säule und SZA. Der Absorptionsquerschnitt von NO ist aus Minschwaner und Siskind (1993) entnommen. Sie geben die Unsicherheit mit 30-40 % in der stratosphärischen Photolyserate an. Die Teilchenzahldichte [NO] und T wird aus den MIPAS-Messungen entnommen. Für die Berechnungen werden nur Daten benutzt, an denen es Tag ist (SZA < 89°). Die berechnete photochemische Lebensdauer τ_{phot} stellt also eine Untergrenze dar. Infolgedessen stellt die berechnete dynamische Lebensdauer τ_{dyn} eine Obergrenze dar, da sie anhand der Gleichung 6.6 berechnet wird.

In Bild 6.3 (links) sind τ_{phot} (schwarze Rauten) und τ_{dyn} (blaue Kreuze) zusätzlich zu τ (rote Punkte) abhängig von der Höhe dargestellt. Alle drei Lebensdauern werden mit der Höhe kleiner. Bei 42 km Höhe beträgt τ 20,6 ± 3,6 Tage. Mit der Höhe fällt τ ab auf 1,8 ± 0,4 Tage in 64 km Höhe. Bei 54 km sieht man ein kleines lokales Maximum von τ . In diesen Höhen ist der Transport anscheinend weniger effektiv als in den angrenzenden Höhen darunter und darüber. Zusätzlich muss man beachten, dass Reaktion 3.11 durch die starke Temperaturabhängigkeit effektiver am Temperaturminimum der Stratopause als in anderen Höhen ist. So wird die chemische Reaktion von N(⁴S) mit O₂ zu NO bevorzugt und pro photolysiertes NO geht durchschnittlich weniger NO verloren. τ_{phot} beträgt 592 Tage, bei 64 km nur noch 4,2 Tage. Das bedeutet, dass $J=1/\tau_{\text{phot}}$ 3,5 % von $1/\tau$ in 42 km Höhe ausmacht, in 64 km schon 44 %. Die Prozentangaben sind Obergrenzen, da τ_{phot} als Untergrenze gesehen werden muss.

τ hängt also unterhalb 60 km Höhe im Wesentlichen von τ_{dyn} ab. Horizontale Transport- und Mischungsprozesse spielen also in dieser Höhen- und Breitenregion die entscheidende Rolle für die NO_x-Reduktion. Eindimensionale Modelle können dies nicht simulieren. Dazu sind dreidimensionale Modelle notwendig, die auch horizontalen Transport und die Vermischung der Luftmassen möglichst genau wiedergeben können.

6.2. Produktionsraten von NO_x

Vor diesem Teil der Datenanalyse soll der Unterschied zwischen der „normalen“ NO_x-Produktionsrate und der effektiven NO_x-Produktionsrate erläutert werden. Wie schon erwähnt ist Porter et al. (1976) zufolge die Produktionsrate

$$pr(\text{NO}_x) = 1.25 \cdot \frac{\text{NO}_x}{\text{Ionenpaar}} \quad (6.9)$$

Genau genommen berechneten sie aber die Produktion von N(⁴S) und N(²D), sodass präzise formuliert folgendes gilt:

$$pr(\text{N}(\text{}^4\text{S}) + \text{N}(\text{}^2\text{D})) = 1.25 \cdot \frac{\text{N}(\text{}^4\text{S}) + \text{N}(\text{}^2\text{D})}{\text{Ionenpaar}} \quad (6.10)$$

N(²D) reagiert umgehend zu NO, doch N(⁴S) hat mit den Reaktionen 3.11 und 3.12 zwei verschiedene Kanäle, die entweder NO_x-Teilchen erzeugen oder vernichten können,

worauf in Kapitel (6.1) ausführlich eingegangen wurde. Als effektive Produktionsrate wird $pr_{\text{eff}}(\text{NO}_x) = pr(\text{NO} + \text{NO}_2)$ bezeichnet und es gilt für Temperaturen der mittleren Atmosphäre:

$$pr(\text{N}(^4\text{S}) + \text{N}(^2\text{D})) > pr(\text{NO} + \text{NO}_2) = pr_{\text{eff}}(\text{NO}_x). \quad (6.11)$$

Nachdem die höhenabhängigen NO_x -Lebensdauern τ berechnet sind, kann nun nach einer Beziehung zwischen der Teilchenzahldichte n von NO_x und der Ionenpaarproduktion (engl.: ion pair production, IPP) in der mittleren Atmosphäre gesucht werden. Zuerst wird die Analyse der MIPAS-Daten vorgestellt, anschließend werden die Ergebnisse mit den Studien von Funke et al. (2011) und Baumgaertner et al. (2010) verglichen (Kapitel 6.2.1).

MIPAS Messungen werden vom 1. Oktober 2003 bis zum 31. März 2004 verwendet. n wird alle 6 Stunden als gleitender Mittelwert über die vergangenen 24-Stunden berechnet. Dabei werden maximal 211 verschiedene Geolokationen pro Mittel berücksichtigt und fast immer mehr als 150. Der Standardfehler des Mittelwerts ist immer geringer als 1%, außer an den Tagen des SPEs. Da ist er kleiner als 5%.

Die IPP wird von dem Atmospheric Ionization Module Osnabrück (AIMOS) (Wissing und Kallenrode, 2009) zur Verfügung gestellt. AIMOS ist ein dreidimensionales Modell, welches diejenigen Ionisationsraten der Atmosphäre bestimmt, die von präzipitierenden Protonen, Elektronen und α -Teilchen verursacht werden. Messungen der Teilchenflüsse der Geostationary Operational Environmental Satellites (GOES) und von POES bilden die Grundlage des Modells. Dabei wird ein Energiebereich von 150 eV bis 500 MeV für Protonen, 4 MeV bis 500 MeV für α -Teilchen und 150 eV bis 2,5 MeV für Elektronen abgedeckt. Der Energiebereich der Elektronen wird bis 5 MeV extrapoliert. Die von AIMOS berechnete IPP erstreckt sich von 2002 bis 2010 und hängt von der Höhe, Breite und Länge ab. Die räumliche Auflösung beträgt $3,6^\circ \times 3,6^\circ$ bei 67 Druckleveln. Diese reichen von 10^5 Pa bis $1,7 \times 10^{-5}$ Pa, was einer Höhe von ~ 400 km entspricht.

Die zeitliche Entwicklung von n ist von der NO_x -Produktion durch präzipitierende Teilchen während eines SPEs und durch τ bestimmt. Die durch IPP verursachte Produktion von NO_x wird mit Hilfe der MIPAS Daten beschrieben. Die Differenz von n beeinflusst durch die IPP, $n(\text{IPP}, t_0)$, und dem Hintergrund ohne Teilchenniederschlag, $n(\text{IPP} = 0, t_0)$, ist

$$\Delta n_{\text{MIPAS}}(t_0) = n(\text{IPP}, t_0) - n(\text{IPP} = 0, t_0). \quad (6.12)$$

$\Delta n_{\text{MIPAS}}(t_0)$ beschreibt also die Erhöhung von n , welche durch Teilchenniederschlag verursacht wurde. $n(\text{IPP}, t_0)$ ist die durch die MIPAS-Daten bestimmte Teilchenzahldichte. $n(\text{IPP} = 0, t_0)$ wird mit Hilfe einer Polynomfunktion bestimmt, die an die n -Zeitreihe gefittet wird. Um dies möglichst genau zu machen wird der gesamte Zeitraum vom 1. Oktober 2003 bis zum 31. März 2004 verwendet. Eine Nebenbedingung ist, dass kein Wert kleiner als der des Fits sein darf. Außerdem wurden die Tage während des SPEs im Fit nicht mitberechnet. In den Bildern 6.4 und 6.5 werden $n(\text{IPP}, t_0)$ und $n(\text{IPP} = 0, t_0)$ jeweils auf der linken Seite für die Höhen 44 km bis 62 km in 2 km-Schritten gezeigt. $n(\text{IPP}, t_0)$ ist in farbigen Kreuzen dargestellt. Die Farbe ist dabei abhängig vom Zeitpunkt. Tage vor dem SPE sind in grün und gelb, Tage während und kurz nach dem

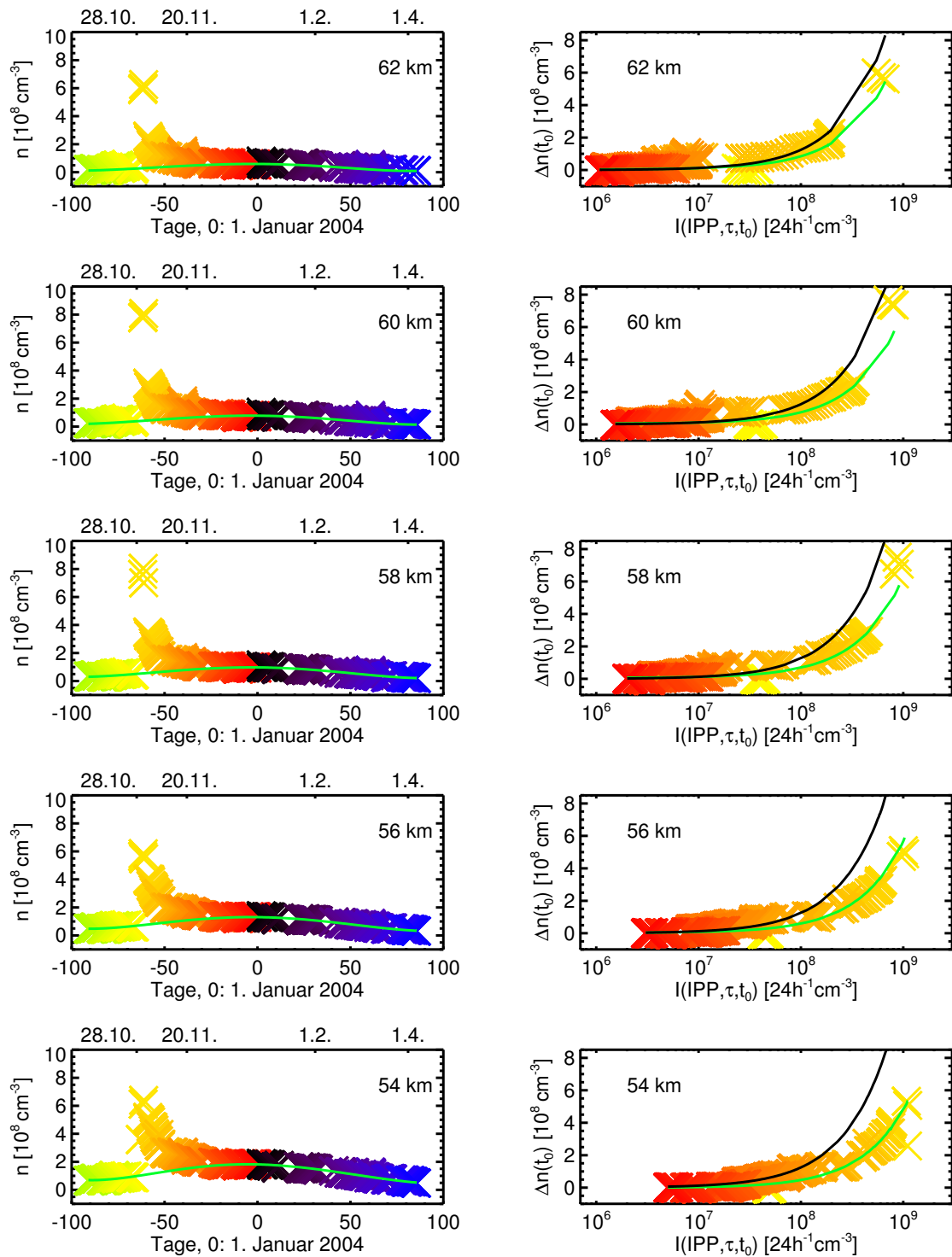


Bild 6.4.: Links: Zeitreihe der NO_x-Teilchenzahldichte vom 1. Oktober 2003 bis zum 31. März 2004 als zonales Mittel von 50°S bis 90°S in farbigen Kreuzen. Als grün Kurve ist ein Polynomfit dargestellt, welche $n(\text{IPP} = 0)$ darstellt. Rechts: $\Delta n_{\text{MIPAS}}(t_0)$ in Abhängigkeit von $I(\text{IPP}, \tau, t_0)$ in farbigen Kreuzen. Die grüne Kurve zeigt den Fit dazu an. Die schwarze Kurve zeigt $\Delta n_{\text{Theorie}}(t_0)$.

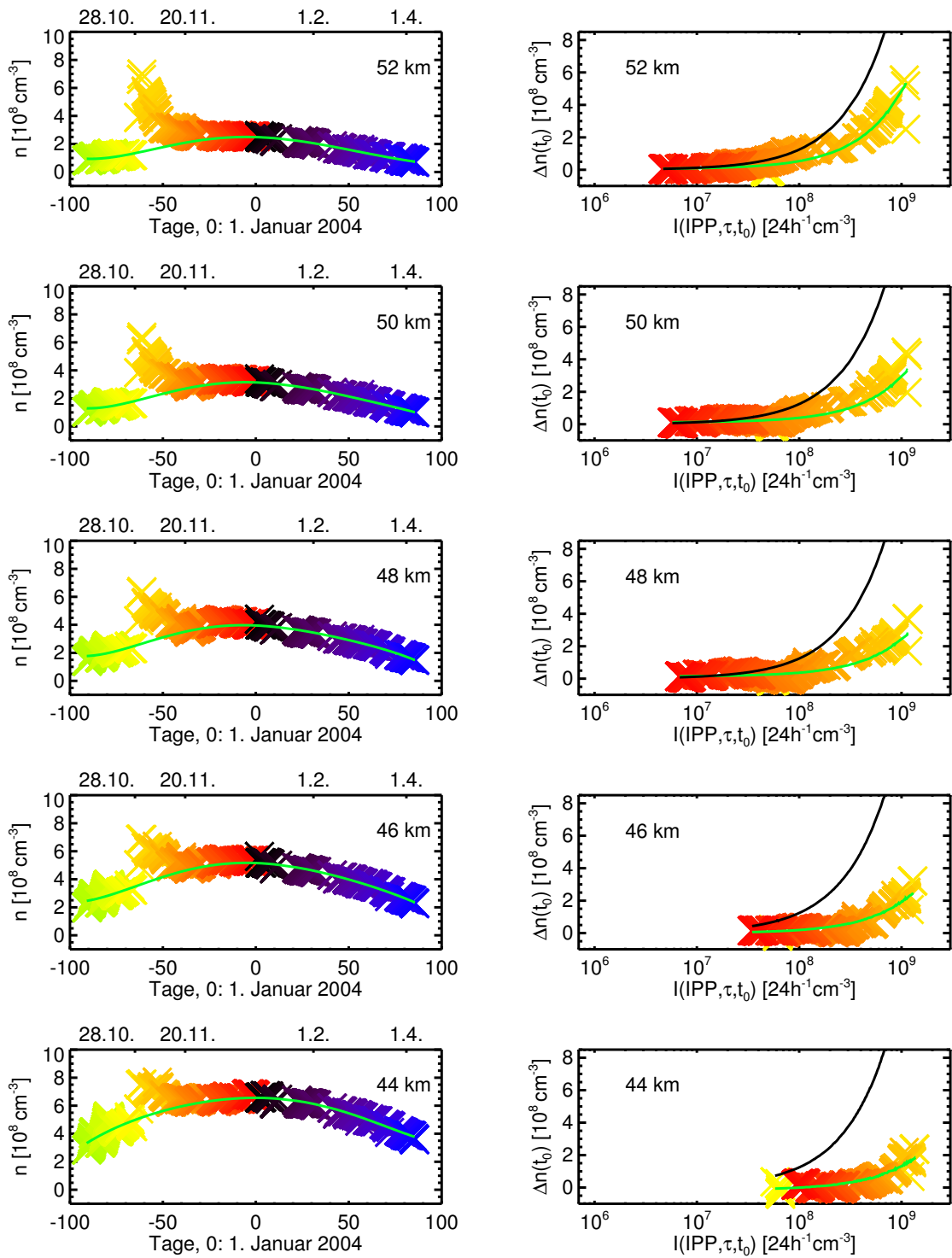


Bild 6.5.: Wie Bild 6.4 für die Höhen 44 km bis 52 km.

SPE in orange und rot. Tage nach dem 1. Januar 2004 in scharz, violett und blau. $n(\text{IPP} = 0, t_0)$ ist als grüne Kurve dargestellt und nimmt mit der Höhe konstant ab. Die einzelnen Plots sind trotz Unterschieden in der Höhe gleich skaliert.

Für die theoretische Bestimmung der Teilchenzahldichte von NO_x , die in dieser Form zum ersten Mal durchgeführt wird, ist es notwendig, die IPP der vergangenen Tage mit der richtigen Gewichtung aufzusummieren, da die NO_x -Lebensdauer τ einige Tage beträgt. Die akkumulierte Ionenpaarproduktion $I(\text{IPP}, \tau, t_0)$ berücksichtigt die Verlustprozesse von NO_x dadurch, dass sie als Gewichtung eine exponentielle Verlustfunktion hat, welche vom Quotient der zeitlichen Differenz $t_0 - t$ und der Lebensdauer τ abhängt:

$$I(\text{IPP}, \tau, t_0) = \int_{-\infty}^{t_0} \text{IPP}(t) \cdot \exp\left(-\frac{t_0 - t}{\tau}\right) dt \quad (6.13)$$

Porter et al. (1976) berechneten die NO_x -Produktion pro Ionenpaar auf 1,27. Üblicherweise wird aber in den Veröffentlichungen der folgenden Jahre auch von den damaligen Co-Autoren die Zahl mit 1,25 angegeben (z.B. Jackman et al., 2005). Die Erhöhung der NO_x -Teilchenzahldichte lässt sich mit dieser Zahl und der akkumulierten Ionenpaarproduktion also theoretisch bestimmen:

$$\Delta n_{\text{Theorie}}(\text{IPP}, \tau, t_0) = 1.25 \cdot I(\text{IPP}, \tau, t_0) \frac{\text{NO}_x}{\text{Ionenpaar}} \quad (6.14)$$

$\Delta n_{\text{Theorie}}(\text{IPP}, \tau, t_0)$ lässt sich berechnen, da AIMOS $\text{IPP}(t)$ zur Verfügung stellt und τ im Kapitel zuvor bestimmt wurde. Da allerdings auch Messungen von MIPAS zu n vorliegen, kann der von Porter et al. (1976) bestimmte Wert überprüft werden. Dazu wird die Gleichung 6.14 umgeschrieben zu:

$$\Delta n_{\text{MIPAS}}(\text{IPP}, \tau, t_0) = pr_{\text{eff}} \cdot I(\text{IPP}, \tau, t_0) \frac{\text{NO}_x}{\text{Ionenpaar}} \quad (6.15)$$

$\Delta n_{\text{MIPAS}}(\text{IPP}, \tau, t_0)$ ist der von MIPAS gemessene Wert, welcher den zuvor theoretisch bestimmten Wert ersetzt. Dafür ersetzt pr_{eff} den theoretisch bestimmten Wert 1,25. pr_{eff} ist die effektive Produktionsrate, welche unabhängig von τ ist und im Folgenden bestimmt wird.

In den Bildern 6.4 und 6.5 sind auf der rechten Seite jeweils $\Delta n_{\text{MIPAS}}(\text{IPP}, \tau, t_0)$ über $I(\text{IPP}, \tau, t_0)$ aufgetragen. Die Höhen entsprechen denen der NO_x -Zeitreihen auf der linken Seite der Bilder. Es sind nur Tage, die unter dem Einfluss des SPE standen, abgebildet (25. Oktober–31. Dezember). Die Farbkodierung entspricht der der Bilder links, deshalb sind nur Kreuze in gelb, orange und rot zu sehen. Die schwarzen Kurven zeigen den theoretischen Wert $\Delta n_{\text{Theorie}}(\text{IPP}, \tau, t_0)$ (Gleichung 6.14) an. Die grünen Kurven repräsentieren die Beziehung, die in Gleichung 6.15 gezeigt wurde, wobei pr_{eff} an die Verteilung angefitet wurde.

An den Tagen vor dem SPE, die durch gelbe Kreuze markiert sind, sieht man ab 50 km aufwärts deutlich, dass die akkumulierte Ionenpaarproduktion erhöht ist, die gemessene Teilchenzahldichte hingegen nicht. Das bedeutet, dass AIMOS am 27./28. Oktober erhöhte IPP zeigt, MIPAS aber keine erhöhten NO_x -VMRs. Die hohen Ionisationsraten

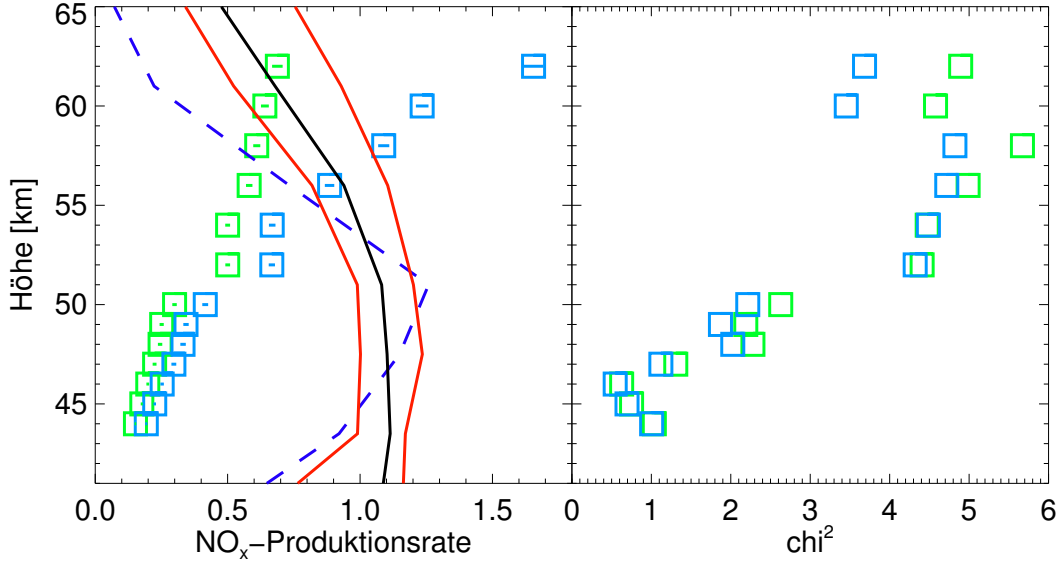


Bild 6.6.: Links: Höhenabhängige effektive NO_x -Produktionsraten: pr_{eff} , mit/ohne durch Elektronen verursachte IPP bestimmt (grüne/blau Quadraste); pr_{box} (schwarze Linie) mit einem im Text erläuterten Fehlerbereich (rote Linien); pr_{B10} (violette gestrichelte Linie). Rechts: Höhenabhängige χ^2 -Werte, die zur Bestimmung von pr_{eff} minimiert wurden.

an diesen Tagen werden im Modell durch Elektronen verursacht. Die gemessenen Elektronenflüsse, die im Modell verwendet werden, werden aber gestört durch Protonenflüsse (Yando et al., 2011). Deshalb ist die von AIMOS berechnete IPP zu hoch. Eine andere Diskrepanz zwischen der gefitteten Kurve und den Werten ist ab 52 km aufwärts an den Werten nach dem 20. November zu sehen, welche in einem dunklen Orange dargestellt sind. An diesen Tagen ist mehr NO_x produziert worden als die Theorie voraussetzt. Entweder ist unter den bestimmten Umständen an diesen Tagen die effektive Produktionsrate deutlich höher oder die NO_x -Lebenszeit τ ist an diesen Tagen um bis zu 50% angestiegen.

In Bild 6.6 (links) sind die mit Hilfe der MIPAS-Daten bestimmten, effektiven Produktionsraten pr_{eff} höhenabhängig in grünen Quadraten dargestellt. Die Fehlerbalken zeigen den 1- σ -Fehler an, der sich aus dem Fit ergibt. Das höhenabhängige χ^2 (Gleichung 6.5) zwischen Messung und Fit ist in Bild 6.6 (rechts) ebenfalls in grünen Quadraten dargestellt. Die empirisch bestimmten pr_{eff} steigen von 0,15 NO_x /Ionenpaar in 44 km Höhe auf 0,69 NO_x /Ionenpaar in 62 km Höhe. Die meisten χ^2 sind deutlich höher als 1. Je schlechter der Fit desto höher ist das χ^2 . Hohe χ^2 sprechen demnach für eine NO_x -Produktion, die nicht-linear oder nicht ausschließlich von IPP abhängt.

