

# **Einfluss geomagnetischer Aktivität auf polares Ozon in der mittleren Atmosphäre**

---

---

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

genehmigte

DISSERTATION

von

Master of Science, Tilo Fytterer  
aus Cottbus

Tag der mündlichen Prüfung: 10.06.2016  
Referent: Prof. Dr. Johannes Orphal  
Korreferent: Priv.-Doz. Dr. Michael Höpfner

## Zusammenfassung

Durch Störungen im terrestrischen Magnetfeld (geomagnetische Aktivität) können geladene Teilchen (hauptsächlich Elektronen und Protonen) in die Erdatmosphäre eindringen. Die genaue Eindringtiefe dieser sogenannten präzipitierenden Teilchen hängt in erster Linie von ihrer Energie ab. Der Fokus dieser Arbeit liegt vor allem auf Teilchen, welche bis in die obere Mesosphäre und untere Thermosphäre (70-130 km) gelangen können. Dort initialisieren sie eine Reihe von komplexen Ionenchemiereaktionen, wodurch es letztlich zur Bildung von reaktiven Stickstoff- ( $\text{NO}_x = \text{N} + \text{NO} + \text{NO}_2$ ) und Wasserstoffverbindungen ( $\text{HO}_x = \text{H} + \text{OH} + \text{HO}_2$ ) kommt. Sowohl  $\text{NO}_x$  als auch  $\text{HO}_x$  verursachen einen katalytischen Abbau von Ozon ( $\text{O}_3$ ). Dabei dominiert der Einfluss von  $\text{NO}_x$  in der Stratosphäre auf saisonalen Zeitskalen, während  $\text{HO}_x$  in der Mesosphäre in Zeiträumen von wenigen Tagen von größerer Bedeutung ist. Die Ozonverluste können sich wiederum auf die Temperatur und den thermisch balancierten Wind auswirken.

In Abwesenheit solarer Strahlung weist  $\text{NO}_x$  eine chemische Lebensdauer von bis zu mehreren Monaten auf. Somit kann  $\text{NO}_x$  im polaren Winter mit der Hintergrundzirkulation bis hinunter in die untere Stratosphäre ( $\approx 20$  km) transportiert werden, wobei es beim Absinken zum katalytischen Ozonabbau beiträgt. Für diesen sogenannten indirekten Teilcheneffekt konnten in dieser Arbeit zum ersten Mal belastbare Hinweise präsentiert werden. So zeigen Langzeitmessungen (2005-2010) von drei unabhängigen Satelliteninstrumenten ein Absinken von signifikanten Ozonverlusten innerhalb des antarktischen Polarwirbels im Zusammenhang mit geomagnetischer Aktivität. Dabei treten Ozonabnahmen von durchschnittlich 5-10% im Bezug zum Ozonhintergrund auf.

Die chemische Lebensdauer von  $\text{HO}_x$  liegt in der oberen Mesosphäre (70-90 km) in der Regel bei unter einem Tag, weshalb es nur zum lokalen Ozonabbau beiträgt. Die hier analysierten Satellitendaten in hohen Breiten zeigen ein 27-Tage-Signal in winterlichen  $\text{O}_3$ - und OH-Messungen, was vermutlich auf präzipitierende Teilchen zurückzuführen ist. Außerdem deuten die Beobachtungen auf einen nicht linearen Zusammenhang beider Spezies hin. Weitere Untersuchungen von Modelldaten bestätigen diese Ergebnisse qualitativ und liefern zusätzliche Hinweise auf einen wesentlichen Einfluss der atmosphärischen Dynamik auf die Stärke der Ozonvariationen. Dies gilt vermutlich auch für Beobachtungen, weshalb besonders Ozonvariationen nach einzelnen Teilchenereignissen kritisch betrachtet werden sollten.

## Summary

Precipitating particles (mainly electrons and protons) can enter the atmosphere due to disturbances in the Earth's magnetic field (geomagnetic activity). The focus of this study is set on particles, which travel down to the upper mesosphere and lower thermosphere (70-130 km). In these regions, the particles initialize complex ion-chemistry reactions, eventually leading to the formation of odd nitrogen ( $\text{NO}_x = \text{N} + \text{NO} + \text{NO}_2$ ) and odd hydrogen ( $\text{HO}_x = \text{H} + \text{OH} + \text{HO}_2$ ). Both  $\text{NO}_x$  and  $\text{HO}_x$  contribute to the catalytic ozone ( $\text{O}_3$ ) depletion. The influence of  $\text{NO}_x$  dominates in the stratosphere on seasonal time scales while  $\text{HO}_x$  is more important for short-term  $\text{O}_3$  variations in the mesosphere. Perturbations in  $\text{O}_3$  can in turn also affect the temperature and the thermally balanced zonal wind.

Since the chemical life-time of  $\text{NO}_x$  is relatively long during polar night (~months),  $\text{NO}_x$  can be transported down to the lower stratosphere (~20 km) by the background circulation during polar winter. Here,  $\text{NO}_x$  causes catalytic  $\text{O}_3$  depletion and this study revealed the first observational evidence for this so called energetic particle precipitation indirect effect. Long-term measurements from 2005 to 2010 of three independent satellite instruments show a significant  $\text{O}_3$  loss associated with geomagnetic activity. The  $\text{O}_3$  depletion is on an average 5 to 10% with respect to the  $\text{O}_3$  background and propagates downward inside the Antarctic polar vortex.

The chemical life-time of  $\text{HO}_x$  species in the upper mesosphere (70-90 km) is usually less than one day. Therefore,  $\text{HO}_x$  is only related to local and short-term  $\text{O}_3$  depletion. The analyzed satellite data at high latitudes show a distinct 27 day signal in  $\text{O}_3$  and OH during winter associated with particle precipitation. The observations also indicate a non-linear relationship between  $\text{O}_3$  and OH. Further investigations of model data qualitatively support these results and provide additional hints of a considerable impact of atmospheric dynamics on the magnitude of the  $\text{O}_3$  variations. This might be also true for observations. Consequently, changes in  $\text{O}_3$  after a single particle event should be interpreted carefully.

# Inhaltsverzeichnis

<b>Abbildungsverzeichnis</b>	<b>vii</b>
<b>Tabellenverzeichnis</b>	<b>ix</b>
<b>Abkürzungsverzeichnis</b>	<b>x</b>
<b>1. Einleitung</b>	<b>1</b>
<b>2. Präzipitierende Teilchen</b>	<b>5</b>
2.1 Interaktion zwischen Sonne und Erdmagnetfeld	5
2.1.1 Eigenschaften des Sonnenwindes	6
2.1.2 Die Entstehung des 27-Tage-Signals	7
2.1.3 Die terrestrische Magnetosphäre	10
2.1.4 Die Ionosphäre	13
2.2 Quellen präzipitierender Teilchen	14
2.2.1 Die Strahlungsgürtel der Erde	14
2.2.2 Die Auroraregion	16
2.3 Einfluss auf die Chemie der mittleren Atmosphäre	18
2.3.1 Produktion von reaktiven Wasserstoffverbindungen (HO <sub>x</sub> )	20
2.3.2 Bildung von reaktiven Stickstoffverbindungen (NO <sub>x</sub> )	21
2.4 Geomagnetische Indizes	22
<b>3. Ozon in der mittleren Atmosphäre</b>	<b>25</b>
3.1 Bildung und Abbau von Ozon	25
3.1.1 Reaktionen in einer reinen Sauerstoffatmosphäre	25
3.1.2 Katalytischer Ozonabbau	26
3.2 Transportprozesse in der mittleren Atmosphäre	28
3.3 Räumliche und zeitliche Ozonvariationen	32