Da es wie schon erwähnt berechnete Zweifel an den Ionisationsraten der Elektronen an den Tagen gibt, an denen die Elektronenflussmessungen von Protonen gestört wurden, wurden die Rechnungen ein zweites Mal durchgeführt. Allerdings wurde dabei nur die IPP, die von Protonen und α -Teilchen verursacht wurde, berücksichtigt. Das bedeutet,

dass die in Zweifel gezogene durch Elektronen verursachte IPP weggelassen wird und sich der Absolutwert der IPP dadurch an einem Tag verringert. Da der von MIPAS gemessene NO_x -Anstieg aber gleich bleibt, führt dies zu einer höheren effektiven NO_x -Produktion pr_{eff} . Die neu berechneten NO_x -Produktionsraten sind in Bild 6.6 (links) in blauen Quadraten dargestellt und bestätigen das erwartete Verhalten. Oberhalb 56 km Höhe vergrößert sich pr_{eff} um $\sim 80\%$ (58 km) – $\sim 130\%$ (62 km) auf $0,88 \text{ NO}_x/\text{Ionenpaar}$ – $1,63 \text{ NO}_x/\text{Ionenpaar}$. Zwischen 44 km und 50 km nur um $\sim 5\%$ – $\sim 15\%$ und bleiben damit unter $0,5 \text{ NO}_x/\text{Ionenpaar}$. Die entsprechenden χ^2 sind in Bild 6.6 (rechts) ebenfalls in blauen Quadraten dargestellt. Sie sind generell etwas kleiner. Der neu berechnete Fit ist also in jeder Höhe näher an den Messwerten. Die neu berechneten effektiven NO_x -Produktionsraten pr_{eff} , die nicht abhängig von der elektroneninduzierten IPP sind, sind also genauer. Damit wird die Vermutung bestätigt, dass die gemessenen Elektronenflüsse, die AIMOS verwendet, zu hoch sind. Dennoch scheinen auch nicht-lineare Abhängigkeiten bei der NO_x -Produktion eine Rolle zu spielen, was die hohen χ^2 -Werte vor allem überhalb 50 km zeigen.

6.2.1. Vergleich mit anderen Studien

Die HEPPA I Vergleichsstudie testete die Auswirkungen der AIMOS-IPP auf neun verschiedene Atmosphärenmodelle für den SPE im Oktober und November 2003 (Funke et al., 2011). Alle Modelle wiesen nach dem SPE in den nördlichen polaren Breiten zwischen 45 km und 55 km Höhe mehr NO_y auf als von MIPAS gemessen wurde. Nach Angaben der Autoren könnten zum einen zu hohe Ionisationsraten von AIMOS in diesen Höhen dafür verantwortlich sein. Zum anderen tendieren Modelle mit einem NO_x -Familienansatz dazu, die effektive NO_x -Produktion zu überschätzen.

Viele Modelle haben auch Probleme mit horizontalen Transport- und Mischungsprozessen. Damit haben sie eine zu den Messungen abweichende dynamische Lebensdauer τ_{dyn} und die NO_x -Reduktion kann nicht korrekt simuliert werden, was in Kapitel 6.1 beschrieben wurde.

Die effektive NO_x -Produktion hängt wie schon besprochen stark von der Temperatur ab, aber auch von der NO_x -Teilchenzahldichte selbst. Dies wurde in Funke et al. (2011) mit Hilfe eines Boxmodells gezeigt, welches auch im Folgenden verwendet wird. Das Modell berücksichtigt die Temperatur und die Reaktionen 3.10, 3.11, 3.12, 3.13, 3.14, 3.17, 3.20, 3.22, 3.23, 3.27 und 3.28. Dies sind für ein Boxmodell die wichtigsten (photo-)chemischen Reaktionen mit O_x - und NO_y -Spezies als Reaktanten. Zusätzlich dazu liest das Modell noch die AIMOS-IPP ein. Transport wird nicht berücksichtigt. Dies ist aber für einen Vergleich mit den empirisch bestimmten pr_{eff} nicht von Bedeutung, da im Term $I(\text{IPP}, \tau, t_0)$, welcher von τ abhängt, sämtliche Verlustprozesse einbezogen sind.

Funke et al. (2011) untersuchten die Auswirkungen auf die Nordhemisphäre. Da dort andere Bedingungen herrschten, werden für folgende Berechnung im Boxmodell neue Initialisierungswerte für die Südhemisphäre verwendet: Temperatur, NO , NO_2 und O_3 , was alles von MIPAS/ENVISAT gemessen wurde. Die IPP stellt AIMOS zur Verfügung, Photolyseraten K3dCTM. In Bild 6.6 (links) ist die vom Boxmodell berechnete effekti-

ve NO_x -Produktionsrate pr_{box} als schwarze Kurve dargestellt. Die roten Kurven geben einen abgeschätzten Fehlerbereich an, der durch Änderungen in den Initialisierungswerten bestimmt wurde (Temperatur: ± 10 K und NO , NO_2 , O_3 : ± 10 %). Die Größe der Fehler wird dabei im Wesentlichen von der Temperatur bestimmt. Die Form der Kurve lässt sich mit der starken Temperaturabhängigkeit von Reaktion 3.11 erklären, welche weniger effektiv in kälteren Regionen ist. In der Mesosphäre ist der Temperaturgradient negativ, was oberhalb 50 km deutlich sichtbar ist. Deshalb lässt sich in dieser Kurve auch die Stratopause zwischen 40 km und 50 km erahnen.

Zwischen 44 km und 56 km Höhe ist pr_{eff} (grüne Quadrate: $\text{IPP}(\text{p}^+ + \text{e}^- + \alpha)$) deutlich kleiner als pr_{box} . Bei 44 km ist pr_{box} ca. 7,5 mal größer, bei 56 km noch ca. 1,5 mal. Darüber überlappen die Fehlerbereiche der modellierten und gemessenen effektiven NO_x -Produktionsraten. Ein Vergleich mit der HEPPA-Studie zeigt, dass qualitativ die Unterschiede übereinstimmen; bei HEPPA sind diese jedoch viel kleiner. Mögliche Ursachen dafür könnten folgende sein: i) Wie die blauen Quadrate ($\text{IPP}(\text{p}^+ + \alpha)$) zeigen, können die Unterschiede nicht ausschließlich durch zu große Elektron-Ionisationsraten erklärt werden. Sie erklären nur zwischen 5 % und 25 % der Unterschiede. ii) Systematische Fehler im NO_x -Retrieval gehen bis zu 15 %. iii) Änderungen in der Lebenszeit τ um -33 % führen zu einer um ca. 30 % höheren effektive NO_x -Produktionsrate. Die genannten Fehlerquellen können nur die Unterschiede von 52 km an aufwärts erklären. Um die Unterschiede darunter zu erklären, ist entweder eine Änderung der von Protonen verursachten IPP notwendig, eine Änderung in der NO_x -Produktionsrate oder im $\text{N}^{(2\text{D})}$ - $\text{N}^{(4\text{S})}$ -Verzweigungsverhältnis der NO_x -Produktion.

Baumgaertner et al. (2010) untersuchten die Auswirkungen des von GOES gemessenen Protonenflusses auf die mittlere Erdatmosphäre während des SPEs. In dieser Studie wurden Ergebnisse des EMAC-Modells mit MIPAS-Messungen verglichen. In einem ersten Modellauf wurde für die NO_x -Produktion das von Porter et al. (1976) gefundene, höhenunabhängige Verzweigungsverhältnis von 0.55 $\text{N}^{(4\text{S})}$ und 0.7 $\text{N}^{(2\text{D})}$ benutzt. Die resultierende NO_2 -Erhöhung ist bei EMAC größer (60 ppbv) als in den MIPAS-Messungen (50 ppbv). Die Unterschiede können aber durch systematische Fehler und dynamische Effekte erklärt werden. Jedoch zeigt die Studie gravierende Unterschiede in der N_2O -Häufigkeit. In der EMAC-Simulation ist diese siebenmal höher als in den Messungen. Aus diesem Grund wurden Testläufe durchgeführt, in denen die $\text{N}^{(4\text{S})}$ -Produktion und die $\text{N}^{(2\text{D})}$ -Produktion höhenabhängig jeweils von 0 bis 1,2 pro Ionenpaar variieren. Das Paar an $\text{N}^{(4\text{S})}$ / $\text{N}^{(2\text{D})}$ -Produktionsraten, das zur besten Übereinstimmung der N_2O -Ergebnisse führt, ist höhenabhängig in Bild 6.7 dargestellt. Dabei sind in Kreisen die $\text{N}^{(4\text{S})}$ -Produktionsraten und in Quadraten die $\text{N}^{(2\text{D})}$ -Produktionsraten dargestellt. Dieses Paar an Produktionsraten wird zum Vergleich mit dieser Arbeit im zuvor beschriebenen Boxmodell verwendet, um effektive NO_x -Produktionsraten pr_{B10} zu berechnen. pr_{B10} ist in Bild 6.6 höhenabhängig als violette gestrichelte Linie dargestellt. Unterschiede zwischen pr_{B10} und pr_{box} sind allein auf die unterschiedlichen $\text{N}^{(4\text{S})}$ - und $\text{N}^{(2\text{D})}$ -Produktionsraten zurückzuführen, da nur diese Werte geändert wurden. So ist pr_{B10} unterhalb 47 km und oberhalb 53 km Höhe kleiner als pr_{box} , weil in diesen Höhen die Produktionsraten kleiner als die von Porter et al. (1976) angegebenen sind. Wie pr_{box} zeigt auch pr_{B10} keine Übereinstimmung mit den gemessenen effektiven Produkti-

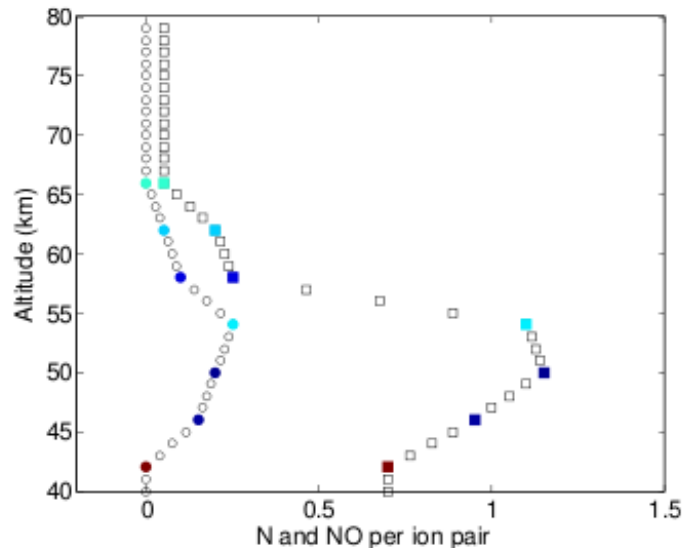


Bild 6.7.: Höhenabhängige $N(^4S)$ - und $N(^2D)$ -Produktionsraten (Kreise und Quadrate). Dieses Bild wurde aus Baumgaertner et al. (2010) entnommen (Fig.9).

Produktionsraten pr_{eff} . pr_{B10} ist von 44 km bis 54 km Höhe 2-5 mal größer, oberhalb 60 km dann um einen Faktor 0,3-0,4 kleiner. Bei 56 km und 58 km Höhe nähern sie sich bei 0,5-1,0 NO_x/IPP an. Der komplett unterschiedliche Verlauf der Kurven kann verschiedene Ursachen haben.

Zuerst versuchten Baumgaertner et al. (2010) die N_2O -Häufigkeit anzupassen. Dies führt zu vergleichsweise kleinen NO_x -Produktionsraten oberhalb 58 km Höhe und darunter zu NO_x -Produktionsraten, die größer als 0,6 pro Ionenpaar sind. Die Berechnung von pr_{eff} basiert aber auf Messungen der NO_x -Häufigkeit, also einem anderen Spurengas. Dies führt zu unterschiedlichen Werten. Darüber hinaus betrachteten die Autoren die Auswirkungen auf die Nordhemisphäre, wohingegen in dieser Arbeit die Auswirkungen auf die südliche Polarkappe betrachtet wird. Unterschiedliche Bedingungen (Temperatur, Häufigkeit von Gasen, Dynamik) können zu erheblichen Diskrepanzen führen. Bei konstanter NO_x -Produktionsrate nimmt die effektive NO_x -Produktionsrate mit der Temperatur ab. Unterschiede in der Temperatur, die zwischen den Hemisphären bei konstanter Höhe bei einigen 10 K liegen können, führen also zu Veränderungen von einigen 10 %, was die Fehlerberechnung von pr_{box} zeigt. Doch auch hier gilt, dass zur Erklärung der großen Unterschiede zwischen 44 km und 54 km Höhe noch andere Fehlerquellen zugezogen werden müssen: Fehler in der IPP, in der NO_x -Produktionsrate oder im $N(^2D)/N(^4S)$ -Verzweigungsverhältnis der NO_x -Produktion.

6.3. Diskussion

In diesem Kapitel wurden mit Hilfe von MIPAS-Messungen höhenabhängige NO_x -Lebensdauern und höhenabhängige effektive NO_x -Produktionsraten für die südliche Po-

larkappe zwischen 44 km und 62/64 km Höhe im Oktober-November 2003 bestimmt. Diese können zum Vergleich mit Chemietransportmodellen dienen. Es zeigt sich, dass die NO_x -Lebensdauern maßgeblich von dynamischen Effekten und weniger von photochemischen Prozessen abhängen. Zur Modellierung sind daher dreidimensionale Modelle notwendig, die die horizontale Transport- und Mischprozesse möglichst genau wiedergeben können. Durch die Bestimmung der Lebensdauer von NO_x ist es möglich, die effektive NO_x -Produktionsrate zu bestimmen. Mit dieser neuen Methode, die als zusätzlichen Input noch die IPP benötigt, lassen sich die bisher nur theoretisch ermittelten NO_x -Produktionsraten überprüfen.

Große Unsicherheiten in der IPP beeinflussen allerdings die Bestimmung der effektiven Produktionsraten pr_{eff} . Der Vergleich mit den, durch ein Boxmodell ermittelten, effektiven NO_x -Produktionsraten zeigt, dass pr_{eff} beinahe im gesamten Höhenbereich wahrscheinlich aufgrund dieser Unsicherheiten unterschätzt wird. Es wurde aber auch gezeigt, dass Fehler in den von Elektronen verursachten IPP zwischen 44 km und 52 km nicht die einzige Fehlerquelle sein können. Denn wird diese IPP in der Rechnung weggelassen, verändert sich der Unterschied nur um ca. 5–15 %. Fehler durch dynamische Effekte konnten durch die Berücksichtigung der Lebensdauer klein gehalten werden und können damit ausgeschlossen werden. Weitere Fehler in den Ionisationsraten, Fehler in den NO_x -Produktionsraten oder im $\text{N}(^4\text{S})/\text{N}(^2\text{D})$ -Verzweigungsverhältnis können eine Erklärung sein.

7. EEP 2007-2011

Dieses Kapitel beschreibt die Analyse von MIPAS NO_y -Daten im Hinblick auf Änderungen von geomagnetischen Indizes (Ap und Dst), von POES gemessenen Protonen- und Elektronenflüssen und von solarem UV-Strahlungsfluss. Ziel ist es, von den genannten Größen abhängige NO_y -Produktionsraten zu bestimmen. Mit Hilfe des einfachen statistischen Verfahrens der „Superposed Epoch Analysis“ (SEA) wird nach Korrelationen gesucht. Mit dem Pearson Korrelationskoeffizient r wird nach linearen Abhängigkeiten gesucht, mit der Quadrantenkorrelation nach nicht-linearen, monotonen Abhängigkeiten. Auf die Verfahren wird an entsprechender Stelle jeweils eingegangen.

Die Daten werden erst ab 2007 analysiert, da während der MIPAS/ENVISAT Mission in den Jahren 2002 und 2003 (solares Maximum) einige starke SPEs auftraten, die durch ihre Auswirkungen auf NO_y der mittleren Atmosphäre die folgende Analyse unmöglich machen. Zwischen 2004 und 2006 gab es dann große Messlücken (Tabelle 5.2). Erst von 2007 an gab es wieder regelmäßige, fast tägliche Messungen im nominellen Modus, welche für Bestimmungen von kleinen kurzlebigen Variationen essentiell sind. In Bild 7.1 sind in schwarz verschiedene Zeitreihen vom 1. Januar 2007 bis 31. Dezember 2011 aufgetragen: Der Dst Index, der Ap Index, der Belt Index des Protonenkanals ($E(p^+) > 6.9 \text{ MeV}$) und des Elektronenkanals ($E(e^-) > 300 \text{ keV}$), der solare Lyman α -Fluss sowie Tagesmittel des NO_2 -VMR bei Nacht zwischen 60°N und 70°N geomagnetischer Breite und in 50 km Höhe. Beim Blick auf den Trend über mehrere Jahre sieht man, dass die Sonnenaktivität im Jahre 2010 wieder zunimmt. Betrachtet man in den Zeitreihen Variationen innerhalb weniger Tage, sieht man, dass negative Ausschläge des Dst Index häufig mit positiven Peaks des Ap Index verknüpft sind. Dies ist nicht erstaunlich, da beide Indizes aus gemessenen Änderungen des Erdmagnetfelds berechnet werden (Kapitel 2.3). Weiterhin sieht man, dass die jährlichen Veränderungen von NO_y weder mit den geomagnetischen Indizes noch mit den Elektronen- und Protonenflussmessungen zu tun haben. In diesem Zeitraum gab es auch keine großen SPEs. Die Veränderungen hängen mit dem Abwärtstransport thermosphärischer Luft und mit der Photolyse von NO_y -Spezies zusammen, was in Bild 3.4 deutlich zu sehen ist und in der Diskussion dazu erklärt wurde.

Um nun die kleinskaligen Variationen $\Delta\text{VMR}(\text{NO}_2)$ der gemessenen Tagesmittel $\text{VMR}(\text{NO}_2)$ zu bestimmen, wird ein gleitender 27-Tage-Mittelwert $\overline{\text{VMR}}_{27\text{d}}(\text{NO}_2)$ bestimmt, der einen Rechteckfilter darstellt und als Hochpassfilter dient. Er ist in Bild 7.1 als rote Kurve dargestellt. Im Folgenden wird aus Gründen der Übersicht das „VMR“ weggelassen und nur noch ΔNO_2 , NO_2 und $\overline{\text{NO}_2}$ geschrieben und aus Gründen der

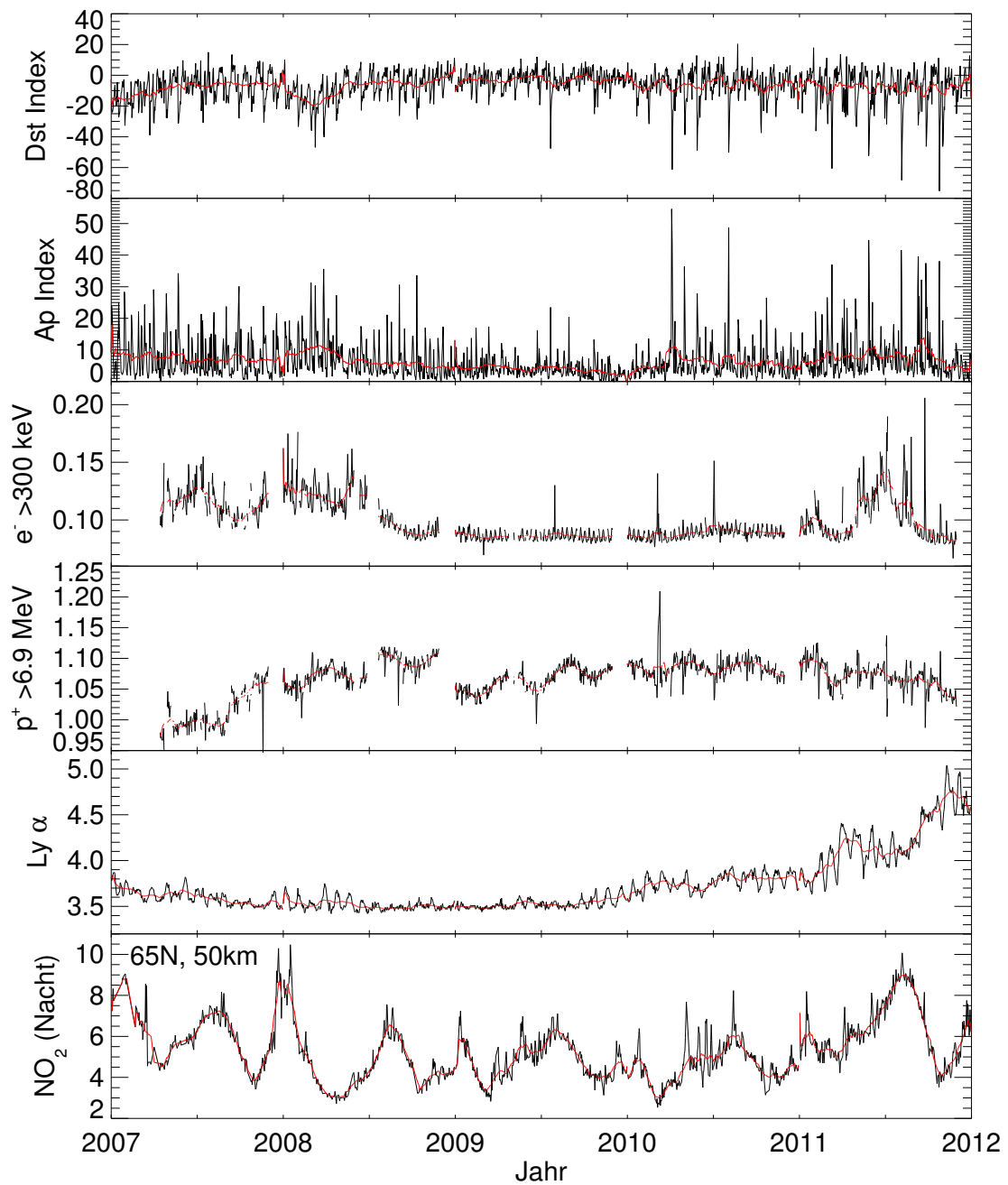


Bild 7.1.: Dst Index, Ap Index, Belt Index der Protonen- ($>6.9 \text{ MeV}$) und Elektronenkanäle ($>300 \text{ keV}$), jeweils für den 90° -Detektor, solarer Lyman α -Fluss in Photonen/ cm^2/s und NO_2 -VMR in ppb bei Nacht, gemessen von MIPAS/ENVISAT von 2007-2011. In rot ist jeweils der gleitende 27-Tage-Mittelwert dargestellt.

Allgemeinheit NO_y statt NO_2 . Es gilt also:

$$\text{NO}_y = \overline{\text{NO}_y} + \Delta\text{NO}_y \quad (7.1)$$

$$\Delta\text{NO}_y = \text{NO}_y - \overline{\text{NO}_y}. \quad (7.2)$$

In $\overline{\text{NO}_y}$ steckt die Information aus allen länger anhaltenden Veränderungen. Variationen in den geomagnetischen Indizes, Lyman α oder in den Elektronen- und Protonenflüssen, die länger als ~ 1 Tag andauern, konkurrieren aber mit schneller Photochemie und Transport, sodass in ΔNO_y nur Information von kleinskaligen Veränderungen enthalten sein kann. Für die geomagnetischen Indizes, Lyman α und für Elektronen- und Protonenflüsse X wird also ebenfalls ein 27-Tage-Mittelwert \overline{X} berechnet, damit die kleinskaligen Variationen ΔX bestimmt werden können. \overline{X} ist in Bild 7.1 jeweils als rote Kurve dargestellt. Es gilt gleichermaßen:

$$X = \overline{X} + \Delta X \quad (7.3)$$

$$\Delta X = X - \overline{X}. \quad (7.4)$$

Bild 7.2 zeigt in allen vier Bildern ein modelliertes Signal X_{mod} in schwarz, welches in beliebigen Einheiten alle 27 Tage einen Puls um 1 erfährt und auf den Wert 1 wieder abfällt mit einer Lebenszeit $\tau = 2$ Tage (oben) und $\tau = 10$ Tage (unten). In rot ist der gleitende Mittelwert $\overline{X}_{\text{mod}}$ des Signals dargestellt. Links wird er über einen Zeitraum von ± 12 , also 25 Tage bestimmt, rechts über ± 14 , also 29 Tage. In blau ist die Variation des Signals ΔX_{mod} dargestellt, welche nach Gleichung 7.4 berechnet wird und in den kommenden Kapiteln die tragende Rolle spielt. Die Variation ΔX_{mod} gibt nicht die Absolutwerte des Signals X_{mod} wieder. Sie verläuft um den Wert 0, wobei die Differenz $\max(\text{Signalstärke}) - \min(\text{Signalstärke})$ so gut wie erhalten bleibt. Ist das Zeitintervall von $\overline{X}_{\text{mod}}$ kleiner als die Anregungsperiode, treten zusätzlich lokale Maxima in ΔX_{mod} auf (Bild 7.2 links). Ist es größer, können lokale Minima auftreten (Bild 7.2 rechts). Dies sind Effekte eines Rechteckfilters, die aber durch die Wahl eines 27-Tage-Mittels ausreichend minimiert werden, sodass im Folgenden keine anderen Filter benötigt werden.