<b>4.</b>	<b>Datensätze</b>	<b>37</b>
4.1	Messungen	37
4.1.1	Satellitenmessprinzip	38
4.1.2	Satellitendatenmessungen in der Stratosphäre und unteren Mesosphäre	40
4.1.3	Satellitenbeobachtungen in der Mesosphäre und unteren Thermosphäre	43
4.2	Numerische Modellierung	44
4.3	Geomagnetische und solare Indikatoren	48
<b>5.</b>	<b>Datenfilterung und Analysemethoden</b>	<b>50</b>
5.1	Datenanalyse in der Stratosphäre und unteren Mesosphäre	50
5.1.1	Abschätzung von Position und Ausdehnung des antarktischen Polarwirbels	50
5.1.2	Datenfilterung und Analyse saisonaler Spurengasvariationen	53
5.2	Datenanalyse in der Mesosphäre und unteren Thermosphäre	55
5.2.1	Datenselektierung	55
5.2.2	Überlagerte Epochenanalyse	57
5.3	Bestimmung des Signifikanzniveaus	60
<b>6.</b>	<b>Ergebnisse und Diskussionen I: Stratosphärische Ozonverluste durch den indirekten Teilcheneffekt</b>	<b>62</b>
6.1	Indirekter Teilcheneffekt im antarktischen Polarwirbel	63
6.1.1	Ozonvariationen von 2002 bis 2011	63
6.1.2	Ozonschwankungen im solaren Minimum für 2005-2010	68
6.2	Chemische Ursachen der Ozonvariationen	70
6.3	Vergleiche mit Modellsimulationen für 2003-2009	74
<b>7.</b>	<b>Ergebnisse und Diskussionen II: Beobachtung des 27-Tage-Signals in Spurengasen</b>	<b>77</b>
7.1	Validierung des 27-Tage-Signals in geomagnetischer Aktivität	78
7.2	Das 27-Tage-Signal in mesosphärischen Spurengasen	80

7.3	Spurengasvariationen in Abhängigkeit der Stärke geomagnetischer Ereignisse	85
<b>8.</b>	<b>Ergebnisse und Diskussionen II: Modellstudie des 27-Tage-Signals in Spurengasen</b>	<b>89</b>
8.1	Das 27-Tage-Signal in Ionisationsraten	89
8.2	Isolierter Teilcheneinfluss auf atmosphärische Spurengase	91
8.2.1	Sauerstoffverbindungen	91
8.2.2	Wasserstoffverbindungen	93
8.2.3	Stickstoffverbindungen	97
8.3	Einfluss der Fotoionisation und des 11-jährigen solaren Zyklus'	102
8.4	Vergleich mit Beobachtungen und die Rolle der Dynamik	103
8.4.1	Ozon (O <sub>3</sub> )	103
8.4.2	Hydroxyl-Radikal (OH)	107
8.4.3	Wasserdampf (H <sub>2</sub> O)	109
8.4.4	Stickstoffmonoxid (NO)	111
<b>9.</b>	<b>Ergebnisse und Diskussionen IV: Auswirkungen von Chemie und Dynamik auf mesosphärisches Ozon</b>	<b>115</b>
9.1	Ursachen der Variationen in simulierten Ozonanomalien	115
9.1.1	Einfluss der Stärke geomagnetischer Ereignisse	115
9.1.2	Abhängigkeit von Ozon (O <sub>3</sub> ) vom Hydroxyl-Radikal (OH)	119
9.1.3	Abhängigkeit von Ozon (O <sub>3</sub> ) von Stickstoffmonoxid (NO)	121
9.2	Ozonvariationen nach einzelnen Teilchenereignissen	123
<b>10.</b>	<b>Zusammenfassung und Ausblick</b>	<b>131</b>
	<b>Literaturverzeichnis</b>	<b>136</b>
	<b>Danksagung</b>	<b>148</b>
	<b>Selbstständigkeitserklärung</b>	<b>149</b>