Um Ähnlichkeiten in Variationen von $q = (\Delta\text{NO}_2, \Delta\text{Ap}, \Delta\text{Dst}, \Delta\text{Ly}\alpha, \Delta e^-, \Delta p^+)$ sichtbar zu machen, verwenden wir die SEA Methode (Chree, 1913), auch bekannt als Compositing (von Storch und Zwiers, 2001). In den nächsten Unterkapiteln werden verschiedene Epochen definiert. Jede Epoche ist als Zeitintervall von ± 30 Tage um einen definierten Tag d festgelegt. Für die Definition von d gelten folgende zwei Kriterien: Zum einen muss es am Tag d eine MIPAS/ENVISAT-Messung geben. Zum anderen gelten je nach Unterkapitel unterschiedliche Kriterien in Bezug auf ΔX . Zum Beispiel kann für Tag d gelten: $\Delta\text{Ap}(d) > 5,0$. Das zweite Kriterium ist so festgelegt, dass man bei einem möglichst hohen ΔX -Wert eine ausreichend große Anzahl N an Epochen hat. Die N Epochen, welche jeweils 61 Tage lang sind, werden phasengleich zu einer „durchschnittlichen“ Epoche mit 61 Tagen gemittelt. Da die Tagesmittel-Zeitreihe des nominellen Modus von MIPAS/ENVISAT Lücken hat (vgl. Tabelle 5.2) wie auch die Zeitserien des Belt Index, wird bei N Epochen nicht immer über N Werte gemittelt, sondern über

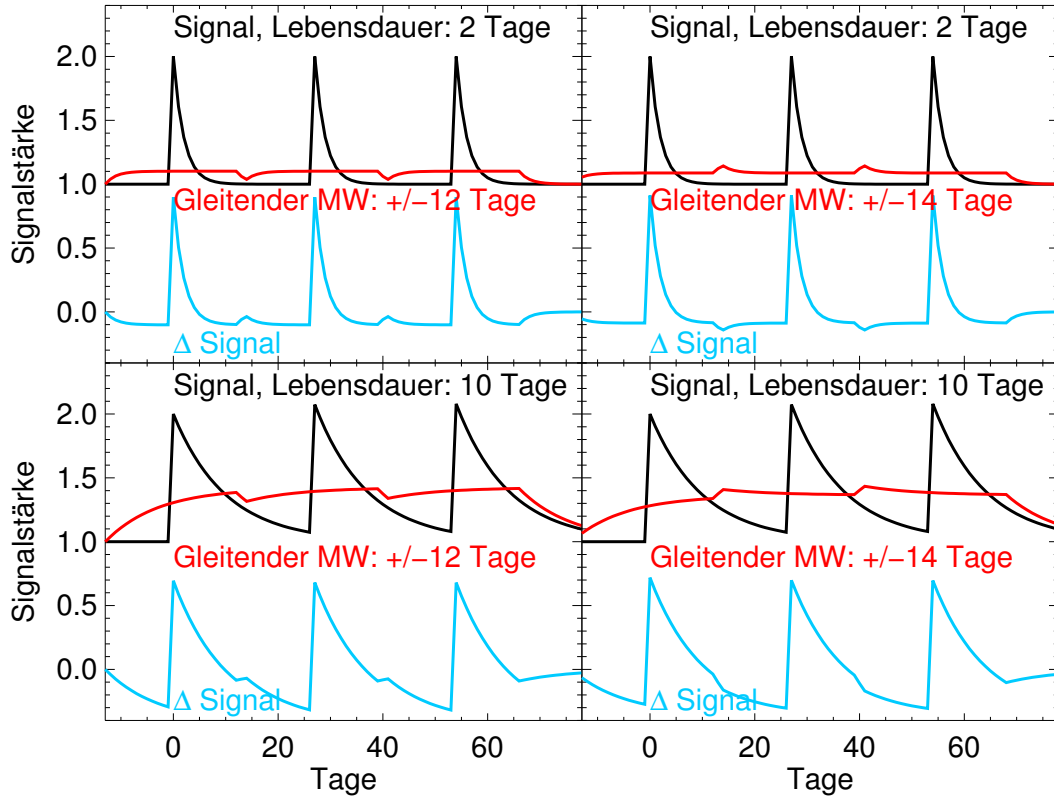


Bild 7.2.: Modelliertes Signal X_{mod} , Gleitender Mittelwert $\overline{X_{\text{mod}}}$ und die Variation des modellierten Signals ΔX_{mod} . Werte und Einheit der Signalstärke sind beliebig gewählt. In den vier verschiedenen Bildern sind verschieden lange Zeiträume der Mittelwerte (25 und 29 Tage) und verschiedene Lebensdauern einer Signalanregung (2 und 10 Tage) dargestellt.

$M \leq N$ Werte. Die gemittelte Epoche wird also folgendermaßen berechnet:

$$\bar{q}_i = \frac{\sum_{j=1}^{M_i} q_{i,j}}{M_i}, i = [1, 61]. \quad (7.5)$$

Mit der SEA werden im Folgenden die VMRs von NO (Kapitel 7.1), NO₂ bei Nacht (Kapitel 7.2), NO₂ am Tag und N₂O₅ (Kapitel 7.4) analysiert.

7.1. NO

In diesem Abschnitt wird gezeigt, dass die Suche nach kleinen, durch geomagnetische Änderungen verursachte Variationen in der Mesosphäre mit Hilfe der NO-Daten des nominellen Modus von MIPAS/ENVISAT nicht möglich ist. Die Geometrie der Limbmessung hat zur Folge, dass Variationen der NO-Häufigkeit in der Thermosphäre einen

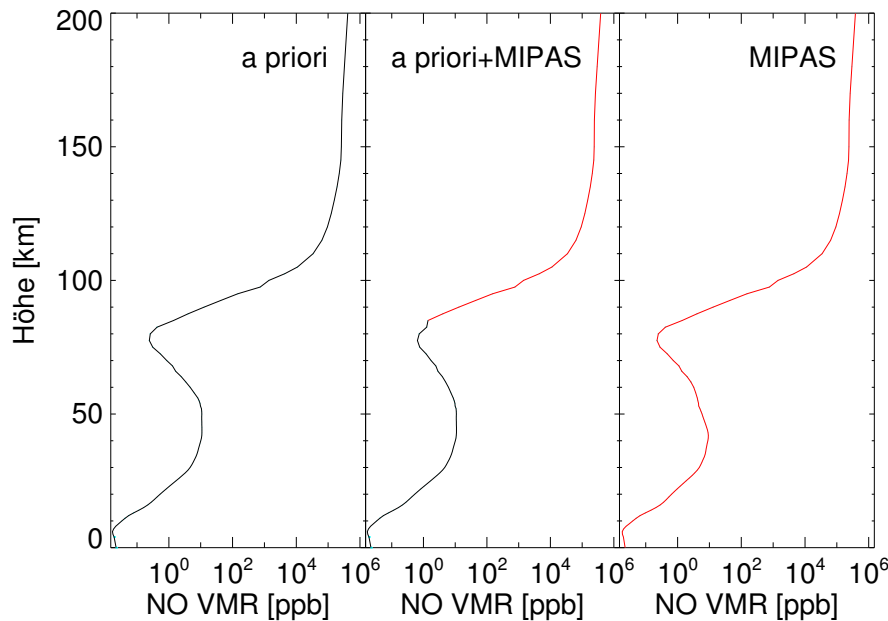


Bild 7.3.: NO Höhenprofile vom 1.-10. Juli in geomagnetischen Breiten von 53-63° N. Links das a priori Profil, rechts das vom Retrieval ermittelte, in der Mitte ein kombiniertes.

größeren Einfluss auf die Messungen in der mittleren Atmosphäre haben als die gemessene Variation. Aus diesem Grund wird auch nicht die komplette Zeitreihe analysiert, sondern das Jahr 2008 als Beispiel aufgeführt. Verwendet werden die Daten der Version V40_NO_200. Es werden nur Tagesmessungen von NO verwendet, das heißt es gilt: $SZA < 89^\circ$. In den Gleichungen 7.1, 7.2 und 7.5 wird $NO(\text{Tag})$ anstelle von NO_y und q eingesetzt.

Für diese Studie erstellte Bernd Funke vom IAA drei Datensätze für das Jahr 2008 mit jeweils unterschiedlichen Höhenprofilen. In Bild 7.3 sind diese gemittelt vom 1.-10. Juli in geomagnetischen Breiten von 53-63° N dargestellt. Zum einen ein Datensatz, der aus dem reinen a priori Höhenprofil besteht, im Bild links dargestellt. Zum anderen der „normale“ Datensatz, der das Ergebnis des Retrievals ist, also das Level 2-Produkt, im Bild rechts dargestellt und als „MIPAS“ bezeichnet. Als letztes ein Datensatz, bei dem das Höhenprofil von 0-85 km aus dem a priori Profil besteht, von 85-200 km aber aus dem Level 2-Produkt, im Bild in der Mitte dargestellt. Bei diesem Datensatz werden zur Analyse der Daten die im Retrieval ausgewerteten Averaging Kernel angewendet. Bei dem gemischten Profil gilt es zu daher beachten, dass Information vom MIPAS-Profil auf das a priori Profil gefaltet werden kann.

In Bild 7.4 ist die SEA für alle drei verschiedenen Datensätze und für ΔAp gezeigt, wobei das Kriterium hier mit $\Delta Ap > 3,5$ angesetzt wurde. Der Zeitraum der Analyse ist vom 5. April bis zum 15. Oktober beschränkt, um einen Einfluss durch das Herabsinken thermosphärischer Luft zu vermeiden. Es wurde insgesamt über 24 Epochen gemittelt.

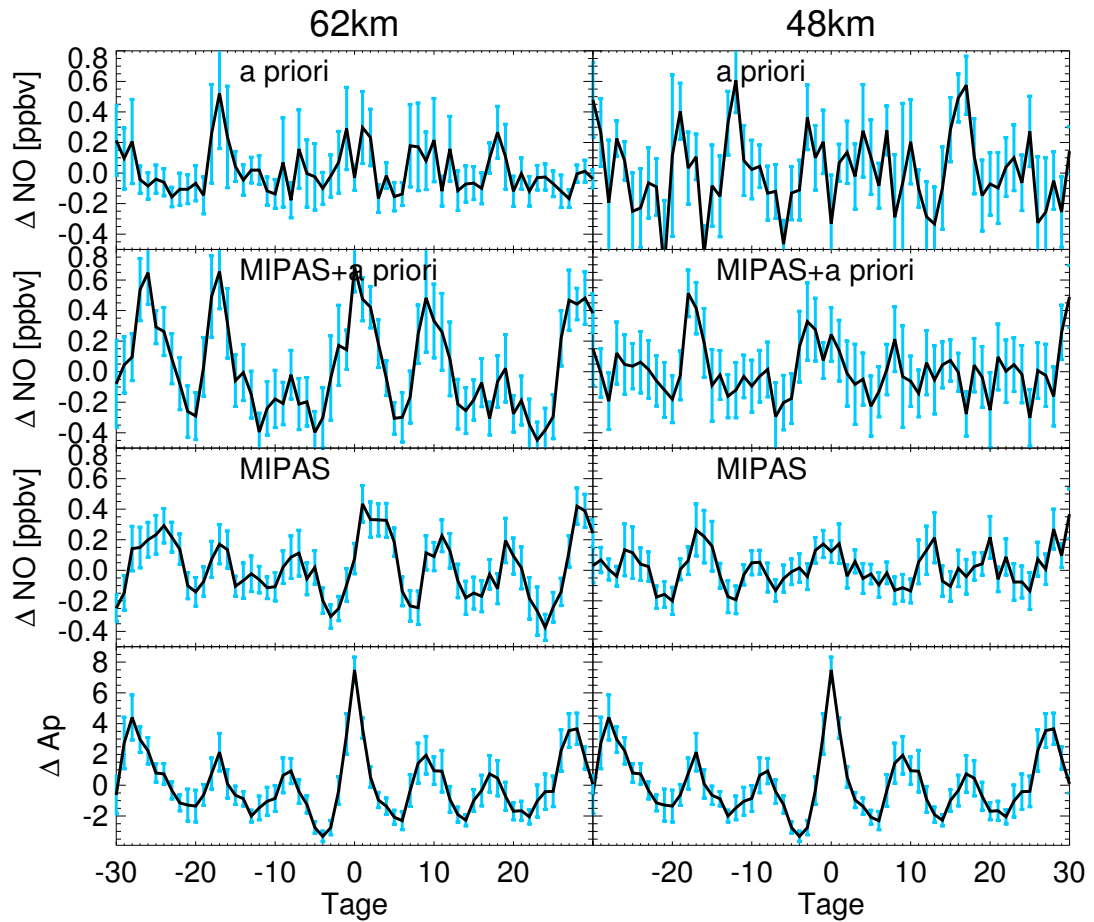


Bild 7.4.: SEA von ΔNO (a priori, kombinierte und ausgewertete Daten) und ΔAp . Links ist die analysierte Höhe 62 km, rechts 48 km. Es wurde über alle geomagnetische Breiten zwischen 53°N und 63°N gemittelt. Die Fehlerbalken stellen den $1\text{-}\sigma$ Fehler des Mittelwerts dar.

Die blauen Fehlerbalken stellen den $1\text{-}\sigma$ Fehler des Mittelwerts dar. Die gemittelte Epoche von ΔA_p ist in der untersten Zeile gezeigt. Rechts und links sind identische Grafiken und dienen dem Vergleich mit den oberen, in denen die Auswertung der gemittelten ΔNO -Epochen in 62 km Höhe (links) und 48 km (rechts) gezeigt wird. Das geomagnetische zonale Mittel beträgt $53\text{-}63^\circ$ N. An Tag 0 zeigt sich bei ΔA_p ein Peak, welchen man aufgrund des aufgestellten Kriteriums erwartet. Weiterhin sieht man den 27-Tage-Zyklus mit ausgeprägten Peaks und jeweils zwei Nebenmaxima um die Tage ± 9 und ± 17 also $1/3$ und annähernd $2/3$ von 27 Tagen. Im Sommer 2008 gab es drei annähernd symmetrisch positionierte koronale Löcher, die jeweils einmal pro Umdrehung Richtung Erde ausgerichtet waren. Dies spiegelt sich in der 9-Tages Periodizität des Ap Index wieder. In der obersten Zeile wird die gemittelte Epoche der a priori Daten dargestellt. Hier zeigt sich bei 62 km eine äußerst schwache Korrelation mit ΔA_p , bei 48 km gibt es gar keine Korrelation. Die Fehler sind so groß, dass die meisten Werte keine signifikanten Abweichungen von 0 ppb darstellen. In der zweiten Zeile ist die SEA des kombinierten Datensatzes dargestellt. Hier zeigen sich bei 62 km Höhe ausgeprägte Maxima um die Tage -27, -18, 0, 9 und 27. Maxima und Minima korrelieren mit der SEA von ΔA_p . Bei 48 km ist die Korrelation nicht mehr ganz so deutlich, lässt sich aber noch erkennen. Das auf diese Weise bestimmte Signal kann, wenn überhaupt, nur zu kleinen Teilen vom a priori Datensatz stammen, wie man in der ersten Zeile sehen kann. Deshalb muss diese Information von den ausgewerteten Höhen über 85 km hinunter gefaltet worden sein. Die Fehlerbalken zeigen, dass dieses Signal zumindest bei 62 km Höhe signifikant ist. In der dritten Zeile sieht man die SEA des Level 2 Datensatzes. Bei 62 km Höhe sieht man eine sehr gute Korrelation zu ΔA_p . Doch betrachtet man die Amplituden, sieht man, dass das aus der Thermosphäre gefaltete Signal in der zweiten Zeile größer ist als das Signal aus dem Level 2 Datensatz. Dasselbe gilt für 48 km Höhe. Dies führt zu der Erkenntnis, dass man die NO-Daten in der Mesosphäre nicht auf Auswirkungen untersuchen kann, die durch geomagnetische Variationen verursacht werden. Die thermosphärische Reaktion des NO-Signals auf geomagnetische Variationen ist zu stark und kann im mesosphärischen Signal nicht unterdrückt werden.

7.2. NO_2 (Nacht)

In der unteren Thermosphäre liegt der überwiegende Anteil von NO_x sowohl bei Tag als auch bei Nacht in Form von NO vor. Das bedeutet, bei Anwendung der ausgewerteten Averaging Kernel Matrizen von NO_2 kann kein thermosphärisches NO_2 -Signal in die Mesosphäre gefaltet werden. Damit besteht das im vorangegangenen Kapitel diskutierte Problem bei der Analyse von NO_2 nicht.

Verwendet werden die Versionen V5R_NO2_220 und V5R_NO2_221. Tagesmittel der NO_2 -VMR werden nur berücksichtigt, wenn auch das Tagesmittel des Diagonalelements der Averaging Kernel Matrizen größer als 0,03 ist. Da NO_2 in der mittleren Atmosphäre vor allem bei Dunkelheit vorliegt, werden für das Tagesmittel nur Messungen berücksichtigt, an denen der SZA $> 96^\circ$ ist. Es wird also nur NO_2 (Nacht) analysiert. Dies begrenzt die Analyse hin zu hohen Breiten in der Sommerhemisphäre, da das Kri-

Tabelle 7.1.: Zeiträume, in denen MIPAS NO_y-VMRs in der Analyse verwendet werden.

Jahr	Zeiträume
2007	21. März – 28. Oktober
2008	5. April – 5. Oktober
2009	28. April – 7. Oktober
2010	20. März – 12. Oktober
2011	24. Februar – 5. Oktober

terium für den SZA am Polartag nicht erfüllt ist. In den Gleichungen 7.1, 7.2 und 7.5 wird NO₂(Nacht) anstelle von NO_y und q eingesetzt. Es werden nur Tagesmittel analysiert, an denen kein polarer Vortex in der Nordhemisphäre ausgebildet ist. Diese Zeiträume wurden in den NO₂-Zeitreihen mit dem Auge bestimmt und sind in Tabelle 7.1 dargestellt.

Im Folgenden wird die Δ NO₂(Nacht)-Zeitreihe mittels der SEA mit den Variationen des Ap Index (Kapitel 7.2.1), des Dst Index (Kapitel 7.2.2), des Elektronenflusses (Kapitel 7.2.3), des Protonenflusses (Kapitel 7.2.4) und des solaren Lyman α -Strahlungsflusses (Kapitel 7.2.5) korreliert. Die Ergebnisse werden zuerst nur beschrieben und abschließend in Kapitel 7.2.6 diskutiert.

7.2.1. Ap Index

In Bild 7.5 sind die gemittelten Epochen von Δ Ap Index und von Δ NO₂(Nacht) bei 60-70°N geomagnetischer Breite dargestellt. Es wurde über die 100 stärksten Δ Ap-Ereignisse gemittelt. Das bedeutet, dass Δ Ap > 3,6 das Kriterium für die SEA ist. Die blauen Fehlerbalken stellen den 1- σ Fehler des Mittelwerts dar. Der Ap Index, der im untersten Bild dargestellt ist, hat wie auch in Kapitel 7.1 Maxima an den Tagen -27, 0 und 27. Die Nebenmaxima, die in Kapitel 7.1 noch vorhanden waren, verschwinden jedoch fast komplett. Das liegt daran, dass über annähernd vier mal so viele Epochen in einem annähernd fünf mal so langen Zeitraum gemittelt wurde. Die Konstellation der koronalen Löchern hat sich in dieser Zeit viel mehr verändert als nur innerhalb der wenigen Monate im Jahr 2008.

Bei 44 km Höhe kann man noch keine Korrelation erkennen, zwischen 46 km und 52 km dagegen schon. Bei 46 km Höhe bildet sich an Tag 1 ein Peak aus. Ab 48 km bis 52 km Höhe lässt sich ein 27 Tage Zyklus erkennen, allerdings mit annähernd gleich großen Nebenmaxima. Der höhenabhängige Verlauf des Wertes an Tag 1 ist in Bild 7.6 dargestellt. Die roten Fehlerbalken geben den 1- σ Fehler des Mittelwerts an. Das Maximum ist in 48 km Höhe mit 0,22 ppb erreicht. Der Wert nimmt von dieser Höhe an mit der Höhe ab, wird jedoch nie negativ.

In Bild 7.7 ist der Korrelationskoeffizient r der gemittelten Zeitreihen von Δ Ap und Δ NO₂ dargestellt. r ist definiert durch

$$r_{x,y} = \frac{\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})(y_i - \bar{y})}{\sqrt{\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2 \cdot \sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y})^2}}, \quad (7.6)$$

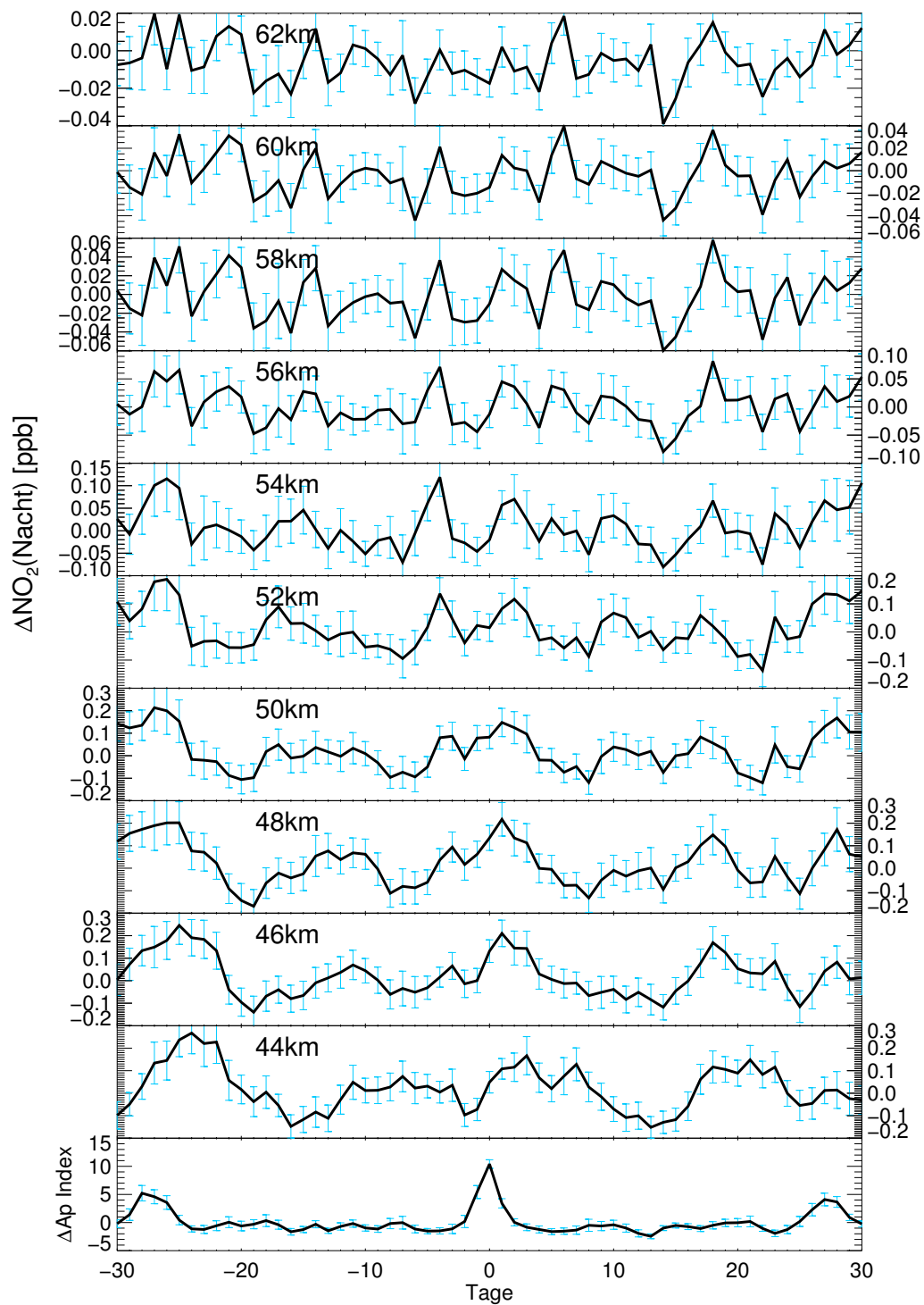


Bild 7.5.: SEA von ΔAp Index und von $\Delta\text{NO}_2(\text{Nacht})$ bei $65\pm 5^\circ\text{N}$ geomagnetischer Breite von 44-62 km Höhe in 2 km Schritten. Die blauen Fehlerbalken geben den $1-\sigma$ Fehler des Mittelwertes an.

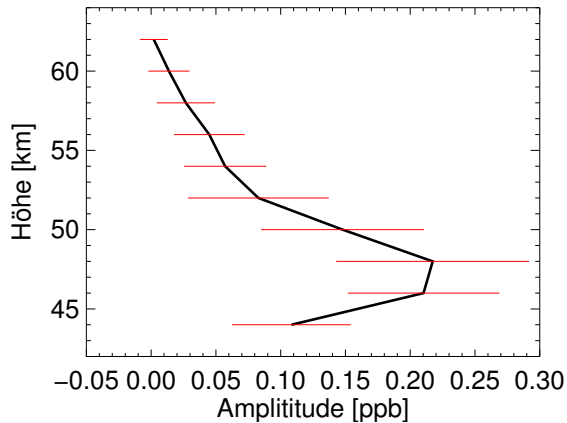


Bild 7.6.: Der Wert oder die Amplitude an Tag 1 der SEA, welche in Bild 7.5 gezeigt ist. Die roten Fehlerbalken geben den $1\text{-}\sigma$ Fehler des Mittelwertes an.

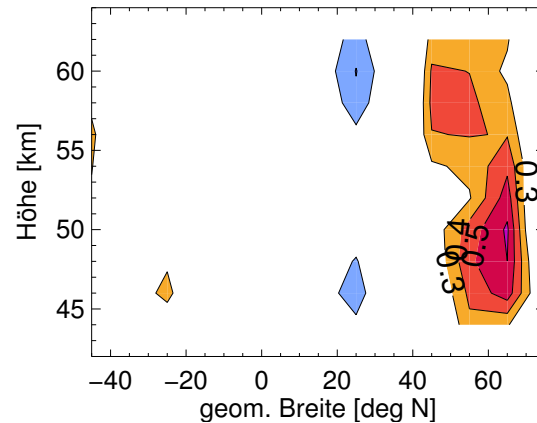


Bild 7.7.: Höhen- und breitenabhängiger Korrelationskoeffizient r zwischen ΔA_p und ΔNO_2 . In Blautönen ist eine leichte Antikorrelation ab $r < -0,3$ dargestellt, in den Orange- und Rottönen eine Korrelation ab $r > 0,3$.

wobei x und y beliebige Zeitreihen sein können, in diesem Fall ΔA_p und ΔNO_2 . \bar{x} und \bar{y} stehen für den entsprechenden Mittelwert. r nimmt Werte zwischen -1 und 1 an. $r = 0$ besagt, dass keine lineare Korrelation vorliegt, bei $r = -1$ liegt eine ideale lineare Antikorrelation der Werte vor, bei $r = 1$ eine ideale lineare Korrelation. Korreliert werden die Werte mit einem Tag Versatz, das bedeutet z.B., dass Tag 0 bei ΔA_p mit Tag 1 bei ΔNO_2 verglichen wird. Von $45^\circ S$ bis $45^\circ N$ geomagnetischer Breite liegt keine Korrelation vor. Die wenigen Werte mit $r = \pm 0,3$ kann man vernachlässigen, da es sich um kleinste Korrelationen handelt, die lokal voneinander getrennt sind und damit nur statistisch verteilt sind. In hohen nördlichen geomagnetischen Breiten dagegen wird r größer und nimmt sein Maximum bei 50 km Höhe bei $65 \pm 5^\circ N$ mit $r > 0,6$ an. Diese geomagnetische Breite entspricht den Breiten, in denen der äußere Strahlungsgürtel in die Erdatmosphäre eindringt. Bei $75 \pm 5^\circ N$ nimmt die Korrelation wieder stark ab.

7.2.2. Dst Index

In Bild 7.8 sind die gemittelten Epochen von ΔDst Index und von ΔNO_2 (Nacht) bei $60\text{-}70^\circ N$ geomagnetischer Breite dargestellt. Es wurde wieder über die 100 stärksten ΔDst -Ereignisse gemittelt. Es gilt daher als Kriterium für die SEA: $\Delta Dst < -7,6$. Bei der gemittelten Zeitreihe von ΔDst lässt sich der 27-Tage-Zyklus gut erkennen. Die Minima an den Tagen -27 und 27 sind nicht so stark ausgeprägt und etwas breiter als das Minimum an Tag 0, was analog zur SEA von ΔA_p Index ist. Es sei aber nochmals darauf hingewiesen, dass Ap Index und Dst Index auf Messungen aus unterschiedlichen

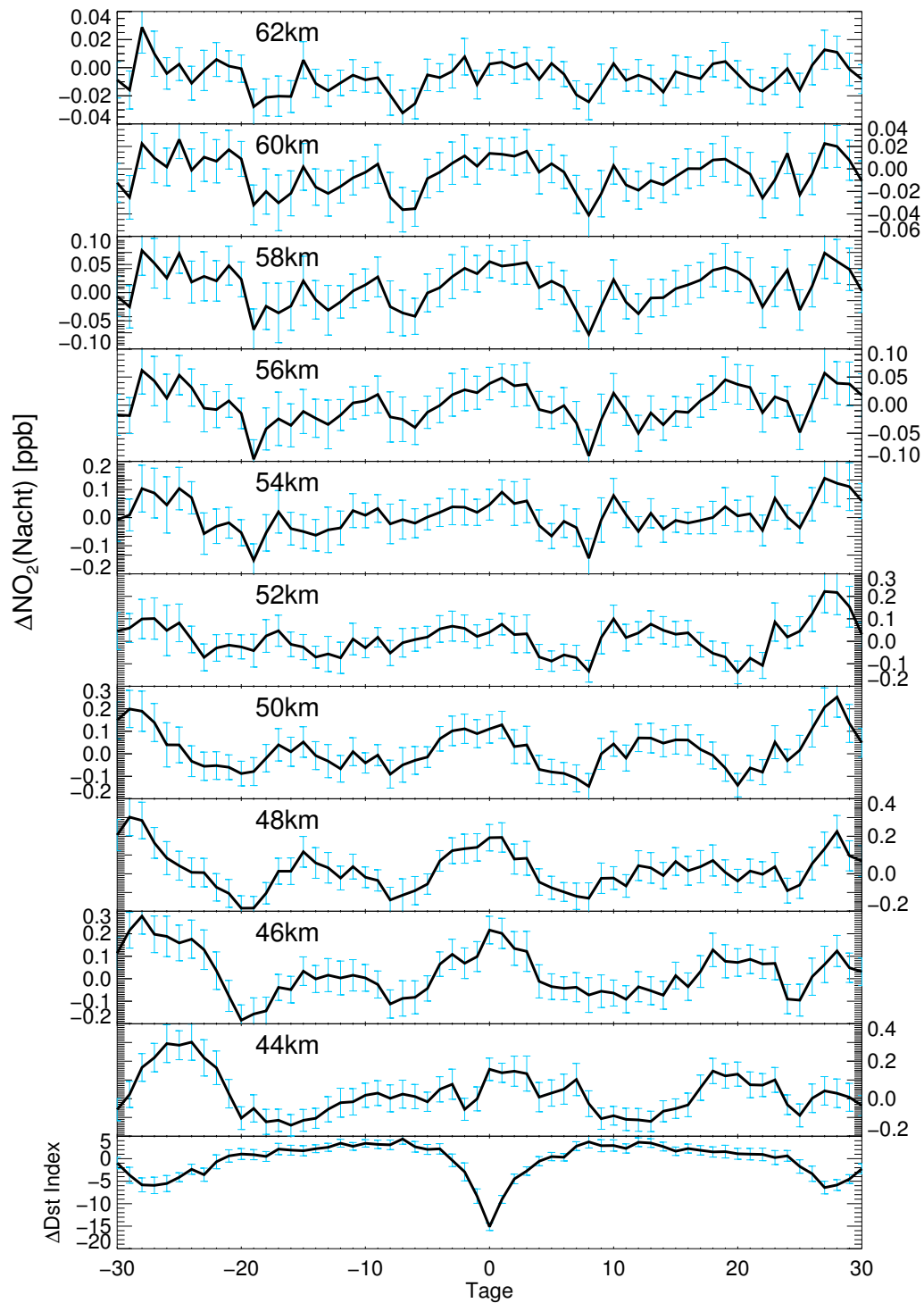


Bild 7.8.: SEA von $\Delta\text{Dst Index}$ und von $\Delta\text{NO}_2(\text{Nacht})$ bei $65\pm 5^\circ\text{N}$ geomagnetischer Breite von 44-62 km Höhe in 2 km Schritten. Die blauen Fehlerbalken geben den 1- σ Fehler des Mittelwertes an.

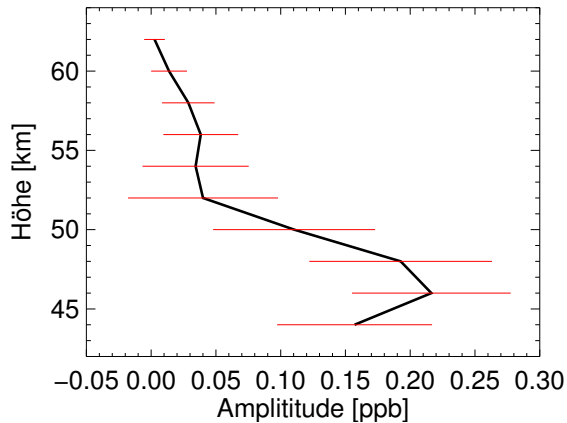


Bild 7.9.: Der Wert oder die Amplitude an Tag 1 der SEA, welche in Bild 7.8 gezeigt ist. Die roten Fehlerbalken geben den $1\text{-}\sigma$ Fehler des Mittelwertes an.

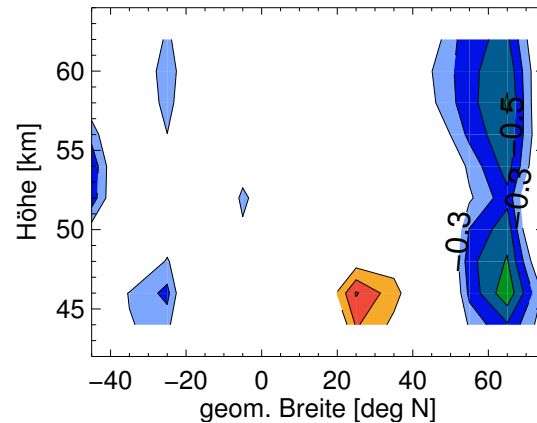


Bild 7.10.: Höhen- und breitenabhängiger Korrelationskoeffizient r zwischen ΔDst und ΔNO_2 . In Blau- und Grüntönen ist eine Antikorrelation ab $r < -0,3$ dargestellt, in den Orange- und Rottönen eine Korrelation ab $r > 0,3$.

geomagnetischen Breiten basieren (Kapitel 2.3). Deshalb werden durchaus auch unterschiedliche Epochen bei der Mittelung ausgewählt. Bei 44 km Höhe lässt sich schon ein Anstieg an Tag 0 sehen und ein ~ 27 -Tage-Zyklus erahnen. Ab 46 km Höhe sieht man 6-9 Tage breite Peaks um die Tage -28/-27, 0 und 27/28. Diese drei Peaks antikorrelieren mit der SEA von ΔDst . Die Nebenmaxima um die Tage -13/13 haben alle in ihrem Fehlerbereich den Wert 0 und sind daher nicht als signifikante Erhöhung zu werten. Ab 52 km Höhe liegt der Wert 0 im $1\text{-}\sigma$ -Bereich von fast allen Werten, so dass keine signifikanten Aussagen mehr möglich sind, wenngleich sich der 27-Tage-Zyklus bis 62 km erahnen lässt.

In Bild 7.9 ist der höhenabhängige Verlauf des Wertes an Tag 0 dargestellt. Im Gegensatz zur entsprechenden, durch ΔAp bestimmten SEA scheint in den meisten Höhen der Peak an Tag 0 (und nicht an Tag 1) ausgeprägter zu sein. Das Maximum liegt hier bei 0,22 ppb in 46 km Höhe. Die Werte nehmen mit der Höhe ab und sind ab 52 km nicht mehr signifikant über 0. Es herrscht qualitativ eine gute Übereinstimmung in der Größe der Amplituden zwischen den Bestimmungen mittels ΔAp und ΔDst . In Bild 7.10 ist r zwischen ΔDst und $\Delta\text{NO}_2(\text{Nacht})$ dargestellt mit 0 Tagen Versatz. Zwischen 45°S und 45°N ist r nur einmal nennenswert groß, und zwar bei 25°N und 46 km Höhe. Ein Blick auf die Werte und Fehler der entsprechenden SEA zeigt allerdings, dass die Erhöhung von $\text{NO}_2(\text{Nacht})$ nicht signifikant ist. In hohen nördlichen Breiten zeigt sich eine Antikorrelation, die bei $65 \pm 5^\circ\text{N}$ maximal wird. In 46 km Höhe ist $r < -0,5$. Zu höheren Breiten nimmt die Antikorrelation wieder ab.

7.2.3. Elektronenfluss

MEPED auf POES misst in verschiedenen Kanälen Elektronen und Protonen. Der Elektronenkanal mit den höchsten Energien misst Elektronen mit $E_{\text{kin}}(e^-) > 300 \text{ keV}$. Jedoch gilt es zu beachten, dass dieser Kanal durch Protonen kontaminiert wird (Yando et al., 2011).

In Bild 7.11 sind die gemittelten Epochen der Variation des Belt Index (90° -Detektor) dieses Elektronenkanals (Δe^- genannt) und von $\Delta \text{NO}_2(\text{Nacht})$ bei $60\text{-}70^\circ\text{N}$ geomagnetischer Breite dargestellt. Wieder wurde über die 100 stärksten Ereignisse gemittelt. Das bedeutet als Kriterium: $\Delta e^- > 0,024$. In der gemittelten Zeitreihe von Δe^- ist an Tag 0 ein scharfes Maximum. An Tag -28 und 28 sind zwar leichte Maxima zu sehen, verglichen mit den übrigen Werten und den Fehlern heben sie sich aber nicht sehr ab, sodass man einen $\sim 27\text{-}28$ Tage Zyklus nicht wirklich erkennen kann. In 44 km und 46 km Höhe ist in den gemittelten ΔNO_2 -Epochen kein signifikantes Signal zu sehen. Ab 48 km Höhe bildet sich ein Peak an Tag 1, der bis 62 km Höhe zu sehen ist. Ein 27-Tage-Zyklus ist in den ΔNO_2 -Epochen nicht zu sehen, wenngleich man an Tag -28 einen Peak in fast allen Höhen erkennen kann, der sich jedoch von anderen Werten nicht signifikant unterscheidet.

In Bild 7.12 ist der höhenabhängige Verlauf des Wertes an Tag 1 der gemittelten ΔNO_2 -Epochen dargestellt. Unterscheidet sich der Wert bei 44 km Höhe noch nicht signifikant von 0, nimmt er mit der Höhe zu und wird maximal bei 52 km mit 0,16 ppb. Danach nimmt er wieder ab, ist jedoch immer größer als 0. In Bild 7.13 ist der Korrelationskoeffizient r zwischen Δe^- und ΔNO_2 mit einem Tag Versatz höhen- und breitenabhängig dargestellt. Es ist nirgends eine signifikante Korrelation beobachtbar.

7.2.4. Protonenfluss

Der Protonenkanal von MEPED, der die höchsten Energien misst, misst Protonen mit $E_{\text{kin}}(p^+) > 6.9 \text{ MeV}$. Dieser Kanal misst aber auch Elektronen mit Energien $> 1 \text{ MeV}$ (Yando et al., 2011). Bei der Abwesenheit von hochenergetischen Protonen misst er also ausschließlich relativistische Elektronen.

In Bild 7.14 wird die SEA von der Variation des Belt Index des beschriebenen Protonenkanals (90° -Detektor), Δp^+ bezeichnet, und von $\Delta \text{NO}_2(\text{Nacht})$ aufgezeigt. Gemittelt wird wieder die über die Epochen mit den 100 stärksten Ereignisse. Das bedeutet als Kriterium $\Delta p^+ > 0,22$. In der gemittelten Epoche von Δp^+ sieht man, wie auch bei den SEAs zuvor, einen Peak an Tag 0. Ein 27-Tage-Zyklus ist nicht zu erkennen. In den gemittelten Epochen von $\Delta \text{NO}_2(\text{Nacht})$ lässt sich in 44 km und 46 km Höhe noch nichts erkennen. Ab 48 km Höhe bildet sich ein Peak an Tag 1, der bis 52 km das absolute Maximum darstellt und bis 62 km Höhe zu sehen ist. Ein 27-Tage-Zyklus ist in den gemittelten Epochen von $\Delta \text{NO}_2(\text{Nacht})$ nicht zu erkennen.

In Bild 7.15 ist der höhenabhängige Verlauf des Wertes an Tag 1 der gemittelten ΔNO_2 -Epochen dargestellt. Bei 44 km Höhe unterscheidet er sich noch nicht signifikant von 0. Er nimmt mit der Höhe zu und erreicht sein Maximum bei 50 km Höhe mit 0,11 ppb. Danach nimmt er mit der Höhe wieder ab, bleibt jedoch bis 62 km immer

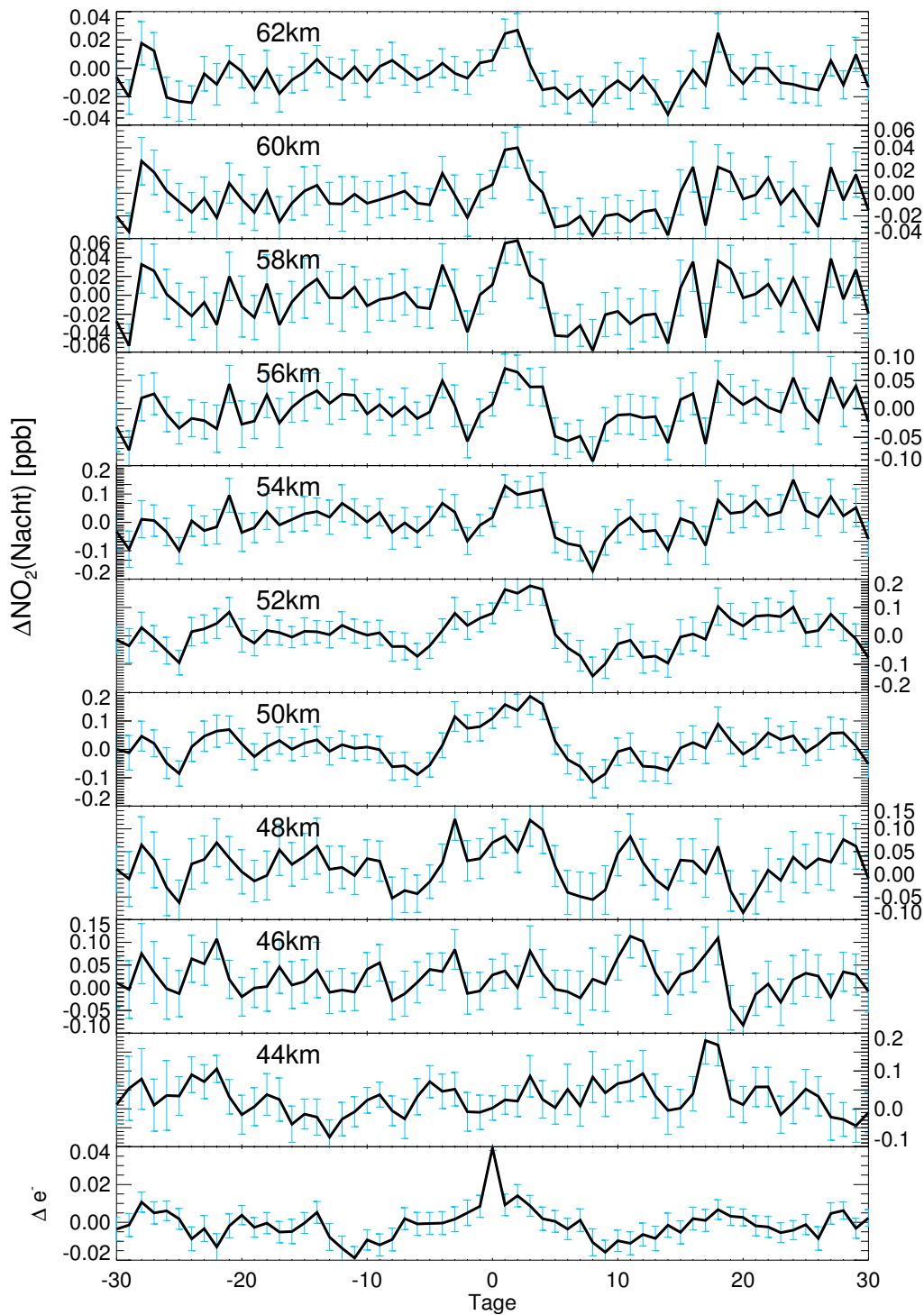


Bild 7.11.: SEA von Δe^- und von $\Delta\text{NO}_2(\text{Nacht})$ bei $65\pm 5^\circ\text{N}$ geomagnetischer Breite von 44-62 km Höhe in 2 km Schritten. Die blauen Fehlerbalken geben den 1- σ Fehler des Mittelwertes an.

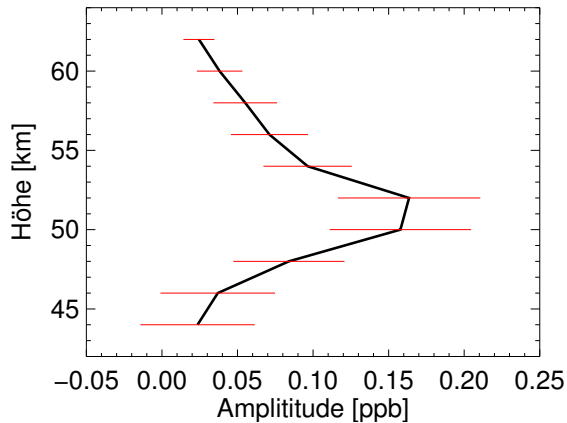


Bild 7.12.: Der Wert oder die Amplitude an Tag 1 der SEA, welche in Bild 7.11 gezeigt ist. Die roten Fehlerbalken geben den $1\text{-}\sigma$ Fehler des Mittelwertes an.

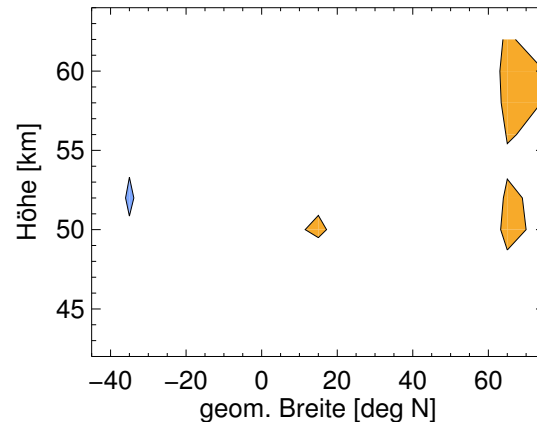


Bild 7.13.: Höhen- und breitenabhängiger Korrelationskoeffizient r zwischen Δe^- und ΔNO_2 . In Blau ist eine Antikorrelation ab $r < -0,3$ dargestellt, in den Orange eine Korrelation ab $r > 0,3$.

signifikant über 0. In Bild 7.16 ist der Korrelationskoeffizient r zwischen Δp^+ und ΔNO_2 mit einem Tag Versatz höhen- und breitenabhängig dargestellt. Es ist nirgends eine signifikante Korrelation erkennbar.

7.2.5. Lyman α

Die Daten des solaren Lyman α -Flusses werden vom LASP Interactive Solar Irradiance Data Center (LISIRD, <http://lasp.colorado.edu/lisird/>) zur Verfügung gestellt. Sie beruhen auf Messungen des Solar EUV Experiments (SEE) auf dem Thermosphere Ionosphere Mesosphere Energetics and Dynamics (TIMED) Satelliten und auf Messungen des Solar Stellar Irradiance Comparison Experiments (SOLSTICE) auf dem Solar Radiation and Climate Experiment (SORCE) Satelliten. Die Messungen wurden auf das Upper Atmosphere Research Satellite (UARS) Referenzlevel skaliert, wie es in Woods et al. (2000) beschrieben wird.