# Abbildungsverzeichnis

2.1	Schematischer Aufbau von Sonne und Heliosphäre	6
2.2	Beobachtung koronale Löcher in der Sonnenkorona	8
2.3	Interaktion des solaren Magnetfeldes im langsamen und schnellen Sonnenwind	9
2.4	Schematischer Aufbau der terrestrischen Magnetosphäre	11
2.5	Die untere Magnetosphäre und die Position ihrer Strahlungsgürtel	15
2.6	Aufbau und Wirkung einer Plasmadoppelschicht	17
3.1	Die Brewer-Dobson-Zirkulation und Transport in der unteren Thermosphäre	30
3.2	Breiten-Höhen-Schnitt von O <sub>3</sub> aus Satellitenmessungen für 2002-2012	33
3.3	Jahresgang der Gesamtozonsäule als Funktion von geografischer Breite	35
4.1	Prinzipielle Geometrie einer Horizontalsondierung	39
5.1	Potentielle Vorticity als Funktion von äquivalenter Breite und Zeit	51
5.2	Abfolge der einzelnen Schritte der überlagerten Epochenanalyse	59
6.1	Messung der O <sub>3</sub> -Amplitude in der KERN-, RAND- und AUSSEN-Zone	64
6.2	Messung der O <sub>3</sub> -Amplitude in der RAND-Zone für 2002-2011	66
6.3	Zeitreihen für Ap, 2MeV und F10.7 von 2002 bis 2011	67
6.4	Messung der O <sub>3</sub> -Amplitude in der RAND-Zone für 2005-2010	69
6.5	Messung der NO <sub>2</sub> -Amplitude in der RAND-Zone für 2005-2010	71
6.6	Messung der ClONO <sub>2</sub> - und HNO <sub>3</sub> -Amplitude in der RAND-Zone für 2005-2010	73
6.7	Simulation der O <sub>3</sub> -Amplitude in der RAND-Zone für 2003-2009	74
7.1	SEA für Ap und Ly- $\alpha$	78
7.2	Vertikalprofile von O <sub>3</sub> und OH aus MLS-Messungen	81
7.3	SEA für O <sub>3</sub> - und OH-Amplituden aus MLS-Messungen	82
7.4	O <sub>3</sub> - und OH-Anomalien als Funktion von $\overline{\Delta Ap}$ aus MLS-Messungen	86
7.5	Zusammenhang zwischen O <sub>3</sub> - und OH-Anomalien aus MLS-Messungen	88
8.1	SEA für die AIMOS-Ionisationsraten	90
8.2	Teilcheninduzierte O <sub>3</sub> -Amplitude	92
8.3	Teilcheninduzierte HO <sub>x</sub> -, H-, OH- und HO <sub>2</sub> -Amplituden	93
8.4	Volumenmischungsverhältnisse von HO <sub>x</sub> und O <sub>3</sub> des MLT_PT-Laufs	94
8.5	Teilcheninduzierte H <sub>2</sub> O- und H <sub>2</sub> -Amplituden	95

8.6	Volumenmischungsverhältnisse von H <sub>2</sub> O und H <sub>2</sub> des MLT_PT-Laufs	96
8.7	Teilcheninduzierte NO-Amplitude	98
8.8	Volumenmischungsverhältnis und Konzentration von NO des MLT_PT-Laufs	99
8.9	Teilcheninduzierten NO-Amplituden von Tag 0 bis Tag +5	101
8.10	SEA für O <sub>3</sub> -Amplituden des MLT_PT+F-Laufs und aus MLS-Messungen	104
8.11	Volumenmischungsverhältnis von O <sub>3</sub> des MLT_PT+F-Laufs und aus MLS-Messungen	106
8.12	SEA für OH-Amplituden des MLT_PT+F-Laufs und aus MLS-Messungen	108
8.13	Volumenmischungsverhältnis von OH des MLT_PT+F-Laufs und aus MLS-Messungen	109
8.14	SEA für H <sub>2</sub> O-Amplituden des MLT_PT+F-Laufs und aus MLS-Messungen	110
8.15	SEA für MLT_PT+F-NO-Amplituden und SOFIE-ΔNO	112
8.16	SEA für NO-Amplituden des MLT_PT+F-Laufs und aus SCIAMACHY-Messungen	113
9.1	O <sub>3</sub> - und OH-Anomalien aus MLS-Messungen und des MLT_PT+F-Laufs	116
9.2	Korrelationskoeffizient zwischen HO <sub>x</sub> und dessen einzelnen Komponenten	119
9.3	Zusammenhang von O <sub>3</sub> - und OH-Anomalien aus dem MLT_PT+F-Lauf	120
9.4	Zusammenhang von isolierten O <sub>3</sub> - und OH-Anomalien	121
9.5	Zeitreihen der teilcheninduzierten O <sub>3</sub> -, OH- und NO-Anomalien	123
9.6	Zeitreihen gemessener, simulierter und teilcheninduzierter O <sub>3</sub> -Amplituden in der SH um den 14. April 2006 und den 14. März 2003	125
9.7	Zeitreihen der AIMOS-Ionisationsraten, sowie der teilcheninduzierten HO <sub>x</sub> - und NO <sub>x</sub> -Amplituden in der SH um den 14. April 2006 und den 14. März 2003	127
9.8	Zeitreihen gemessener, simulierter und teilcheninduzierter O <sub>3</sub> -Amplituden in der SH um den 22. Juli 2009	129

## Tabellenverzeichnis

2.1	Eigenschaften verschiedener Teilchenpopulationen	19
2.2	Übersicht einiger ausgewählter geomagnetischer Indizes	23
4.1	Zusammenfassung der zur Verfügung stehenden MLS-Messungen	44
4.2	Zusammenfassung der Spezifikationen der verwendeten 3dCTM-Läufe	47
5.1	Grenzwerte der potentiellen Vorticity	52
5.2	Anzahl der Ereignisse der SEA für verschiedene Datensätze	60

## Abkürzungsverzeichnis

AIMOS	Atmosphärisches Modul für Ionisationsraten (engl. atmospheric ionization module Osnabrück)
AIM/SOFIE	Satelliteninstrument (engl. aeronomy of ice in the mesosphere/solar occultation for ice experiment)
ap	Planetarer geomagnetischer ap-Index (3-Stunden-Mittel)
Ap	Planetarer geomagnetischer Ap-Index (Tagesmittel)
AUSSEN	Nicht vom Polarwirbel beeinflusster Bereich
BDZ	Brewer-Dobson-Zirkulation
BrO <sub>x</sub>	(=Br+BrO)
CIR	Gleichläufige interaktive Region (engl. co-rotating interactive region)
ClO <sub>x</sub>	(=Cl+ClO+Cl <sub>2</sub> O <sub>2</sub> )
CME	Koronaler Massenauswurf (engl. coronal mass ejection)
DU	Dobsoneneinheit (engl. Dobson unit)
ECMWF	Europäisches Zentrum für mittelfristige Wettervorhersage (engl. European centre for medium-range weather forecast)
EEP	Elektronenniederschlag (engl. energetic electron precipitation)
ENVISAT/MIPAS	Satelliteninstrument (engl. environmental satellite/Michelson Interferometer for passive atmospheric sounding)
EOS MLS	Satelliteninstrument (engl. earth observing system microwave limb sounder)
EPP	Teilchenniederschlag (engl. energetic particle precipitation)
ESA	Europäische Weltraumbehörde (engl. European space agency)
EUV	Extrem ultraviolett (10-121 nm)
F10.7	Solarer Radioemissionsflussindex bei 10,7 cm
GOES	Geostationäre Satelliten (engl. geostationary operational environmental satellites)
He <sup>2+</sup>	Alpha-Teilchen
HO <sub>x</sub>	=H+OH+HO <sub>2</sub>
KERN	Zentrum des antarktischen Polarwirbels
KL	Koronale Löcher
Kp	Planetarer geomagnetischer Kp-Index

LIDAR	Aktives Fernerkundungsverfahren mittels Laser (engl. light detection and ranging)
LIMA	Mittelatmosphärisches Dynamikmodell (engl. Leibnitz-Institut middle atmosphere)
Ly- $\alpha$	Strahlung der Wasserstoffemissionslinie bei 121,6 nm (Lyman-Alpha-Strahlung)
MA	Mittlere Atmosphäre
MLT	Mesosphäre und untere Thermosphäre (45-110 km, engl. mesosphere and lower thermosphere)
NASA	Amerikanische Luft- und Raumfahrtbehörde (engl. National aeronautic and space administration)
NH	Nordhemisphäre
NHS	Nordhemisphärischer Sommer
NHW	Nordhemisphärischer Winter
NO <sub>x</sub>	=N+NO+NO <sub>2</sub>
PDS	Plasmadoppelschicht
POES	Polumlaufender Satellit (engl. polar-orbiting environmental satellite)
ppb	Anteile pro Milliarde (engl. parts per billion)
ppm	Anteile pro Million (engl. parts per million)
PV	Potentielle Vorticity
PW	Planetare Wellen
RAND	Bereich des antarktischen Polarwirbels
SCIAMACHY	Satelliteninstrument (engl. scanning imaging absorption spectrometer for atmospheric chartography)
SEA	Überlagerte Epochenanalyse (engl. superposed epoch analysis)
SH	Südhemisphäre
SHS	Südhemisphärischer Sommer
SHW	Südhemisphärischer Winter
SLM	Stratosphäre und untere Mesosphäre (20-70 km, engl. stratosphere and lower mesosphere)
SMR	Satelliteninstrument (engl. sub-millimetre radiometer)
SOHO	Solares und heliosphärisches Observatorium (engl. Solar and heliospheric observatory)
SPE	Solares Protonenereignis