In Bild 7.17 ist die SEA von der Variation des solaren Lyman α -Flusses ($\Delta \text{Ly}\alpha$) und von ΔNO_2 (Nacht) dargestellt. Es wurde wieder über die Epochen mit den 100 stärksten Ereignisse gemittelt. Das bedeutet als Kriterium $\Delta \text{Ly}\alpha > 0,056 \cdot 10^{11}$ Photonen $\text{cm}^{-2} \text{s}^{-1}$. Die gemittelte Epoche von $\Delta \text{Ly}\alpha$ zeigt einen deutlichen 27-Tage-Zyklus mit breiten Peaks. Bei 44 km und 46 km Höhe lässt sich in den gemittelten Epochen von ΔNO_2 (Nacht) noch nicht viel erkennen. Ab 48 km Höhe bildet sich zwischen Tag -2 und Tag 0 ein breites Maximum aus, das ab 54 km Höhe wieder verschwindet. Ein 27-Tage-Zyklus lässt sich nur in den Höhen zwischen 48 km und 52 km erkennen, wobei der Anstieg zum Maximum steiler als der anschließende Abfall ist. Dies kann mit der Lebensdauer von NO_x zusammenhängen.

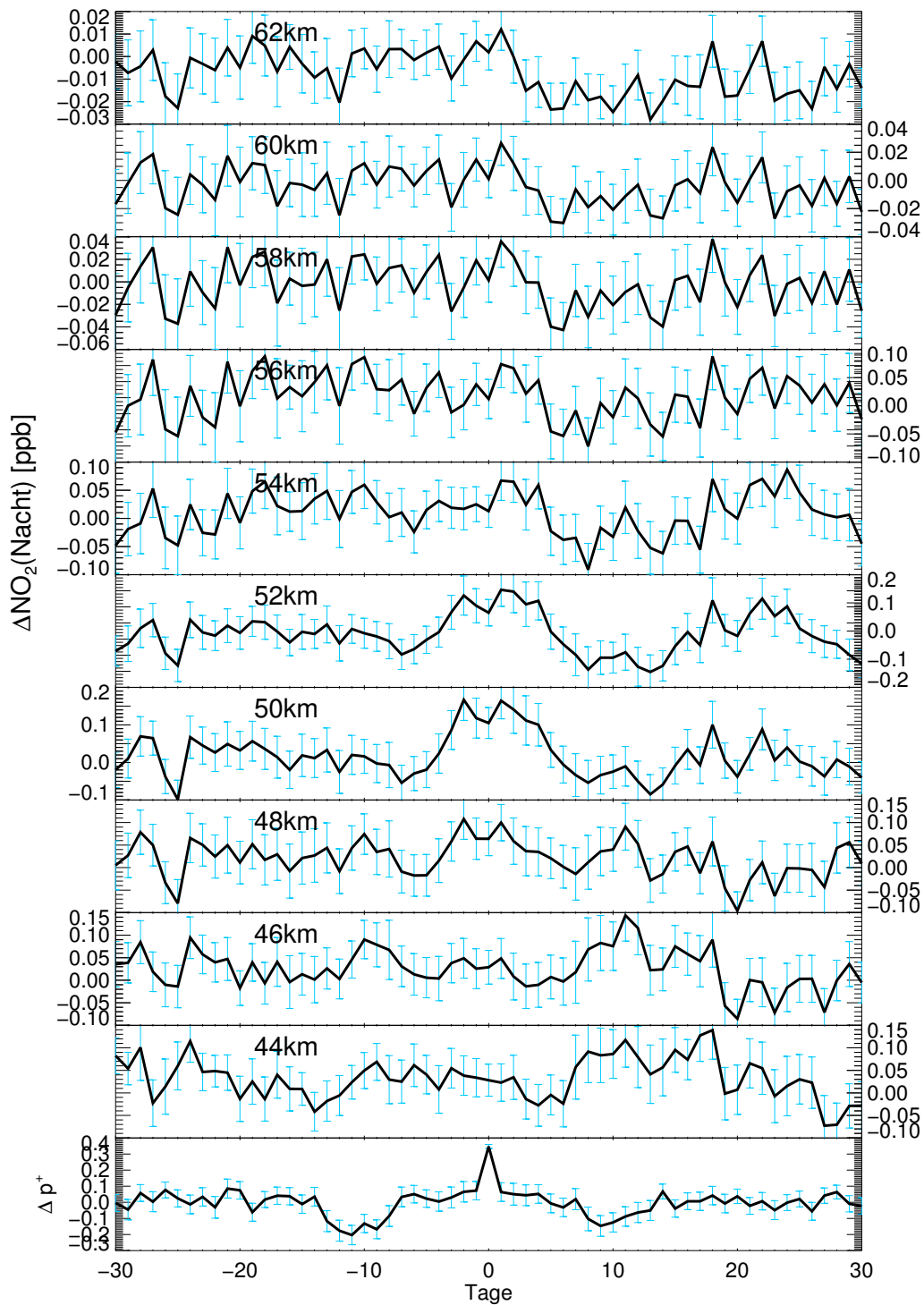


Bild 7.14.: SEA von Δp^+ und von $\Delta\text{NO}_2(\text{Nacht})$ bei $65 \pm 5^\circ\text{N}$ geomagnetischer Breite von 44-62 km Höhe in 2 km Schritten. Die blauen Fehlerbalken geben den 1- σ Fehler des Mittelwertes an.

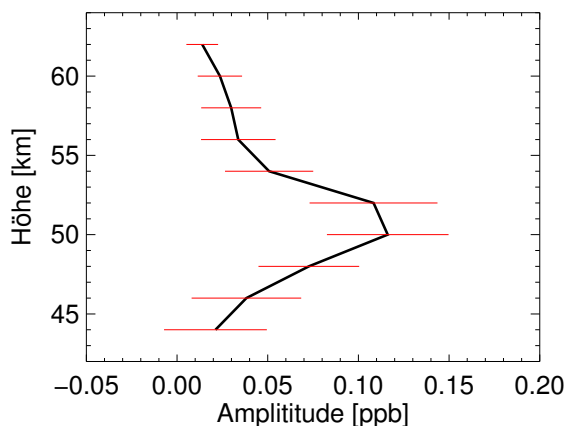


Bild 7.15.: Der Wert oder die Amplitude an Tag 1 der SEA, welche in Bild 7.14 gezeigt ist. Die roten Fehlerbalken geben den $1\text{-}\sigma$ Fehler des Mittelwertes an.

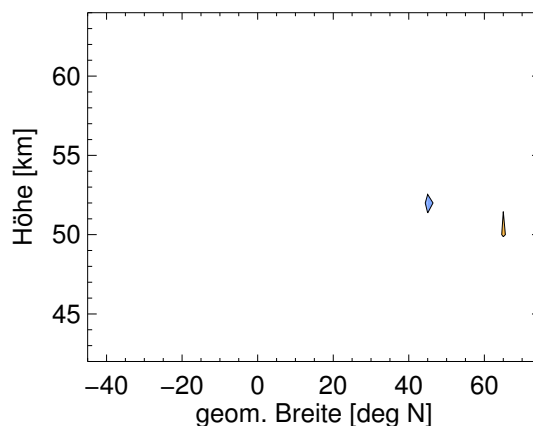


Bild 7.16.: Höhen- und breitenabhängiger Korrelationskoeffizient r zwischen Δp^+ und ΔNO_2 . In blau ist eine Antikorrelation ab $r < -0,3$ dargestellt.

In Bild 7.18 ist der höhenabhängige Verlauf des Wertes an Tag 0 der gemittelten ΔNO_2 -Epochen dargestellt. Er steigt ab 44 km Höhe mit der Höhe an und erreicht sein Maximum bei 48 km mit 0,18 ppb. Der Wert fällt daraufhin mit der Höhe ab, bleibt dabei immer über 0, ab 58 km aber nicht mehr signifikant.

Obwohl sich eine Abhängigkeit zwischen $\Delta \text{Ly}\alpha$ und $\Delta \text{NO}_2(\text{Nacht})$ in 48-52 km deutlich erkennen lässt, kann man nicht direkt von einer linearen Abhängigkeit ausgehen. Zu viele Einflüsse können gleichzeitig eine Rolle spielen: UV Strahlung hat einen direkten Einfluss auf die Temperatur, die O_3 -Häufigkeit und die O_3 -Säulendichte, was auf das NO_2/NO_x -Verhältnis einen Einfluss haben kann. Auch hat die UV Strahlung Einfluss auf die NO -Säulendichte, damit auch auf die NO -Photolyserate und die NO_x -Häufigkeit. Deshalb benötigt man eine Methode, monotone, nicht-lineare Abhängigkeiten untersuchen zu können. Dazu eignet sich die Quadrantenkorrelation (Blomqvist, 1950): Eine Verteilung, die von zwei Variablen bestimmt ist (in diesem Fall die Zeitreihen $\Delta \text{Ly}\alpha(t)$ und $\Delta \text{NO}_2(t)$), wird mit Hilfe des Medians in 4 Quadranten aufgeteilt, sodass in den Quadranten 1 und 4 sowie in den Quadranten 2 und 3 jeweils gleich viele Punkte liegen. Die Anzahl der Punkte wird je nach Quadrant mit n_1, n_2, n_3, n_4 , die Gesamtanzahl mit n_{ges} bezeichnet. Mittels der Formel

$$\chi_{\text{QK}}^2 = \frac{n_{\text{ges}} \cdot (n_1 \cdot n_4 - n_2 \cdot n_3)^2}{(n_1 + n_2) \cdot (n_3 + n_4) \cdot (n_1 + n_3) \cdot (n_2 + n_4)} \quad (7.7)$$

wird ein Wert χ_{QK}^2 in Abhängigkeit der Punkteverteilung in den Quadranten und n_{ges} ausgerechnet. Diesem Wert kann mit Hilfe der Tabelle 7.2 die Wahrscheinlichkeit p einer monotonen Abhängigkeit zwischen den Variablen zugeordnet werden. In Bild 7.19 ist die höhen- und breitenabhängige Wahrscheinlichkeit p in % einer Abhängigkeit zwischen $\Delta \text{Ly}\alpha$ und $\Delta \text{NO}_2(\text{Nacht})$ dargestellt. Die Farben zeigen auch das Vorzeichen der

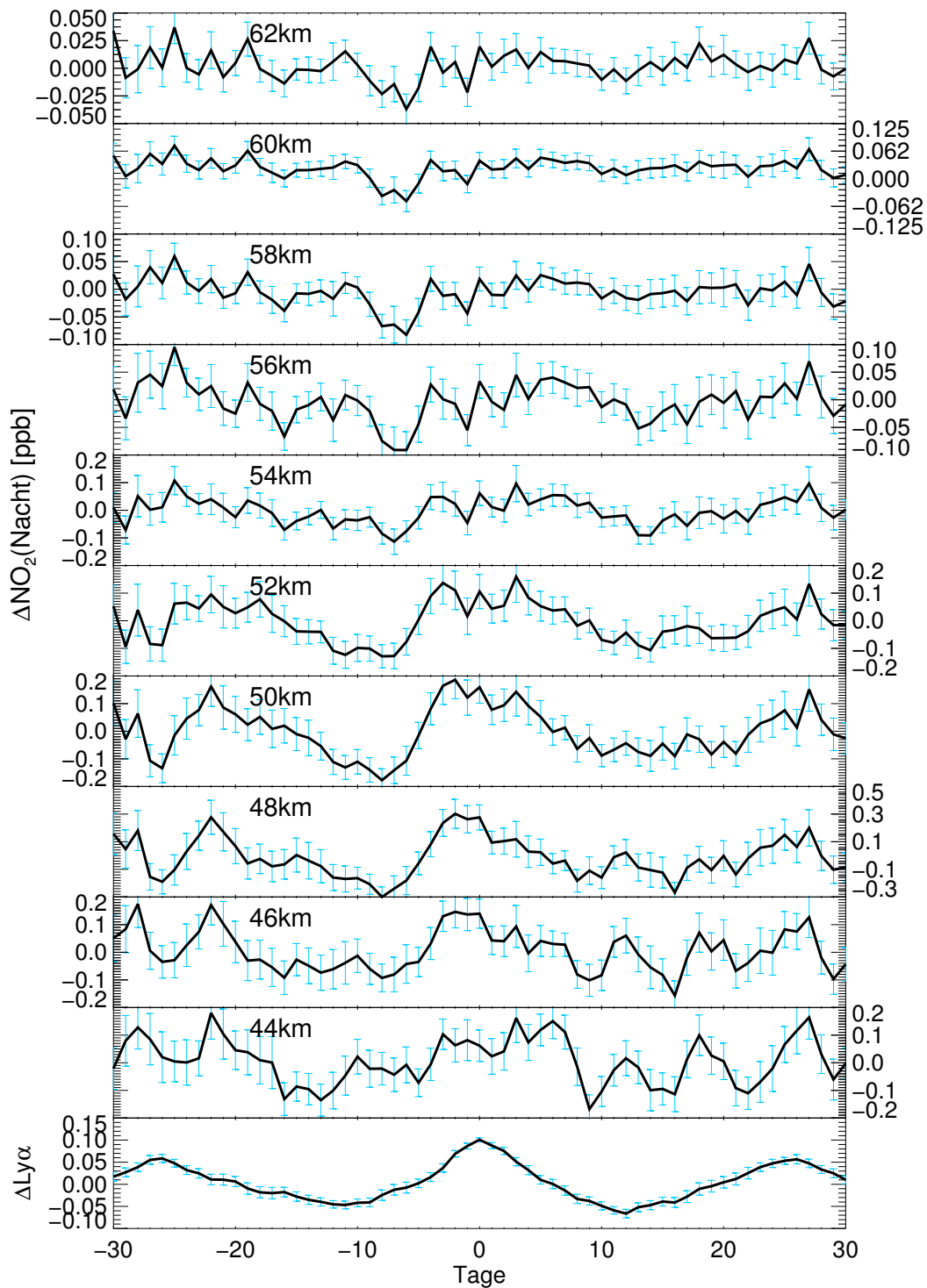


Bild 7.17.: SEA von $\Delta\text{Ly}\alpha$ und $\Delta\text{NO}_2(\text{Nacht})$ bei $65\pm 5^\circ\text{N}$ geomagnetischer Breite von 44-62 km Höhe in 2 km Schritten. Die blauen Fehlerbalken geben den 1- σ Fehler des Mittelwertes an.

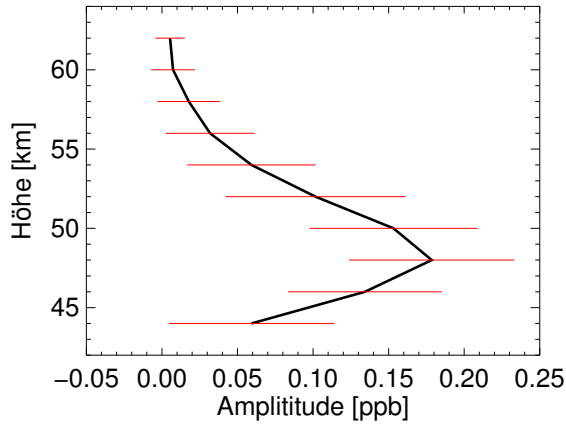


Bild 7.18.: Der Wert oder die Amplitude an Tag 1 der SEA, welche in Bild 7.17 gezeigt ist. Die roten Fehlerbalken geben den 1- σ Fehler des Mittelwertes an.

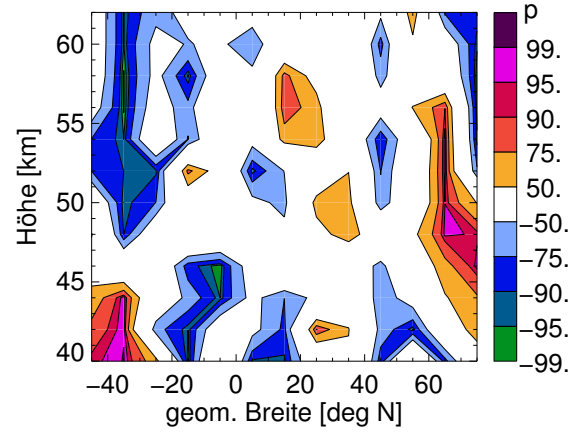


Bild 7.19.: Höhen- und breitenabhängige Wahrscheinlichkeit p in % einer Abhängigkeit zwischen $\Delta\text{Ly}\alpha$ und $\Delta\text{NO}_2(\text{Nacht})$, ermittelt durch die im Text erläuterte Quadrantenkorrelation. Das Vorzeichen gibt die Art der monotonen Abhängigkeit an.

Tabelle 7.2.: Zuordnung zwischen χ_{QK}^2 und der Wahrscheinlichkeit p bei der Quadrantenkorrelation (Blomqvist, 1950)

χ_{QK}^2	0.0	0.1	0.2	0.3	0.4	0.5	0.6	0.7	0.8	0.9
p	1.00	0.75	0.65	0.58	0.53	0.48	0.44	0.40	0.37	0.34
χ_{QK}^2	1.0	1.1	1.2	1.3	1.4	1.5	1.6	1.7	1.8	1.9
p	0.32	0.29	0.27	0.25	0.24	0.22	0.21	0.19	0.18	0.17
χ_{QK}^2	2.0	2.1	2.2	2.3	2.4	2.5	2.6	2.7	2.8	2.9
p	0.16	0.15	0.14	0.13	0.121	0.114	0.107	0.100	0.094	0.089
χ_{QK}^2	3.0	3.1	3.2	3.3	3.4	3.5	3.6	3.7	3.8	3.9
p	0.083	0.078	0.074	0.069	0.065	0.061	0.058	0.054	0.051	0.048
χ_{QK}^2	4.0	4.1	4.2	4.3	4.4	4.5	4.6	4.7	4.8	4.9
p	0.046	0.042	0.040	0.038	0.036	0.034	0.032	0.030	0.028	0.027
χ_{QK}^2	5.0	5.1	5.2	5.3	5.4	5.5	5.6	5.7	5.8	5.9
p	0.025	0.024	0.023	0.021	0.020	0.019	0.018	0.017	0.016	0.015
χ_{QK}^2	6.0	6.1	6.4	6.5	6.7	6.9				
p	0.014	0.013	0.012	0.011	0.010	0.009				
χ_{QK}^2	7.1	7.3	7.6	7.9	8.3	8.9	9.6			
p	0.008	0.007	0.006	0.005	0.004	0.003	0.002			

monotonen Abhängigkeit. Bei $65\pm 5^\circ\text{N}$ geomagnetischer Breite zwischen 48 km und 56 km Höhe ist $p > 90\%$. Dies kann durch Elektronenniederschlag, der zeitweise phasengleich mit der Intensität der UV-Strahlung zusammenhängt, verursacht werden. Hohe Beträge von p und damit auch bei $65\pm 5^\circ\text{N}$ können aber auch wie erwähnt durch Änderungen in Temperatur, Ozon und NO-Photolyseraten zusammenhängen. Dies kann nur mit einem 3-dimensionalen Chemietransportmodell mit vom Sonnenzyklus abhängiger Photochemie untersucht werden und fällt damit aus dem Rahmen dieser Arbeit. Dennoch muss im Folgenden sichergestellt werden, dass zwischen geomagnetischen und radiativen Effekten unterschieden wird.

7.2.6. Diskussion der bisherigen Ergebnisse

In den nördlichen geomagnetischen Breiten des Strahlungsgürtels ($65\pm 5^\circ\text{N}$) lässt sich eine Korrelation des Ap Index (46 km bis 52 km), und eine Antikorrelation des Dst Index (44 km bis 50 km) mit der $\text{NO}_2(\text{Nacht})$ -Zeitreihe nachweisen. Maximale Werte liegen bei 0,22 ppb in 48 km Höhe mit einer Verzögerung von einem Tag (SEA mit ΔAp) und bei 0,22 ppb in 46 km Höhe (SEA mit ΔDst) mit keinem Tag Verzögerung. Eine Erhöhung des von MEPED/POES gemessenen Flusses hochenergetischer Teilchen führt ebenfalls zu einer Erhöhung des VMRs von $\text{NO}_2(\text{Nacht})$ mit einer Verzögerung von einem Tag. Maximale Werte liegen bei 0,16 ppb in 52 km Höhe (SEA mit Δe^-) und 0,11 ppb in 50 km Höhe (SEA mit Δp^+). Es lässt sich aber nicht mit Sicherheit sagen, ob Protonen oder Elektronen für die Erhöhung des Teilchenflusses verantwortlich sind. Während eines solaren Minimums sind es wahrscheinlich in der Mehrheit der Fälle Elektronen.

Der Einfluss der UV-Strahlung, als deren Stellvertreter der solare Lyman α -Strahlungsfluss verwendet wird, ist in derselben Größenordnung. Die maximale Erhöhung beträgt in den gemittelten Epochen 0,18 ppb in 48 km Höhe. Um eine von der UV-Strahlung geringer abhängige gemittelte Epoche zu bestimmen, wird für die SEA eine zusätzliche Bedingung für den Tag d formuliert: $|\Delta\text{Ly}\alpha| < 0.02 \cdot 10^{11} \text{ Photonen cm}^{-2} \text{ s}^{-1}$. In Bild 7.20 ist die SEA von ΔAp in schwarz mit diesen zwei Kriterien dargestellt. Diese führen dazu, dass die gemittelte $\Delta\text{Ly}\alpha$ -Epoche kein Maximum an Tag 0 besitzt, die gemittelte ΔAp -Epoche hingegen schon. In der gemittelten $\Delta\text{Ly}\alpha$ -Epoche lässt sich auch kein 27-Tage-Zyklus erkennen. In der gemittelten Epoche von ΔNO_2 sieht man bei 44 km Höhe weder ein Maximum an Tag 1 noch einen 27-Tage-Zyklus. Beides bildet sich erst ab 46 km aus, ist in 48 km und 50 km deutlich zu sehen und bildet sich ab 52 km Höhe wieder zurück. Ab 54 km sieht man kein Signal mehr, das man ΔAp zuordnen könnte.

Bild 7.21 zeigt den höhenabhängigen Wert der gemittelten ΔNO_2 -Epoche an Tag 1. Er nimmt von 44 km mit der Höhe zu und erreicht sein Maximum bei 48 km mit 0,47 ppb. Danach nimmt der Wert wieder ab, bleibt aber immer über 0 ppb. In Bild 7.22 ist der höhen- und breitenabhängige Korrelationskoeffizient r zwischen den gemittelten ΔAp - und ΔNO_2 -Epochen dargestellt. Zwischen 45°S und 45°N geomagnetischer Breite ist keine lineare Korrelation erkennbar. Zwischen 44 km und 52 km Höhe nimmt sie zu höheren nördlichen Breiten hin zu und erreicht ihr Maximum mit $r > 0,6$ bei 48 km Höhe und $65\pm 5^\circ\text{N}$. Zu noch höheren Breiten hin nimmt die Korrelation wieder ab.

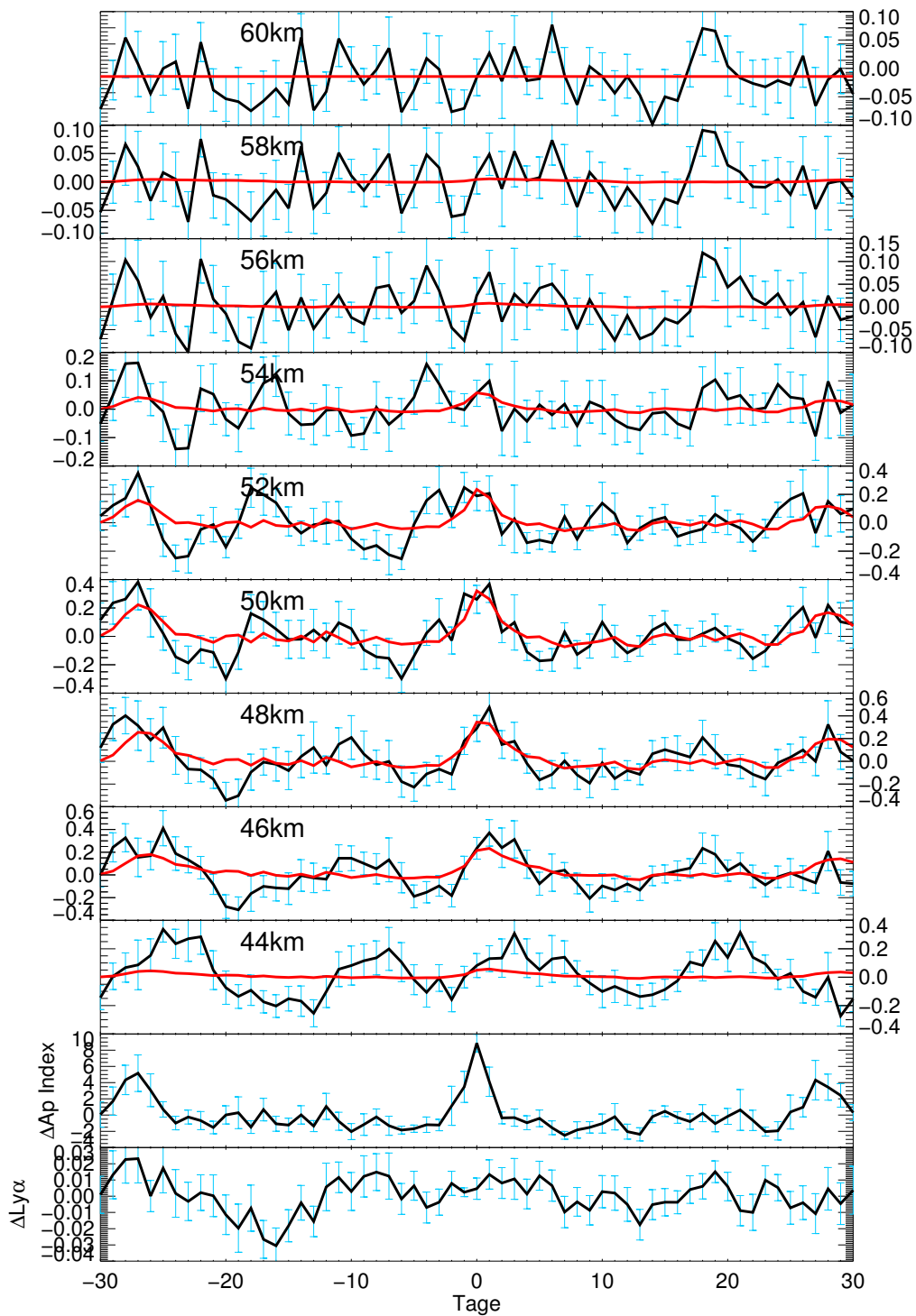


Bild 7.20.: SEA von ΔAp und ΔNO_2 (Nacht) mit unterdrücktem $\Delta Ly\alpha$ bei $65 \pm 5^\circ N$ geomagnetischer Breite von 44-62 km Höhe in 2 km Schritten. Die blauen Fehlerbalken geben den 1- σ Fehler des Mittelwertes an. Die rote Kurve zeigt den im Text erläuterten Fit.

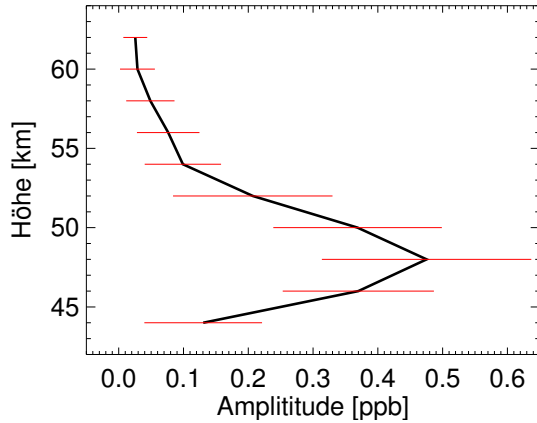


Bild 7.21.: Der Wert oder die Amplitude an Tag 1 der SEA, welche in Bild 7.20 gezeigt ist. Die roten Fehlerbalken geben den 1- σ Fehler des Mittelwertes an.

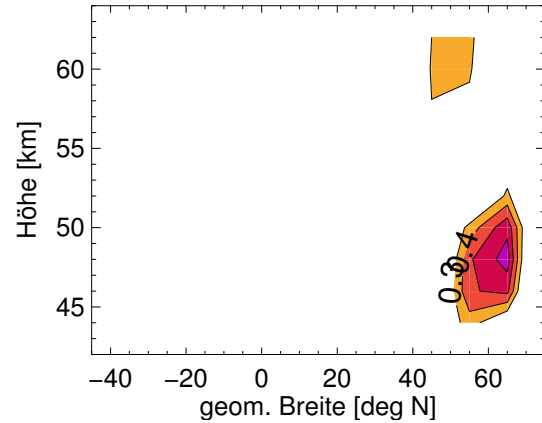


Bild 7.22.: Höhen- und breitenabhängiger Korrelationskoeffizient r zwischen ΔA_p und ΔNO_2 . In Orange- und Rottönen ist eine Korrelation ab $r > 0,3$ dargestellt.

7.2.7. Produktionsraten und Lebensdauer

Um eine NO_x -Produktionsrate pr zu bestimmen, die vom A_p Index abhängig ist, wird ein einfaches Modell an die gemittelten Epochen in Bild 7.20 angefitet. Dieses Modell ist jeweils in rot dargestellt. Das Modell nimmt eine lineare Abhängigkeit von ΔNO_2 zu ΔA_p an, welche durch pr ausgedrückt ist. Weiterhin wird die höhenabhängige Lebensdauer τ von NO_x und damit die NO_x -Produktion an den vorigen Tagen berücksichtigt. Zuerst werden pr und τ iterativ bestimmt, indem χ^2 minimiert wird:

$$\chi^2 = \sum_{i=0}^{60} \left(\frac{\sum_{t=0}^T e^{-\frac{t}{\tau}} \cdot pr \cdot \Delta A_{p_{i-t}} - \Delta NO_{2_i}}{\sigma_i} \right)^2. \quad (7.8)$$

T steht für eine ganze Zahl, welche abhängig von τ gewählt wird und typischerweise $2-3 \tau$ beträgt. σ_i bezeichnet die Varianz von ΔNO_{2_i} . In Bild 7.23 ist τ in Abhängigkeit der Höhe aufgetragen. Oberhalb 54 km wird τ kleiner als 1 d, aber die in der Analyse verwendeten Tagesmittel sind nicht mehr in der Lage das aufzulösen. Aus diesem Grund ist die Linie ab 54 km gestrichelt.

Im Vergleich zu den nach dem SPE 2003 in Kapitel 6.1 bestimmten Lebensdauern sind sie deutlich kürzer. τ wird vor allem durch Dynamik beeinflusst (Brasseur und Salomon, 2005); das sind vor allem zonale und meridionale Winde sowie lokale Vermischungen. NO_x ist während eines SPEs in der gesamten Polarkappe erhöht, während es bei einem EEP-Ereignis auf eine kleine Region begrenzt ist. Der Transport von und die Vermischung mit umliegender Luft, welche nicht durch EEP beeinflusst wurde, führt zu einer deutlich kürzeren dynamischen Lebensdauer von NO_x , verglichen mit der nach einem SPE.

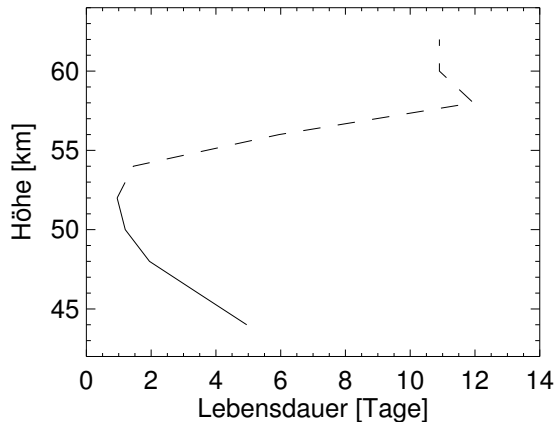


Bild 7.23.: Durch das an die SEA gefittete Modell bestimmte höhenabhängige Lebensdauer τ von NO_x bei 65°N geomagnetische Breite.

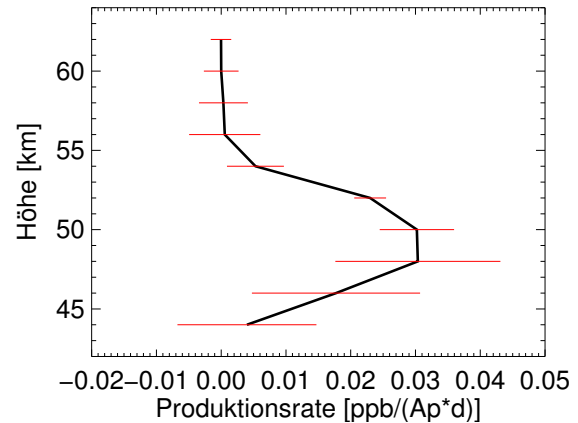


Bild 7.24.: Durch das an die SEA gefittete Modell bestimmte höhenabhängige Produktionsrate pr von NO_2 bei 65°N geomagnetische Breite.

Um pr und die Varianz von pr möglichst präzise zu bestimmen, wird die Methode der kleinsten Quadrate angewandt, wobei das zuvor bestimmte τ benutzt wird. In Bild 7.24 ist pr (schwarz) mit seinem $1-\sigma$ Bereich (rot) in Abhängigkeit der Höhe dargestellt. pr gibt die Erhöhung in ppb pro Ap-Wert und pro Tag an und hat deshalb die Einheit $\text{ppb Ap}^{-1} \text{d}^{-1}$. In 44 km Höhe ist eine Produktionsrate von $0 \text{ ppb Ap}^{-1} \text{d}^{-1}$ noch im $1-\sigma$ -Fehlerbereich, bei 46 km schon nicht mehr. Bei 48 km und 50 km Höhe erreicht pr mit $0,03 \text{ ppb Ap}^{-1} \text{d}^{-1}$ das Maximum. Danach nimmt pr mit der Höhe ab und ab 56 km Höhe ist $pr = 0 \text{ ppb Ap}^{-1} \text{d}^{-1}$.

Der abrupte Abfall der Produktionsraten unterhalb 46 km Höhe ist damit zu erklären, dass keine ausreichend große Anzahl an Elektronen in diese Tiefen eindringt. Der Abfall von pr oberhalb 52 km Höhe hat verschiedene Ursachen. Zum einen die NO_x -Lebensdauer τ . Ist τ kleiner als 1 d, ist es wahrscheinlich, dass die Satellitenmessungen die tatsächliche NO_x -Erhöhung stark unterschätzen, da der zeitliche Unterschied zwischen Ereignis und Messung mit kleinerem τ immer stärker ins Gewicht fällt. Zusätzlich muss beachtet werden, dass das NO_2/NO_x -Verhältnis im Sommer mit der Höhe stark abnimmt, wie in Bild 7.25 gezeigt wird. Ist es unterhalb 50 km größer als 0,9, ist es bei 56 km schon je nach Jahr bei ca. 0,5. Bei 62 km kann es schon kleiner als 0,2 sein (z.B. im Sommer 2011). Eine mögliche NO_x -Produktion wird deshalb mit der Höhe immer weniger in NO_2 -Messungen sichtbar. Weiterhin nimmt die effektive NO_x -Produktionsrate oberhalb 50 km ab wie in Kapitel 6.2 mit einem Boxmodell in Bild 6.6 gezeigt wurde. Alle drei genannten Gründe sind wahrscheinliche Ursachen für die Abnahme der gemessenen Produktionsrate oberhalb 50 km.

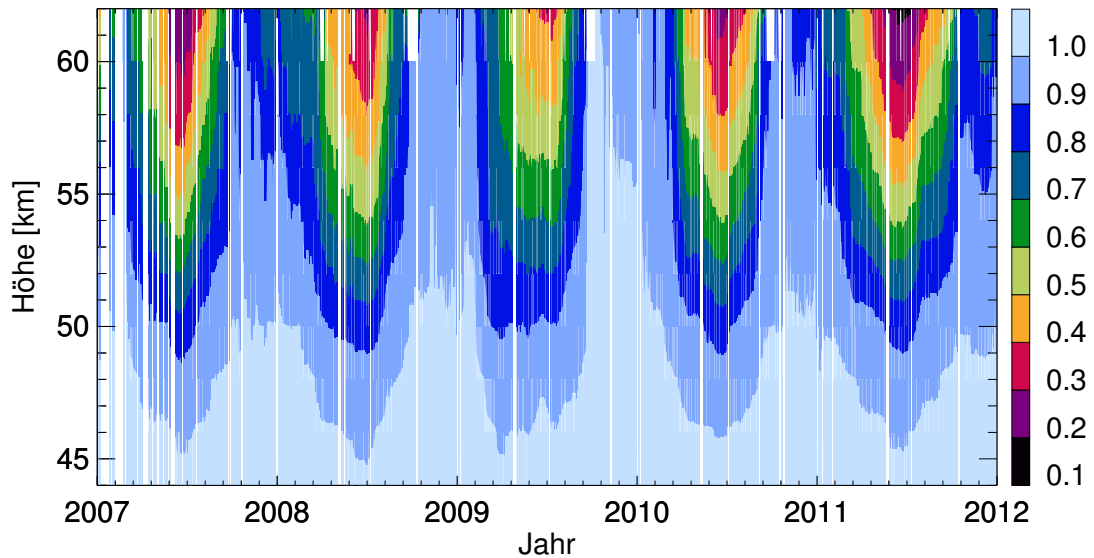


Bild 7.25.: NO_2/NO_x , gemessen von MIPAS/ENVISAT um 22 Uhr Lokalzeit als zonales Mittel bei 60N-70N geomagnetischer Breite von 2007 bis 2011.

7.3. NO_2 (Tag)

In diesem Unterkapitel werden die Tagesmessungen von NO_2 mit derselben Methode wie in den vorigen Kapiteln, der SEA, untersucht. Für Tagesmessungen gilt: $\text{SZA} < 89^\circ$. Oberhalb 52 km und unterhalb 34 km ist $\text{AVKD} < 0,03$, weshalb die Analyse auf diesen Höhenbereich beschränkt ist. Als Bedingung soll dieselbe wie in Kapitel 7.2.1 dienen, also $\Delta A_p > 3,5$.

In Bild 7.26 sind die gemittelten Epochen von 34 km bis 50 km Höhe dargestellt. Ein 27-Tage-Zyklus ist nirgends zu erkennen. Dagegen ist eine Erhöhung an Tag 1 auszumachen, welche allerdings immer im Größenbereich von Erhöhungen an anderen Tagen liegt (z.B. an den Tagen -23 bis -21 in den Höhen 34 km bis 42 km oder an Tag 19 in den Höhen darüber). Die Erhöhung an Tag 1 ist höhenabhängig in Bild 7.27 dargestellt. Das Maximum ist bei 0,04 ppb in 36 km Höhe, was äußerst gering ist. Ab 42 km ist die Erhöhung auch nicht mehr signifikant. Der Korrelationskoeffizient r ist breiten- und höhenabhängig in Bild 7.28 dargestellt. r bleibt immer kleiner als 0,5. Von 45°S bis 45°N geomagnetische Breite ist eine Korrelation mit ΔA_p nicht feststellbar. Bei 65°N ist $r > 0,4$ zwischen 36 km und 46 km Höhe, was aber nicht als signifikant gewertet werden kann. NO_2 ist also am Tag in der mittleren Atmosphäre kein geeignetes Gas, um nach Auswirkungen solarer Variation zu suchen.

7.4. N_2O_5

In diesem Unterkapitel werden die Nachtmessungen ($\text{SZA} > 96^\circ$) von N_2O_5 analysiert. Das Retrieval von N_2O_5 aus den MIPAS Limbspektren ist in Mengistu Tsidu et al.

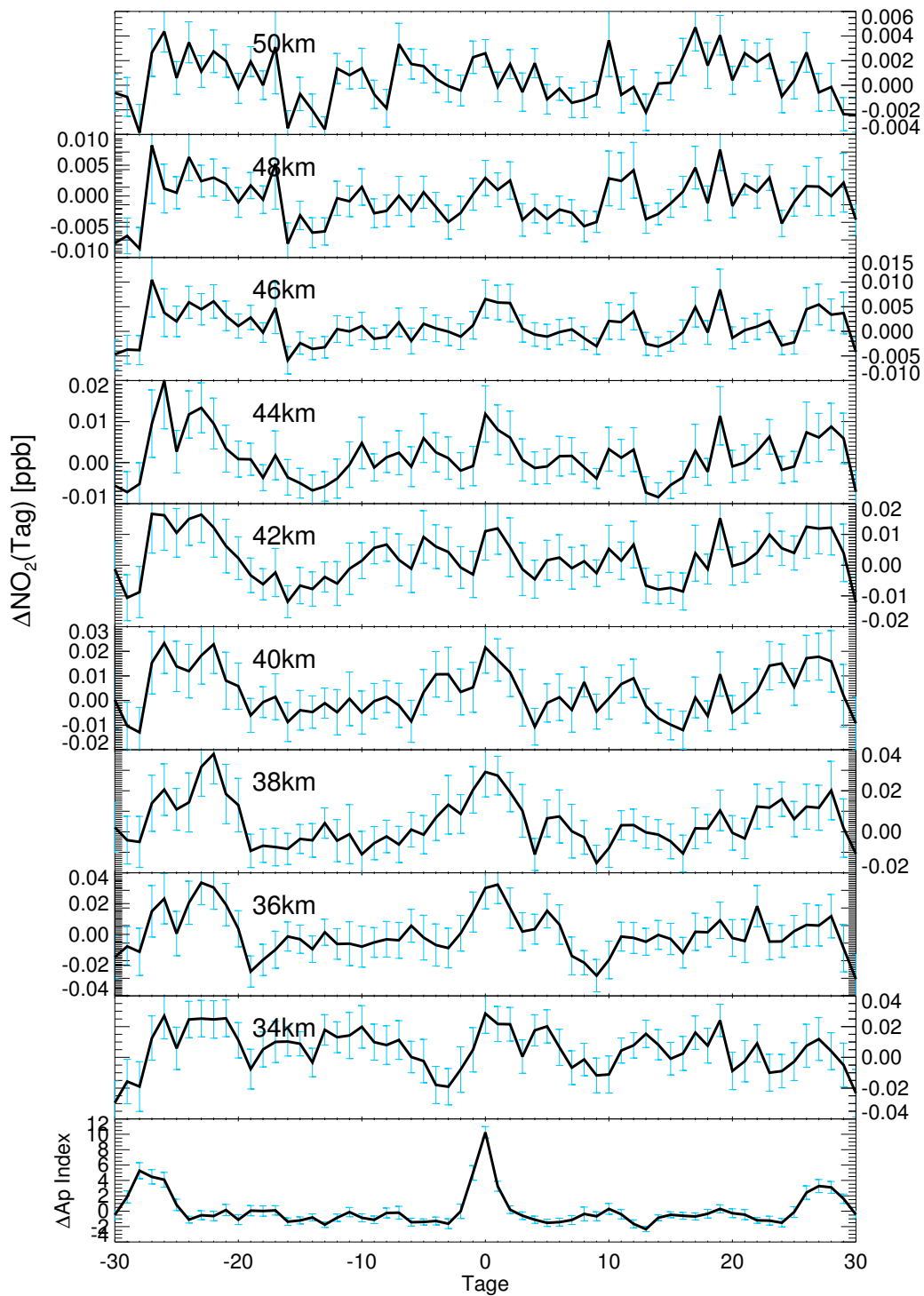


Bild 7.26.: SEA von ΔAp und $\Delta\text{NO}_2(\text{Tag})$ bei $65\pm 5^\circ\text{N}$ geomagnetischer Breite von 34-50 km Höhe in 2 km Schritten. Die blauen Fehlerbalken geben den 1- σ Fehler des Mittelwertes an.

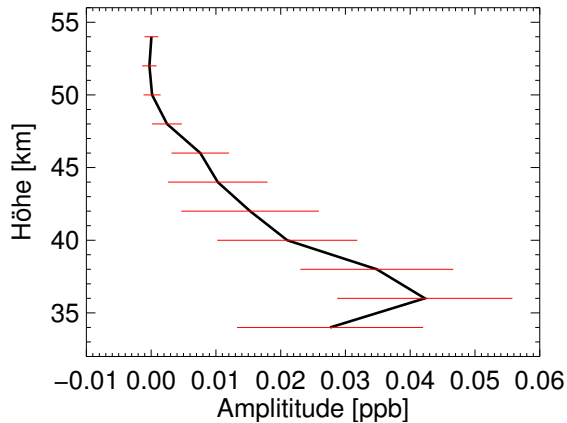


Bild 7.27.: Der Wert oder die Amplitude an Tag 1 der SEA, welche in Bild 7.26 gezeigt ist. Die roten Fehlerbalken geben den $1\text{-}\sigma$ Fehler des Mittelwertes an.

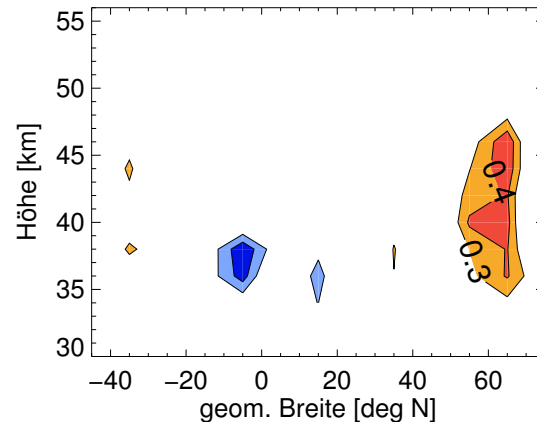


Bild 7.28.: Höhen- und breitenabhängiger Korrelationskoeffizient r zwischen ΔA_p und $\Delta \text{NO}_2(\text{Tag})$. In blau ist eine Antikorrelation ab $r < -0,3$ dargestellt, in den Orange- und Rottönen eine Korrelation ab $r > 0,3$.

(2004) beschrieben. Der Fehler einer Einzelmessung bei Nacht wird in der oberen Stratosphäre mit mehr als 40 % angegeben. Es wird die Version V5R_N2O5_220 verwendet. Als Bedingung gilt wieder $\Delta A_p > 3,5$.

Bild 7.29 zeigt die gemittelten Epochen der SEA in den Höhen 44 km bis 62 km. Es ist in keiner Höhe ein 27-Tage-Zyklus zu sehen noch sieht man eine signifikante Erhöhung an Tag 1 wie in den NO_2 -Messungen. Das Signal-Rausch-Verhältnis ist zu klein. N_2O_5 ist demnach in der mittleren Atmosphäre kein geeignetes Gas, um diese Art von Studie durchzuführen.

7.5. Diskussion

In Kapitel 7 wurde mit Hilfe der SEA nach Auswirkungen von Variationen in geomagnetischen Indizes, Teilchenflüssen und solarer Lyman α -Strahlung in der mittleren Atmosphäre gesucht. Dabei wurden die Gase NO , NO_2 , und N_2O_5 analysiert. NO kann zu einer Analyse in der mittleren Atmosphäre nicht verwendet werden, da das thermosphärische Signal in die mittlere Atmosphäre gefaltet wird und dabei in derselben Größenordnung ist wie das in der mittleren Atmosphäre ermittelte Signal (Kapitel 7.1). N_2O_5 ist nicht geeignet, da das Signal-Rauschverhältnis zu groß ist (Kapitel 7.4). NO_2 wurde in der Analyse mittels eines SZA-Kriteriums in $\text{NO}_2(\text{Tag})$ und $\text{NO}_2(\text{Nacht})$ aufgeteilt. $\text{NO}_2(\text{Tag})$ ist auch kein geeignetes Gas in der mittleren Atmosphäre um nach Auswirkungen solarer Variationen zu suchen, da es in zu geringen Mengen vorkommt und die gemessenen Erhöhungen als nicht signifikant gewertet werden müssen (Kapitel 7.3).