SSW	Plötzliche Stratosphärenenerwärmung (engl. sudden stratospheric warming)
SW	Schwerewellen
TIMED/SABER	Satelliteninstrument (engl. thermosphere ionosphere mesosphere energetics and dynamics/sounding of the atmosphere using broadband emission radiometry)
TOMS	Spektrometer zur Messung der Gesamtozonsäule (engl. total ozone mapping spectrometer)
UV	Ultraviolett (10-380 nm)
vmr	Volumenmischungsverhältnis (engl. Volume mixing ratio)
2MeV	$\geq 2$ MeV Elektronenfluss
3dCTM	3-dimensionales Chemie-Transport-Modell

# 1. Einleitung

Der Schwerpunkt dieser Arbeit liegt auf der Region der mittleren Atmosphäre (MA). Diese erstreckt sich von der Tropopause (10-16 km), über die Stratosphäre (bis 45 km) und die Mesosphäre (bis 90 km), bis in die untere Thermosphäre ( $\approx 110$  km). Dabei wird der Bereich der Mesosphäre und unteren Thermosphäre (engl. mesosphere and lower thermosphere) häufig als MLT-Region zusammengefasst. Zu beachten ist, dass sich die Festlegung der oberen Grenze der MA in der Literatur unterscheidet, wobei hier die Definition über die ungefähre Höhe der Homopause erfolgte [Andrews et al., 1987, Kap. 1]. Die MA ist gut durchmischt und befindet sich weitgehend im thermodynamischen Gleichgewicht, wobei der Transport vorrangig durch Turbulenz erfolgt. Dahingegen spielen molekulare Diffusion, Fotoionisation sowie elektrische und magnetische Felder nur eine untergeordnete Rolle. Die Bedeutung der MA liegt vor allem in der Funktion als Verbindungs- und Transferregion zwischen der Hochatmosphäre bzw. dem Weltraum und der unteren Atmosphäre. Außerdem zeigen sich klimatische Veränderungen hier deutlich schneller und stärker als in der Troposphäre.

Die MA ist einem kontinuierlichen Fluss geladener Teilchen ausgesetzt, wobei es sich hauptsächlich um Protonen und Elektronen handelt. Diese geladenen Teilchen stammen in erster Linie von der Sonne oder aus dem inneren Bereich des Erdmagnetfelds (1.000–25.000 km), wo sie eine Beschleunigung auf relativistische Geschwindigkeiten erfahren. Die damit einhergehenden hohen Energien ermöglichen es den Teilchen entlang des Erdmagnetfelds bis in die MA einzudringen, was besonders in hohen geomagnetischen Breiten ( $55^\circ$ - $75^\circ$ ) von Bedeutung ist. Das „eindringen“, „einfallen“ oder „präzipitieren“ von Teilchen in die MA steht im Zusammenhang mit Variationen im Erdmagnetfeld, welche als „geomagnetische Aktivität“ bezeichnet wird. Daher sind die Begriffe „präzipitierende Teilchen“ und „geomagnetische Aktivität“ als äquivalent anzusehen und werden in dieser Arbeit auch als solche verwendet.