Signifikante Auswirkungen konnten in der Zeitreihe von $\text{NO}_2(\text{Nacht})$ zwischen 60°N

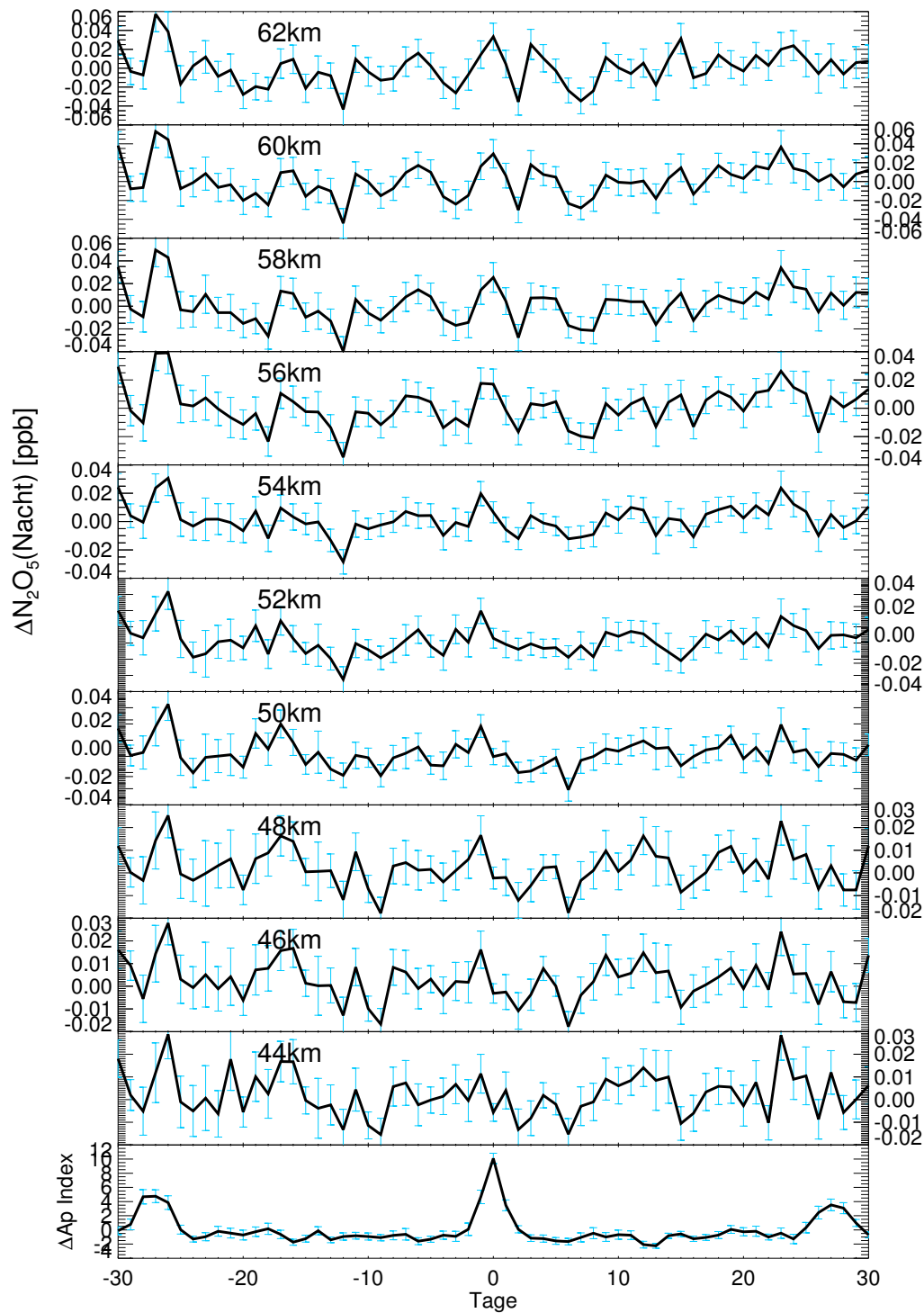


Bild 7.29.: SEA von ΔAp und $\Delta\text{N}_2\text{O}_5(\text{Nacht})$ bei $65\pm 5^\circ\text{N}$ geomagnetischer Breite von 44-62 km Höhe in 2 km Schritten. Die blauen Fehlerbalken geben den 1- σ Fehler des Mittelwertes an.

und 70°N geomagnetischer Breite nachgewiesen werden. Sowohl Auswirkungen von geomagnetischen Indizes (Ap und Dst), von Teilchenflüssen als auch von solarer Lyman α -Strahlung. In der gemittelten ΔNO_2 (Nacht)-Epoche ist der 27-Tage-Zyklus zwischen 46 km und 54 km erkennbar, wenn man Ereignisse für die SEA mit Hilfe des Ap Index, des Dst Index oder der solaren Lyman α -Strahlung definiert. Die Amplitude des Signals ist jeweils in vergleichbarer Größenordnung ($\sim 0,2$ ppb). Um den Einfluss der geomagnetischen Indizes unabhängig von solarer UV-Strahlung zu bestimmen wurde für die SEA ein Kriterium erstellt, das nur Ereignisse zulässt, an dem ΔAp einen hohen Wert annimmt, $\Delta\text{Ly}\alpha$ dagegen keinen großen Ausschlag aufweist. Die dadurch bestimmte gemittelte Epochen zeigen sowohl einen 27-Tage-Zyklus als auch eine signifikante Erhöhung an Tag 1 (bis zu 0,47 ppb in 48 km Höhe). Diese um einen Tag verzögerte Erhöhung stimmt sowohl mit Untersuchungen über die aurorale NO-Produktion überein (Solomon et al., 1999; Marsh et al., 2004) als auch mit mesosphärischer NO-Erhöhung durch Teilchenniederschlag (Newnham et al., 2011). Da der Einfluss der UV-Strahlung in dieser Analyse unterdrückt ist und der Einfluss des Ap Index ausschließlich in den geomagnetischen Breiten des äußeren Strahlungsgürtel nachweisbar ist, ist Teilchenniederschlag als Ursache der Variationen die wahrscheinlichste Möglichkeit. In Zukunft muss aber noch mit einem 3d Modell untersucht werden, wie groß der Einfluss der oftmals zeitgleichen auroralen NO-Produktion auf die NO-Photolyseraten in der mittleren Atmosphäre ist.

Mit Hilfe der gemittelten ΔNO_2 -Epochen wurde die höhenabhängige Lebensdauer τ von NO_x bestimmt. Mit τ und der gemittelten ΔAp -Epoche konnte eine Produktionsrate pr bestimmt werden, welche höhenabhängig angibt, wieviel NO_2 (in ppb) pro Tag und pro einer Ap-Einheit produziert wird. Maximale Werte liegen bei $0,029$ ppb $\text{Ap}^{-1} \text{d}^{-1}$ in 48 km und 50 km Höhe. Die Ursache, wieso pr ab 52 km Höhe wieder abnimmt, hat verschiedene Gründe. i) Eine NO_x -Lebensdauer von $\tau < 1\text{d}$ führt dazu, dass Tagesmittel zur Analyse immer ungeeigneter werden. ii) Ein mit der Höhe kleiner werdendes NO_2/NO_x -Verhältnis bei 22 Uhr Lokalzeit im Sommer verringert das NO_2 -Signal. iii) Die effektive NO_x -Produktion, die vor allem durch temperaturabhängige Reaktionen bestimmt wird, hat ihren maximalen Wert unterhalb von 52 km.

8. Zusammenfassung und Ausblick

Die Aufgabe dieser Arbeit war es, nach Auswirkungen solarer Variabilität, insbesondere nach Auswirkungen des Teilchenniederschlags auf NO_x in der oberen Stratosphäre und unteren Mesosphäre mit Hilfe der MIPAS-Daten zu suchen. Als Ausgangspunkt wurden Fragestellungen zu folgenden drei verschiedenen Themengebieten angegangen:

1. Weiterentwicklung des NO-Retrievals der MIPAS Spektren des UA Modus (Kapitel 5.3.1).
2. Bestimmung der Lebenszeit und der Produktionsrate von NO_x während des solaren Protonenereignisses (SPE) im Oktober-November 2003 und danach (Kapitel 6).
3. Auswirkungen von Elektronenniederschlag während des solaren Minimums von 2007-2011 auf NO und NO_2 (Kapitel 7).

Im ersten Themenbereich wurde mit Hilfe von MIPAS-Messungen das Tag-Nacht-Verhältnis des NO-Höhenprofils in der Thermosphäre bestimmt und durch eine Polynomfunktion beschrieben, die von der geomagnetischen Breite, von der geographischen Breite, von der Höhe, vom Ap Index und vom Datum abhängig ist. Mit Hilfe dieser Funktion konnte das a priori Höhenprofil von NO in der Nacht verbessert werden. Das a priori Profil regularisiert das ausgewertete NO-Höhenprofil und hat somit Einfluss auf die Güte des ausgewerteten NO-Volumenmischungsverhältnisses (VMR). Durch die Anwendung der in dieser Arbeit bestimmten Funktion konnte somit die Güte der Auswertung deutlich verbessert werden. Es traten höhen- und breitenabhängige Veränderungen des resultierenden NO(Nacht)-VMRs in den Daten der Thermosphäre von bis zu $\pm 30\%$ auf. Der MIPAS UA-Datensatz wurde inzwischen mit dem modifizierten Retrieval neu ausgewertet. Die neu bestimmten Daten werden in zukünftigen Studien der Thermosphäre wie z.B. der HEPPA II Studie verwendet.

Im zweiten Themenbereich wurden die MIPAS-Daten von NO_x während des SPEs im Oktober-November 2003 analysiert und mit der von AIMOS berechneten Ionenpaarproduktion verglichen. Die aktuellen 3d Chemietransportmodelle überschätzen die NO_x -Produktion in der oberen Stratosphäre und unteren Mesosphäre bei solch einem Ereignis, wenn man sie mit Messungen vergleicht. Daher war es das Ziel, die NO_x -Produktionsrate, die in diesen Modellen verwendet wird, anhand der MIPAS-Messungen zu überprüfen. Dafür wurde eine neue Methode entwickelt, die unter Berücksichtigung der NO_x -Lebensdauer und der Ionenpaarproduktion die NO_x -Produktionsrate berechnen kann. Dafür war es notwendig, zuerst die höhenabhängige NO_x -Lebensdauer zum Zeitpunkt des SPEs aus den Messungen zu bestimmen. Anschließend konnte gezeigt werden, dass diese neue Methode zur Berechnung der NO_x -Produktionsrate qualitativ gut

funktioniert. Dennoch konnte keine belastbare quantitative Bestimmung vorgenommen werden, da die Teilchenflussmessungen, auf denen die berechnete Ionenpaarproduktion basiert, zu Zeiten eines SPE erheblich kontaminiert sind. Es wurde aber auch gezeigt, dass dies nicht der einzige Fehler sein kann, sodass in Zukunft auch weiterhin die Ionisationsraten, die NO_x -Produktionsraten oder auch das $\text{N}(^4\text{S})/\text{N}(^2\text{D})$ -Verzweigungsverhältnis der NO_x -Produktion als Fehlerquellen angesehen werden sollten. Diese Arbeit wurde in ACP veröffentlicht (Anhang A).

Im dritten Themenbereich wurden die MIPAS-Daten von NO und NO_2 während des solaren Minimums von 2007 bis 2011 bis 62 km Höhe untersucht. Es stellte sich heraus, dass das Signal von thermosphärischem NO in die Mesosphäre gefaltet wird und damit eine Analyse von möglichen Auswirkungen solarer Variabilität auf mesosphärisches NO unmöglich ist. Da in der Thermosphäre kein NO_2 vorliegt und NO_x während der Nacht in der unteren Mesosphäre und oberen Stratosphäre hauptsächlich in Form von NO_2 vorkommt, konzentrierte sich dieser Teil der Arbeit also auf die Analyse der $\text{NO}_2(\text{Nacht})$ -Daten. Eine Korrelation zwischen diesen Daten und den geomagnetischen Ap - und Dst -Indizes konnte in den nördlichen geomagnetischen Breiten der äußeren Strahlungsgürtel in 46 km bis 52 km Höhe beobachtet werden. Weiterhin konnte in den $\text{NO}_2(\text{Nacht})$ -Daten der 27-Tage-Zyklus gefunden werden, was auf einen solaren Einfluss hinweist. Sowohl die Korrelation mit den geomagnetischen Indizes als auch der 27-Tage-Zyklus wurden für NO_2 das erste Mal in diesen Höhen nachgewiesen. Ein Vergleich mit Teilchenflussmessungen zeigte, dass sich in denselben geomagnetischen Breiten das VMR von $\text{NO}_2(\text{Nacht})$ oberhalb 50 km erhöht, wenn der Teilchenfluss zunimmt. Eine signifikante Korrelation zwischen Teilchenfluss und $\text{NO}_2(\text{Nacht})$ konnte aber nicht festgestellt werden. Der Vergleich mit solarer Lyman α -Strahlung zeigte, dass das VMR von $\text{NO}_2(\text{Nacht})$ mit solarer UV-Strahlung korreliert. Dies kann verschiedene Ursachen haben, da UV-Strahlung Auswirkung auf die lokale Temperatur, das Ozon-VMR und die NO -Säulendichte haben kann und somit auf die NO -Photolyseraten, das NO_2/NO_x -Verhältnis und das NO_x -VMR. Tage mit großen Schwankungen in der solaren Lyman α -Strahlung wurden daher in einem weiteren Vergleich der $\text{NO}_2(\text{Nacht})$ -Messungen mit dem Ap -Index herausgefiltert. Ein Korrelationskoeffizient zwischen ΔAp und ΔNO_2 von $r > 0,6$ konnte in 48 km Höhe ermittelt werden. Folgende Ergebnisse dieser Arbeit sprechen also für die Auswirkung von Teilchenniederschlag auf NO_x in der unteren Mesosphäre:

- Es existiert eine Korrelation zwischen dem Ap Index und $\text{NO}_2(\text{Nacht})$, die unabhängig von der solaren UV-Strahlung ist.
- Diese Korrelation zeigt sich ausschließlich in den geomagnetischen Breiten des äußeren Strahlungsgürtels.
- Vergleiche mit Teilchenflussmessungen legen ebenfalls nahe, dass NO_x bei erhöhtem Teilchenfluss in der unteren Mesosphäre produziert wird.

Eine Auswirkung von Elektronenniederschlag wurde für NO_2 in diesen Höhen zum ersten Mal nachgewiesen. Unterhalb 50 km wurde diese Auswirkung für Spurengase im Allgemeinen zum ersten Mal nachgewiesen. Es wurden NO_x -Produktionsraten mit Hilfe der

8. Zusammenfassung und Ausblick

Methode ermittelt, die im zweiten Themenbereich entwickelt wurde. Die lokalen Auswirkungen der Variabilität des Ap Index auf NO_2 wurden bei ACP eingereicht und sind bereits in der Diskussionsphase in ACPD (Anhang A).

Offene Fragen und die nächsten Schritten zu deren Beantwortung sind:

- Wie wirkt sich die solare Aktivität auf NO_x oberhalb von 60 km aus?
Diese Höhen liegen oberhalb des nominellen MIPAS-Datensatzes. Deshalb benötigt man zur Beantwortung der Frage weitere NO-Datensätze. Ein NO-Retrieval für SCIAMACHY/ENVISAT-Spektren wurde entwickelt (Bender et al., 2013), sodass NO oberhalb 65 km ausgewertet und anschließend analysiert werden kann. Für die Analyse der Höhen zwischen 60 km und 70 km benötigt man andere Datensätze, die es mit der von MIPAS erreichten zeitlichen und räumlichen Auflösung im Moment nicht gibt.
- Wie wirkt sich die solare Aktivität auf die Temperatur, auf O_3 , auf die NO-Säulendichte und auf die NO-Photolyseraten in der Stratosphäre aus? Welche Prozesse spielen dabei eine Rolle?
Für die Analyse können MIPAS-Daten der Temperatur und Ozon verwendet werden. Mit einem dreidimensionalen Chemietransportmodell können die Auswirkungen getestet werden. Zusätzlich kann die von der Sonnenaktivität abhängige NO-Säulendichte, die davon abhängige NO-Photolyse und ihre Auswirkung auf das NO_x -VMR in der mittleren Atmosphäre modelliert werden. Dazu benötigt es von der Sonnenaktivität abhängige Sonnenspektren und ein geeignetes Photolysemodul im Modell.
- Wie wirken sich die ermittelten NO_x -Produktionsraten auf die anderen Spurengase der mittleren Atmosphäre aus?
Die ermittelte vom Ap Index abhängige NO_x -Produktion kann als zusätzliche NO_x -Quelle in ein 3dCTM eingefügt werden. Die Auswirkungen auf Ozon und damit auf Strahlungsheiz- und Kühlraten können damit untersucht werden. Auch Auswirkungen auf andere Spurengase können damit untersucht werden. So kann die Frage nach der Relevanz der NO_x -Produktion durch Teilchenniederschlag in diesen Höhen beantwortet werden.

Die Untersuchungen mit Hilfe globaler Modelle liegen außerhalb des Rahmens dieser Arbeit, werden aber in Zukunft in der Arbeitsgruppe „Solare Variabilität, Klima und Rolle der Mesosphäre/unteren Thermosphäre“ am IMK-ASF durchgeführt.

A. Veröffentlichungen und Präsentationen

Im Zuge dieser Arbeit wurden folgende Veröffentlichungen und Präsentationen angefertigt:

Begutachtete Veröffentlichungen

F. Friederich, T. von Clarmann, B. Funke, H. Nieder, J. Orphal, M. Sinnhuber, G. P. Stiller, und J. M. Wissing. Lifetime and production rate of NO_x in the upper stratosphere and lower mesosphere in the polar spring/summer after the solar proton event in October-November 2003. *Atmos. Chem. Phys.*, 13, 2531–2539, 2013.

F. Friederich, M. Sinnhuber, B. Funke, T. von Clarmann, und J. Orphal. Local impact of solar variation on NO_2 in the lower mesosphere and upper stratosphere from 2007 to 2012. *Atmos. Chem. Phys.*, 14, 4055–4064, 2014.

Buchkapitel

M. Kiefer, F. Friederich, B. Funke, A. Linden, M. López-Puertas, und T. von Clarmann. Global Long-Term MIPAS Data Processing. In W.E. Nagel et al. (Editoren), *High Performance Computing in Science and Engineering '13*, Springer-Verlag, 2013.

Vorträge

Höhenabhängige Produktion und Lebenszeit von NO_x während des SPEs im Oktober/November 2003 in 44-62 km Höhe, *Institutsseminar des IMK-ASF*, Karlsruhe, 2011.

Altitude-dependent production and lifetime of NO_x during the solar proton event in Oct./Nov. 2003 at 44-62 km, *European Research Course on Atmospheres*, Grenoble, 2012.

Altitude-dependent production and lifetime of NO_x during the SPE in October/November 2003 at 44-62 km, *Frühjahrstagung der Deutschen Physikalischen Gesellschaft*, Stuttgart, 2012.

A. Veröffentlichungen und Präsentationen

Influence of extraterrestrial charged particles onto the Earth's middle atmosphere based on MIPAS/ENVISAT data, *Graduate School for Climate and Environment: Signals, Sensors and Remote Sensing*, 2012.

Searching for lower mesospheric NO_x production due to electron precipitation during 2008, *MIPAS Data User Meeting*, Karlsruhe, 2012.

Influence of extraterrestrial charged particles onto the Earth's middle atmosphere based on MIPAS/ENVISAT data, *Graduate School for Climate and Environment: Atmospheric Chemistry and Climate Change*, 2013.

Helmholtz Young Investigators Group: Solar variability, climate, and the role of the mesosphere / lower thermosphere, *Kurzvortrag anlässlich des Besuchs von Prof. Ravishankara (NOAA, Boulder, Colorado)*, Karlsruhe, 2013.

Mesosphärische NO₂ Produktion durch Elektronenniederschlag von 2007 – 2011, *Frühjahrstagung der Deutschen Physikalischen Gesellschaft*, Jena, 2013.

Mesospheric NO₂ production due to electron precipitation from 2007 – 2011, *European Geosciences Union General Assembly*, Wien, 2013.

Local impact of solar variation on NO₂ in the lower mesosphere and upper stratosphere from 2007-2011, *Institutseminar des IMK-ASF*, Karlsruhe, 2013.

Poster

NO_x abundances in the middle atmosphere in 2002 – 2010, *High Energy Particle Precipitation in the Atmosphere Meeting*, Granada, 2011.

Altitude-dependent production and lifetime of NO_x during the solar proton event in Oct./Nov. 2003 at 44-62 km, *European Research Course on Atmospheres*, Grenoble, 2012.

Searching for lower mesospheric NO_x production due to electron precipitation during 2008, *High Energy Particle Precipitation in the Atmosphere Meeting*, Boulder, 2012.

Helmholtz Young Investigators Group: Solar variability, climate, and the role of the mesosphere / lower thermosphere, *Begutachtung zur Programmorientierten Förderung II*, Karlsruhe, 2013.

Literaturverzeichnis

- J. H. Allen. Some commonly used magnetic activity indices: their derivation, meaning and use. In J. A. C. Joselyn, editor, *Proceedings of a Workshop on Satellite Drag*, 114–134, 1982.
- M. E. Andersson, P. T. Verronen, S. Wang, C. J. Rodger, M. A. Clilverd, und B. R. Carson. Precipitating radiation belt electrons and enhancements of mesospheric hydroxyl during 2004–2009. *J. Geophys. Res.*, 117, D09304, 2012.
- C. A. Barth, K. D. Mankoff, S. M. Bailey, und S. C. Solomon. Global observations of nitric oxide in the thermosphere. *J. Geophys. Res.*, 108, A1, 1027, 2003.
- A. J. G. Baumgaertner, P. Jöckel, H. Riede, G. Stiller, und B. Funke. Energetic particle precipitation in ECHAM5/MESSy – Part2. *Atmos. Chem. Phys.*, 10, 7285–7302, 2010. doi: 10.5194/acp-10-7285-2010.
- S. Bender, M. Sinnhuber, J. P. Burrows, M. Langowski, B. Funke, und M. López-Puertas. Retrieval of nitric oxide in the mesosphere and lower thermosphere from SCIAMACHY limb spectra. *Atmos. Meas. Tech.*, 6, 2521–2531, 2013. doi: 10.5194/amt-6-2521-2013.
- M. J. Berger, S. M. Seltzer, und K. Maeda. Energy deposition by auroral electrons in the atmosphere. *J. Atmos. Terr. Phys.*, 32, 1015–1045, 1970.
- U. Berger. Modeling of middle atmosphere dynamics with LIMA. *J. Atmos. Sol.-Terr. Phys.*, 70, 1170–1200, 2008.
- D. Bermejo-Pantaleón. *Nitric Oxide and Temperature in the Thermosphere: MIPAS observations*. PhD dissertation, Universidad de Granada, Instituto de Astrofísica de Andalucía, 2011.
- D. Bermejo-Pantaleón, B. Funke, M. López-Puertas, M. Garcia-Comas, G. P. Stiller, T. von Clarmann, A. Linden, U. Grabowski, M. Höpfner, M. Kiefer, N. Glatthor, S. Kellmann, und G. Lu. Global observations of thermospheric temperature and nitric oxide from MIPAS spectra at $5.3\ \mu\text{m}$. *J. Geophys. Res.*, 116, A10313, 2011.
- N. Blomqvist. On a measure of dependence between two random variables. *Ann. Math. Statist.*, 21, 593–601, 1950.
- G. P. Brasseur und S. Salomon. *Aeronomy of the Middle Atmosphere: Chemistry and Physics of the Stratosphere and Mesosphere*. Springer-Verlag, third edition, 2005.