In der MA beeinflussen präzipitierende Teilchen das chemische Gleichgewicht der einzelnen Spurengase, was vorrangig durch die Ionisation, Anregung und Dissoziation der atmosphärischen Hauptbestandteile  $N_2$  und  $O_2$  erfolgt. Parallel zu diesen Prozessen laufen grundsätzlich auch Rekombinationsreaktionen ab. Dabei kommt es teilweise zur Emission von Licht, was sich im Phänomen der Aurora bzw. des Polarlichtes manifestiert. Die Teilchen

## 1. Einleitung

können allerdings auch eine Kette von komplexen Ionenchemiereaktionen auslösen, die letztlich zur Bildung von hochreaktiven Wasserstoff- ( $\text{HO}_x = \text{H} + \text{OH} + \text{HO}_2$ ) [Solomon et al., 1981] und Stickstoffverbindungen ( $\text{NO}_x = \text{N} + \text{NO} + \text{NO}_2$ ) [Rusch et al., 1981] führen. Dabei bestimmt die ursprüngliche Energie der einzelnen Teilchen ihre Eindringtiefe in die Atmosphäre. Für diese Arbeit sind vor allem die Teilchen von Bedeutung, die bis in den Bereich der MLT vordringen. Obwohl es sich bei  $\text{HO}_x$  und  $\text{NO}_x$  nur um Spurengase handelt, spielen beide eine wichtige Rolle beim katalytischen Ozonabbau in der MA [z. B. Lary, 1997].

Ozon ( $\text{O}_3$ ) weist als Spurengas nur geringe Konzentrationen in der Atmosphäre auf ( $\approx 0,001\%$ ). Dennoch trägt es durch die Absorption von solarer ultravioletter Strahlung ( $\approx 200\text{-}320\text{ nm}$ ) wesentlich zur Erwärmung in der MA bei. Außerdem emittiert  $\text{O}_3$  Strahlung im Infrarotbereich, besonders bei  $9,0\text{-}9,7\ \mu\text{m}$ , wodurch zumindest in der Stratosphäre  $\approx 1/3$  der Abkühlung auf  $\text{O}_3$  zurückgeht [Andreas et al., 1987, Abb. 2.1]. Folglich nimmt  $\text{O}_3$  entscheidenden Einfluss auf die Strahlungs- und Energiebilanz der MA. Daher sind auch weitere Auswirkungen auf die Temperatur und den thermisch balancierten Wind in zonaler Richtung möglich, wobei letzterer die Position und die Ausdehnung des Polarwirbels bestimmt. Die verursachten Temperaturänderungen beeinflussen wiederum die Geschwindigkeit der ablaufenden chemischen Reaktionen und damit auch die chemischen Lebensdauern aller Spurengase in der MA. Dahingegen wirken sich die Variationen in der Dynamik auf die globale Spurengasverteilung aus. Ozon kommt daher eine wichtige Rolle in der MA zu und die bisherigen Erkenntnisse über die Auswirkungen präzipitierende Teilchen auf die MA werden z. B. in Sinnhuber et al. [2012] ausführlich diskutiert. Hinzukommt, dass sich der Effekt präzipitierender Teilchen auf  $\text{O}_3$  und damit auch auf die Dynamik der MA auf längeren Zeitskalen noch verstärken könnte, da die Sonne aktuell vergleichsweise wenig Aktivität im Bezug auf präzipitierende Teilchen aufweist [McCracken et al., 2001].

Ein verbessertes Wissen über Ozonschwankungen und die zu Grunde liegenden natürlichen Prozesse würde folglich zu einem erhöhten Verständnis der gesamten MA führen. Dies spielt vor allem in der globalen Klimamodellierung eine entscheidende Rolle, da die MA die obere Grenze der Troposphäre bildet und die Auswirkungen der zugehörigen Rückkopplungsmechanismen detaillierte Kenntnisse voraussetzen. So deuten Beobachtungen in nördlichen Breiten für die Jahre 1961-1998 auf einen dynamischen Zusammenhang zwischen der Stärke des arktischen Polarwirbels und troposphärischen Witterungsverhältnissen hin [Baldwin und Dunkerton 2001]. Dabei verlagerte sich die

## 1. Einleitung

Zugrichtung der Tiefdruckgebiete bei einem schwächeren arktischen Polarwirbel in Richtung Äquator. Des Weiteren gibt es Hinweise auf einen positiven Zusammenhang zwischen geomagnetischer Aktivität und der polaren Bodentemperatur [Seppälä et al., 2009], wobei diese Ergebnisse auf kurzen Zeitreihen von nur wenigen Jahren beruhen. Die zu Grunde liegenden Prozesse sind allerdings sehr komplex und noch nicht vollständig verstanden. Daher erscheint es sinnvoll, den Einfluss von präzipitierenden Teilchen auf das  $O_3$  der MA genauer zu untersuchen.