- K. Chance und R. L. Kurucz. An improved high-resolution solar spectrum for earth's atmosphere measurements in the ultraviolet, visible, and near infrared. *J. Quant. Spec. Rad. Trans.*, 111, 1289–1295, 2010. doi: 10.1016/j.jqsrt.2010.01.036.
- S. Chapman. A Theory of Upper-atmospheric Ozone. *Memoires of the Royal Meteorological Society*, 3, 26, 1930. doi: 10.1016/j.jqsrt.2010.01.036.
- C. Chree. Some Phenomena of Sunspots and of Terrestrial Magnetism at Kew Observatoy. *Philosophical Transactions of the Royal Society of London*, 212, 75–116, 1913.
- M. A. Clilverd, A. Seppälä, C. J. Rodger, M. G. Mlynczak, und J. U. Kozyra. Additional stratospheric NO_x production by relativistic electron precipitation during the 2004 spring NO_x descent event. *J. Geophys. Res.*, 114, A04305, 2009. doi: 10.1029/2008JA013472.
- A. Damiani, B. Funke, D. R. Marsh, M. López-Puertas, M. L. Santee, L. Froidevaux, S. Wang, C. H. Jackman, T. von Clarmann, A. Gardini, R. R. Cordero, und M. Storini. Impact of January 2005 solar proton events on chlorine species. *Atmos. Chem. Phys.*, 12, 4159–4179, 2012. doi: 10.5194/acp-12-4159-2012.
- S. C. Solomon et al. The Student Nitric Oxide Explorer. In *Space Sciencecraft Control and Tracking in the New Millenium*, SPIE, 1–12, 1996.
- H. Fischer, M. Birk, C. Blom, B. Carli, M. Carlotti, T. von Clarmann, L. Delbouille, A. Dudhia, D. Ehhalt, M. Endemann, J. M. Flaud, R. Gessner, A. Kleinert, R. Koopman, J. Langen, M. López-Puertas, P. Mosner, H. Nett, H. Oelhaf, G. Perron, J. Remedios, M. Ridolfi, G. Stiller, und R. Zander. MIPAS: an instrument for atmospheric and climate research. *Atmos. Chem. Phys.*, 13, 2151–2188, 2008.
- B. Funke, M. López-Puertas, T. von Clarmann, G. P. Stiller, H. Fischer, N. Glatthor, U. Grabowski, M. Höpfner, S. Kellmann, M. Kiefer, A. Linden, G. Mengistu Tsidu, M. Milz, T. Steck, und D. Y. Wang. Retrieval of stratospheric NO_x from 5.3 and 6.2 μm nonlocal thermodynamic equilibrium emissions measured by Michelson Interferometer for Passive Atmospheric Sounding (MIPAS) on Envisat. *J. Geophys. Res.*, 110, D09302, 2005.
- B. Funke, M. López-Puertas, H. Fischer, G. P. Stiller, T. von Clarmann, G. Wetzel, B. Carli, und C. Belotti. Comment on „Origin of the January – April 2004 increase in stratospheric NO₂ observed in the northern polar latitudes“. *Geophys. Res. Lett.*, 34, L07813, 2007. doi: 10.1029/2006GL027518.
- B. Funke, M. García-Comas, M. López-Puertas, N. Glatthor, G. P. Stiller, T. von Clarmann, K. Semeniuk, und J. C. McConnell. Enhancements of N₂O during the October–November 2003 solar proton event. *Atmos. Chem. Phys.*, 8, 3805–3815, 2008.
- B. Funke, A. Baumgaertner, M. Calisto, T. Egorova, C. H. Jackman, J. Kieser, A. Kriolovsky, M. López-Puertas, D. R. Marsh, T. Reddmann, E. Rozanov, S.-M. Salmi,

- M. Sinnhuber, G. P. Stiller, P. T. Verronen, S. Versick, T. von Clarmann, T. Y. Vyushkova, N. Wieters, und J. M. Wissing. Composition changes after the "Halloween" solar proton event: the High Energy Particle Precipitation in the Atmosphere (HEPPA) model versus MIPAS data intercomparison study. *Atmos. Chem. Phys.*, 11, 17, 9089–9139, 2011. doi: 10.5194/acp-11-9089-2011.
- B. Funke, M. López-Puertas, M. García-Comas, M. Kaufmann, M. Höpfner, und G. P. Stiller. GRANADA: A Generic RAdiative traNsfer AnD non-LTE popolation Algorithm. *J. Quant. Spec. Rad. Trans.*, 113, 1771–1817, 2012.
- A. N. Gruzdev, H. Schmidt, und G. P. Brasseur. The effect of the solar rotational irradiance variation on the middle and upper atmosphere calculated by a three-dimensional chemistry-climate model. *Atmos. Chem. Phys.*, 9, 595–614, 2009. doi: 10.5194/acp-9-595-2009.
- G. Haerendel. Six auroral generators: A review. *J. Geophys. Res.*, 116, A00K05, 2011. doi: 10.1029/2010JA016425.
- A. Hauchercorne, J. L. Bertaux, F. Dalaudier, P. Keckut, P. Lemennais, S. Bekki, M. Marchand, J. C. Lebrun, E. Kyrölä, J. Tamminen, V. Sofieva, D. Fussen, F. Vanhellemont, O. Fanton d'Andon, G. Barrot, L. Blanot, T. Fehr, und L. Saavedra de Miguel. Response of tropical stratospheric O₃, NO₂ and NO₃ to the equatorial Quasi-Biennial Oscillation and to temperature from GOMOS/ENVISAT. *Atmos. Chem. Phys.*, 10, 8873–8879, 2010. doi: 10.5194/acp-10-8873-2010.
- I. V. Hertel und C.-P. Schulz. *Atome, Moleküle und optische Physik 1*. Springer-Verlag, first edition, 2008. doi: 10.1007/978-3-540-30617-7.
- I. V. Hertel und C.-P. Schulz. *Atome, Moleküle und optische Physik 2*. Springer-Verlag, first edition, 2010. doi: 10.1007/978-3-642-11973-6.
- M. Höpfner, J. Orphal, T. von Clarmann, G. Stiller, und H. Fischer. Stratospheric BrONO₂ observed by MIPAS. *Atmos. Chem. Phys.*, 9, 1735–1746, 2009. doi: 10.5194/acp-9-1735-2009.
- M. Höpfner, N. Glatthor, U. Grabowski, S. Kellmann, M. Kiefer, A. Linden, J. Orphal, G. Stiller, T. von Clarmann, B. Funke, und C. D. Boone. Sulfur dioxide (SO₂) as observed by MIPAS/Envisat: temporal development and spatial distribution at 15–45 km altitude. *Atmos. Chem. Phys.*, 13, 10405–10423, 2013. doi: 10.5194/acp-13-10405-2013.
- C. H. Jackman, M. T. DeLand, G. J. Labow, E. L. Fleming, D. K. Weisenstein, M. K. W. Ko, M. Sinnhuber, und J. M. Russell. Neutral atmospheric influences of the solar proton events in October–November 2003. *J. Geophys. Res.*, 110, A09S27, 2005. doi: 10.1029/2004JA010888.

- C. H. Jackman, R. G. Roble, und E. L. Fleming. Mesospheric dynamical changes induced by the solar proton events in October–November 2003. *Geophys. Res. Lett.*, 34, 2007. doi: 10.1029/2006GL028328.
- C. H. Jackman, D. R. Marsh, F. M. Vitt, R. G. Roble, C. E. Randall, P. F. Bernath, B. Funke, M. López-Puertas, S. Versick, G. P. Stiller, A. J. Tytko, und E. L. Fleming. Northern Hemisphere atmospheric influence of the solar proton events and ground level enhancements in January 2005. *Atmos. Chem. Phys.*, 11, 2011. doi: 10.5194/acp-11-6153-2011.
- M.-B. Kallenrode. *Space Physics: an Introduction to Plasmas and Particles in the Heliosphere and Magnetospheres*. Springer-Verlag, third edition, 2010.
- J. A. Kaye und J. B. Kurner. Nonlocal thermodynamic equilibrium effects in stratospheric NO and implications for infrared remote sensing. *Appl. Opt.*, 26, 22, 4747–4754, 1987.
- G. M. Keating, J. Nicholson III, G. Brasseur, A. De Rudder, U. Schmaizl, und M. Pitts. Detection of stratospheric HNO₃ and NO₂ response to short-term solar ultraviolet variability. *Nature*, 322, 43–46, 1986.
- M. G. Kivelson und C. T. Russell. *Introduction to Space Physics*. Cambridge University Press, 1995.
- A. Kleinert, G. Aubertin, G. Perron, M. Birk, G. Wagner, F. Hase, H. Nett, und R. Poulin. MIPAS Level 1B algorithms overview: operational processing and characterization. *Atmos. Chem. Phys.*, 7, 1395–1406, 2007.
- J. L. Lean. Short term, direct indices of solar variability. *Space Sci. Rev.*, 94, 39–51, 2000.
- M. López-Puertas, B. Funke, T. von Clarmann, G. P. Stiller, M. Höpfner, S. Kellmann, M. Mengistu Tsidu, H. Fischer, und C. H. Jackman. HNO₃, N₂O₅ and ClONO₂ enhancements after October–November 2003 solar proton events. *J. Geophys. Res.*, 110, 2005. doi: 10.1029/2005JA011051.
- M. López-Puertas, J.-M. Flaud, J. Peralta-Calvillo, B. Funke, und S. Gil-López. NO⁺ fundamental and first hot ro-vibrational line frequencies from MIPAS/Envisat atmospheric spectra. *J. Mol. Spec.*, 237, 218–224, 2006. doi: 10.1016/j.jms.2006.03.015.
- D. R. Marsh, S. C. Solomon, und A. E. Reynolds. Empirical model of nitric oxide in the lower thermosphere. *J. Geophys. Res.*, 109, A07301, 2004. doi: 10.1029/2003JA010199.
- D. R. Marsh, R. R. Garcia, D. E. Kinnison, B. A. Boville, F. Sassi, S. C. Solomon, und K. Matthes. Modeling the whole atmosphere response to solar cycle changes in radiative and geomagnetic forcing. *J. Geophys. Res.*, 112, D23306, 2007. doi: 10.1029/2006JD008306.

- G. Mengistu Tsidu, T. von Clarmann, G. P. Stiller, M. Höpfner, H. Fischer, N. Glatthor, U. Grabowski, S. Kellmann, M. Kiefer, A. Linden, M. Milz, T. Steck, D.-Y. Wang, und B. Funke. Stratospheric N_2O_5 in the austral spring 2002 as retrieved from limb emission spectra recorded by the Michelson Interferometer for Passive Atmospheric Sounding (MIPAS). *J. Geophys. Res.*, 109, D18301, 2004. doi: 10.1029/2004JD004856.
- M. Menvielle und A. Berthelier. The k-derived planetary indices: description and availability. *Rev. Geophys.*, 29, 3, 415–432, 1991. doi: 10.1029/91RG00994.
- R. M. Millan und R. M. Thorne. Review of radiation belt relativistic electron losses. *J. Atmos. Sol.-Terr. Phys.*, 69, 362–377, 2007. doi: 10.1016/j.jastp.2006.06.019.
- K. Minschwaner und D. E. Siskind. A New Calculation of Nitric Oxide Photolysis in the Stratosphere, Mesosphere, and Lower Thermosphere. *J. Geophys. Res.*, 98, 20401–20412, 1993.
- D. A. Newnham, P. J. Espy, M. A. Clilverd, C. J. Rodger, A. Seppälä, D. J. Maxfield, P. Hartogh, K. Holmen, und R. B. Home. Direct observation of nitric oxide produced by energetic electron precipitation into the Antarctic middle atmosphere. *Geophys. Res. Lett.*, 38, L20104, 2011. doi: 10.1029/2011GL048666.
- J. M. Picone, A. E. Hedin, und D. B. Drob. NRLMSISE-00 empirical model of the atmosphere: Statistical comparison and scientific issues. *J. Geophys. Res.*, 107, A12, 1468, 2002.
- H. S. Porter, C. H. Jackman, und A. E. S. Green. Efficiencies for production of atomic nitrogen and oxygen by relativistic proton impact in air. *J. Chem. Phys.*, 65, 1, 154–167, 1976.
- C. E. Randall, D. W. Rusch, R. M. Bevilacqua, K. W. Hoppel, und J. D. Lumpe. Polar Ozone and Aerosol Measurement (POAM) II stratospheric NO_2 , 1993-1996. *J. Geophys. Res.*, 103, D21, 28361–28371, 1998.
- C. E. Randall, V. L. Harvey, C. S. Singleton, S. M. Bailey, P. F. Bernath, M. Codrescu, H. Nakajima, und J. M. Russell III. Energetic particle precipitation effects on the Southern Hemisphere stratosphere in 1992-2005. *J. Geophys. Res.*, 112, D8, 2007. doi: 10.1029/2006JD007696.
- J.-B. Renard, P.-L. Blelly, Q. Bourgeois, M. Chartier, F. Goutail, und Y. J. Orsolini. Origin of the January – April 2004 increase in stratospheric NO_2 observed in the northern polar latitudes. *Geophys. Res. Lett.*, 33, L11801, 2006. doi: 10.1029/2005GL025450.
- H. E. Revercomb, H. Buijs, H. B. Howell, D. D. LaPorte, W. L. Smith, und L. Sromovsky. Radiometric calibration of IR Fourier transform spectrometers, solution to a problem with the High-Resolution Interferometer Sounder. *Appl. Opt.*, 27, 3210–3218, 1988.
- C. D. Rodgers. *Inverse Methods for Atmospheric Sounding: Theory and Practice*, volume 2 of *Ser. Atmos. Oceanic Phys.* World Sci., 2000.

- W. Roedel und T. Wagner. *Physik unserer Umwelt: Die Atmosphäre*. Springer-Verlag, fourth edition, 2011.
- L.S. Rothman, I.E. Gordon, Y. Babikov, A. Barbe, D. Chris Benner, P.F. Bernath, M. Birk, L. Bizzocchi, V. Boudon, L.R. Brown, A. Campargue, K. Chance, E.A. Cohen, L.H. Coudert, V.M. Devi, B.J. Drouin, A. Fayt, J.-M. Flaud, R.R. Gamache, J.J. Harrison, J.-M. Hartmann, C. Hill, J.T. Hodges, D. Jacquemart, A. Jolly, J. Lamouroux, R.J. Le Roy, G. Li, D.A. Long, O.M. Lyulin, C.J. Mackie, S.T. Massie, S. Mikhailenko, H.S.P. Muller, O.V. Naumenko, A.V. Nikitin, J. Orphal, V. Perevalov, A. Perrin, E.R. Polovtseva, C. Richard, M.A.H. Smith, E. Starikova, K. Sung, S. Tashkun, J. Tennyson, G.C. Toon, V.I.G. Tyuterev, und G. Wagner. The HITRAN 2012 molecular spectroscopic database. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 130, 4–50, 2013. ISSN 0022-4073. doi: 10.1016/j.jqsrt.2013.07.002.
- D. W. Rusch, J.C. Gerard, S. Solomon, P. J. Crutzen, und G.C. Reid. The effect of particle precipitation events on the neutral and ion chemistry of the middle atmosphere – I. odd nitrogen. *Planet. Space Sci.*, 29, 7, 767–774, 1981.
- J. M. Russell III, S. Solomon, L. L. Gordley, E. E. Remsberg, und L. B. Callis. The variability of stratospheric and mesospheric NO₂ in the polar winter night observed by LIMS. *J. Geophys. Res.*, 89, D5, 7267–7275, 1984. doi: 10.1029/JD089iD05p07267.
- S. P. Sander, R. R. Friedl, A. R. Ravishankara, D. M. Golden, C. E. Kolb, M. J. Kurylo, M. J. Molina, G. K. Moortgat, H. Keller-Rudek, B. J. Finlayson-Pitts, P. Wine, R. E. Huie, und V. L. Orkin. Chemical kinetics and Photochemical Data for the Use in Atmospheric Studies. JPL publication 06-2 15, Jet Propulsion Laboratory, California Institute of Technology, Pasadena, CA, 2006.
- A. Seppälä, P. T. Verronen, E. Kyrölä, S. Hassinen, L. Beckman, A. Hauchecorne, J. L. Bertaux, und D. Fussen. Solar proton events of October–November 2003: Ozone depletion in the Northern Hemisphere polar winter as seen by GOMOS/Envisat. *Geophys. Res. Lett.*, 31, L19107, 2004. doi: 10.1029/2004GL021042.
- A. Seppälä, M. A. Clilverd, und C. J. Rodger. NO_x enhancements in the middle atmosphere during 2003–2004 polar winter: Relative significance of solar proton events and the aurora as a source. *J. Geophys. Res.*, 112, D23303, 2007. doi: 10.1029/2006JD008326.
- A. Seppälä, C. E. Randall, M. A. Clilverd, E. Rozanov, und C. J. Rodger. Geomagnetic activity and polar surface air temperature variability. *J. Geophys. Res.*, 114, A10312, 2009. doi: 10.1029/2008JA014029.
- P. E. Sheese, R. L. Gattinger, E. J. Llewellyn, C. D. Boone, und K. Strong. Nighttime nitric oxide densities in the Southern Hemisphere mesosphere–lower thermosphere. *Geophys. Res. Lett.*, 38, L15812, 2011. doi: 10.1029/2011GL048054.

- P. E. Sheese, K. Strong, R. L. Gattinger, E. J. Llewellyn, J. Urban, C. D. Boone, and A. K. Smith. Odin observations of Antarctic nighttime NO densities in the mesosphere-lower thermosphere and observations of a lower NO layer. *J. Geophys. Res.*, 118, 7414–7425, 2013. doi: 10.1002/jgrd.50563.
- M. Sinnhuber, S. Kazeminejad, and J. M. Wissing. Interannual variation of NO_x from the lower thermosphere to the upper stratosphere in the years 1991–2005. *J. Geophys. Res.*, 116, A02312, 2011. doi: 10.1029/2010JA015825.
- M. Sinnhuber, H. Nieder, and N. Wieters. Energetic particle precipitation and the chemistry of the mesosphere / lower thermosphere. In E. Becker und M. Rycroft, editors, *Crucial Processes Acting in the Mesosphere*, volume 33 of *Surveys in Geophysics*. Springer-Verlag, 2012.
- M. Sinnhuber, B. Funke, T. von Clarmann, M. López-Puertas, und G. P. Stiller. Variability of NO_x in the polar middle atmosphere from October 2003 to March 2004: vertical transport versus local production by energetic particles. *Atmos. Chem. Phys. Disc.*, 14, 1–29, 2014. doi: 10.5194/acpd-14-1-2014.
- D. Siskind und J. M. Russell III. Coupling between middle and upper atmospheric NO: Constraints from HALOE observations. *Geophys. Res. Lett.*, 23, 2, 137–140, 1996.
- D. Siskind, C. A. Barth, und R. Roble. The response of thermospheric nitric oxide to an auroral storm, 2. Auroral latitudes. *J. Geophys. Res.*, 94, A12, 16899–16911, 1989. doi: 10.1002/jgrd.50563.
- S. Solomon, P. J. Crutzen, und R. G. Roble. Photochemical coupling between the thermosphere and the lower atmosphere: 1. Odd nitrogen from 50 to 120 km. *J. Geophys. Res.*, 87, C9, 7206–7220, 1982. doi: 10.1029/JC087iC09p07206.
- S. C. Solomon, C. A. Barth, und S. M. Bailey. The response of thermospheric nitric oxide measured by the SNOE satellite. *Geophys. Res. Lett.*, 26, 1259–1262, 1999.
- G. P. Stiller, editor. *The Karlsruhe Optimized and Precise Radiative Transfer Algorithm (KOPRA)*, volume FZKA 6487 of *Wissenschaftliche Berichte*. Forschungszentrum Karlsruhe, 2000.
- M. Sugiura und T. Kamei. Equatorial Dst index 1957–1986. In A. Berthelier und M. Menvielle, editors, *IAGA Bulletin*, volume 40. ISGI Publ. Off., 1991.
- A. Tikhonov. On the solution of incorrectly stated problems and method of regularization. *Dokl. Akad. Nauk. SSSR*, 151, 3, 501–504, 1963.
- M. Toohey und T. von Clarmann. Climatologies from satellite measurements: the impact of orbital sampling on the standard error of the mean. *Atmos. Meas. Tech.*, 6, 937–948, 2013. doi: 10.5194/amt-6-937-2013.

- E. Turunen, P. T. Verronen, A. Seppälä, C. J. Rodger, M. A. Clilverd, J. Tamminen, C.-F. Enell, und T. Ulich. Impact of different energies of precipitating particles on NO_x generation in the middle and upper atmosphere during geomagnetic storms. *J. Atmos. Sol. Terr. Phys.*, 71, 1176–1189, 2009. doi: 10.1016/j.jastp.2008.07.005.
- P. T. Verronen, A. Seppälä, E. Kyrölä, J. Tamminen, H. M. Picket, und E. Turunen. Production of odd hydrogen in the mesosphere during January 2005 solar proton event. *Geophys. Res. Lett.*, 33, 2006. doi: 10.1029/2006GL028115.
- P. T. Verronen, C. J. Rodger, M. A. Clilverd, und S. Wang. First evidence of mesospheric hydroxyl response to electron precipitation from the radiation belts. *J. Geophys. Res.*, 116, D07307, 2011a. doi: 10.1029/2010JD014965.
- P. T. Verronen, M. L. Santee, G. L. Manney, R. Lehmann, S.-M. Salmi, und A. Seppälä. Nitric acid enhancements in the mesosphere during the January 2005 and December 2006 solar proton events. *J. Geophys. Res.*, 116, D17301, 2011b. doi: 10.1029/2011JD016075.
- T. von Clarmann, N. Glatthor, U. Grabowski, M. Höpfner, S. Kellmann, M. Kiefer, A. Linden, G. M. Tsidu, M. Milz, T. Steck, G. P. Stiller, H. Fischer, B. Funke, S. Gil-López, und M. López-Puertas. Retrieval of temperature and tangent altitude pointing from limb emission spectra recorded from space by the Michelson Interferometer for Passive Atmospheric Sounding (MIPAS). *J. Geophys. Res.*, 108, D23, 2003. doi: 10.1029/2003JD003602.
- T. von Clarmann, N. Glatthor, M. Höpfner, S. Kellmann, R. Ruhnke, G. P. Stiller, H. Fischer, B. Funke, S. Gil-López, und M. López-Puertas. Experimental evidence of perturbed odd hydrogen and chlorine chemistry after the October 2003 solar proton events. *J. Geophys. Res.*, 110, A09S45, 2005. doi: 10.1029/2005JA011053.
- T. von Clarmann, B. Funke, M. López-Puertas, S. Kellmann, A. Linden, G. P. Stiller, C. H. Jackman, und V. L. Harvey. The solar proton events in 2012 as observed by MIPAS. *Geophys. Res. Lett.*, 40, 2339–2343, 2013. doi: 10.1002/grl50119.
- C. von Savigny, K. U. Eichmann, C. E. Robert, J. P. Burrows, und M. Weber. Sensitivity of equatorial mesopause temperatures to the 27-day solar cycle. *Geophys. Res. Lett.*, 39, L21804, 2012. doi: 10.1029/2012GL053565.
- H. von Storch und F. W. Zwiers. *Statistical Analysis in Climate Research*. Cambridge Univ. Press, 2001.
- H. Winkler, S. Kazeminejad, M. Sinnhuber, M.-B. Kallenrode, und J. Notholt. Conversion of mesospheric HCl into active chlorine during the solar proton event in July 2000 in the northern polar region. *J. Geophys. Res.*, 114, D00I03, 2009.
- J. M. Wissing und M.-B. Kallenrode. Atmospheric Ionization Module Osnabrück (AIMOS): A 3-D model to determine atmospheric ionization by energetic charged particles from different populations. *J. Geophys. Res.*, 114, A06104, 2009.

- T. N. Woods, W. K. Tobiska, G. J. Rottman, und J. R. Worden. Improved solar Lyman α irradiance modeling from 1947 through 1999 based on UARS observations. *J. Geophys. Res.*, 105, A12, 27195–27215, 2000.
- K. Yando, R. M. Millan, J. C. Green, und D. S. Evans. A Monte Carlo simulation of the NOAA POES Medium Energy Proton and Electron Detector instrument. *J. Geophys. Res.*, 116, A10231, 2011.

Danksagungen

Zum Schluss möchte ich mich noch bei den Personen bedanken, die mich im Laufe meiner Zeit als Doktorand am IMK-ASF unterstützt haben:

- **Prof. Dr. Johannes Orphal**
Für die Betreuung und die Möglichkeit, am IMK-ASF diese Arbeit erstellen zu dürfen, bedanke ich mich sehr herzlich.
- **Dr. Miriam Sinnhuber**
Für die Möglichkeit, in diesem faszinierenden Gebiet der Atmosphärenphysik diese Dissertation erstellen zu können, für die gesamte Betreuung während der letzten Jahre und für die immer sehr angenehme Arbeitsatmosphäre möchte ich mich sehr herzlich bedanken. Außerdem bedanke ich mich dafür, dass ich die Zeit bekommen habe, die weiteren Möglichkeiten für meine Ausbildung am KIT und außerhalb (GRACE, ERCA, ESADE) zu nutzen.
- **Dr. Bernd Funke**
Für die Betreuung am IAA in Granada und für die gesamte Hilfe und Mitarbeit während der letzten Jahre möchte ich mich herzlich bedanken.
- **Dr. Thomas von Clarmann und Dr. Gabriele Stiller**
Für die Beantwortung aller meiner Fragen und für die immer sehr hilfreichen Diskussionen und Vorschläge möchte ich mich herzlich bedanken.
- **Prof. Dr. Christian von Savigny**
Für die Betreuung im Zuge der GRACE-Lenkungsgruppe, die damit verbundenen Fahrten von Greifswald nach Karlsruhe und die hilfreichen Diskussionen möchte ich mich herzlich bedanken.
- **Kolleginnen und Kollegen**
Für die sehr gute Arbeitsatmosphäre im Stockwerk und im gesamten Institut möchte ich mich bedanken. Spezieller Dank gilt Alexey, Holger, Stefan, Felix und Wolfgang für ihre Hilfe und für zahlreiche Gespräche.
- **Familie**
Für die gesamte Unterstützung während der letzten Jahre bedanke ich mich sehr herzlich.