In Abwesenheit solarer Strahlung weist  $NO_x$  eine relative lange Lebensdauer von einigen Tagen bis Monaten auf, wodurch es im polaren Winter mit der Hintergrundzirkulation von der MLT bis in die untere Stratosphäre transportiert werden [Randell et al., 2007; Funke et al., 2014] kann. Vor allem in der Stratosphäre trägt es vermutlich zum katalytischen Ozonabbau bei. Der gesamte Vorgang der teilcheninduzierten  $NO_x$ -Bildung, dessen anschließenden Abwärtstransportes und des damit einhergehenden Ozonverlustes wird in der Fachliteratur als indirekter Teilcheneinfluss (engl. energetic particle precipitation (EPP) indirect effect) bezeichnet [Solomon et al., 1982]. Dieser konnte bisher aber nur in Modellstudien nachgewiesen werden [z. B. Reddmann et al., 2010]. Dahingegen existieren noch keine Messergebnisse auf der Basis von Langzeituntersuchungen, was daher der erste große Schwerpunkt dieser Arbeit ist.

Im Gegensatz zu  $NO_x$  weist  $HO_x$  in der Mesosphäre nur eine chemische Lebensdauer von unter einem Tag auf [Brasseur und Solomon, 2005, Abb. 5.27]. Daher trägt  $HO_x$  nur auf Zeitskalen von wenigen Tagen und nahe seiner Entstehungsregion zum Ozonabbau bei. Bisherige Satellitenbeobachtungen von 2004-2009 zeigen, dass präzipitierende Elektronen zu OH-Erhöhungen in 70-78 km im polaren Winter führen [Andersson et al., 2012]. Allerdings liegen noch keine publizierten Untersuchungen hinsichtlich eines Zusammenhanges zwischen präzipitierenden Teilchen und  $O_3$  bzw. zwischen OH und  $O_3$  vor. Außerdem gibt es weder für  $O_3$  noch für OH Ergebnisse im Bezug auf das teilcheninduzierte 27-Tage-Signal, welches im zweiten Teil in dieser Arbeit daher genauer analysiert wird.

Zu diesem Zweck erfolgt in Kap. 2 zunächst die Charakterisierung präzipitierender Teilchen und deren Quantifizierung mit Hilfe geomagnetischer Indizes. Bildung und Abbau von  $O_3$  sowie dessen räumliche und zeitliche Variationen werden in Kap. 3 erläutert. In diesen beiden Theoriekapiteln wird zu Beginn eines jeden Abschnittes oder Unterkapitels auf Literatur verwiesen, in welcher die beschriebenen Zusammenhänge und die angegebenen Zahlen nachgelesen werden können. Die weiteren genannten Quellen beziehen sich hingegen nur auf

## 1. Einleitung

den zugehörigen Satz und geben zusätzliche Informationen über eventuell erstmalig eingeführte Fachbegriffe. In Kap. 4 werden die verwendeten Satelliten- und Modelldatensätze beschrieben, welche bereits von anderen Forschungsgruppen erstellt wurden. Anschließend erfolgt in Kap. 5 eine Beschreibung der hier entwickelten Filterkriterien und adaptierten Analysemethoden. Die gewonnenen Ergebnisse des indirekten Teilcheneffektes werden im Kap. 6 dargestellt und diskutiert, während das teilcheninduzierte 27-Tage-Signal in Spurengasen in der MLT auf der Basis von Messungen (Kap. 7) und mit Hilfe von Modellsimulationen (Kap. 8) untersucht wird. In Kapitel 9 erfolgt eine genauere Analyse der mesosphärischen Ozonschwankungen im Zusammenhang mit chemischen und physikalischen Einflüssen. Alle vier Ergebniskapitel befassen sich aber nicht ausschließlich mit  $O_3$ , sondern auch mit weiteren Spurengasen, die für den Ozonabbau relevant sein können. Abschließend werden in Kap. 10 eine Zusammenfassung der durchgeführten Untersuchungen, sowie eine Bewertung der Ergebnisse und ein Ausblick über mögliche nachfolgende Analysen gegeben.

## 2. Präzipitierende Teilchen

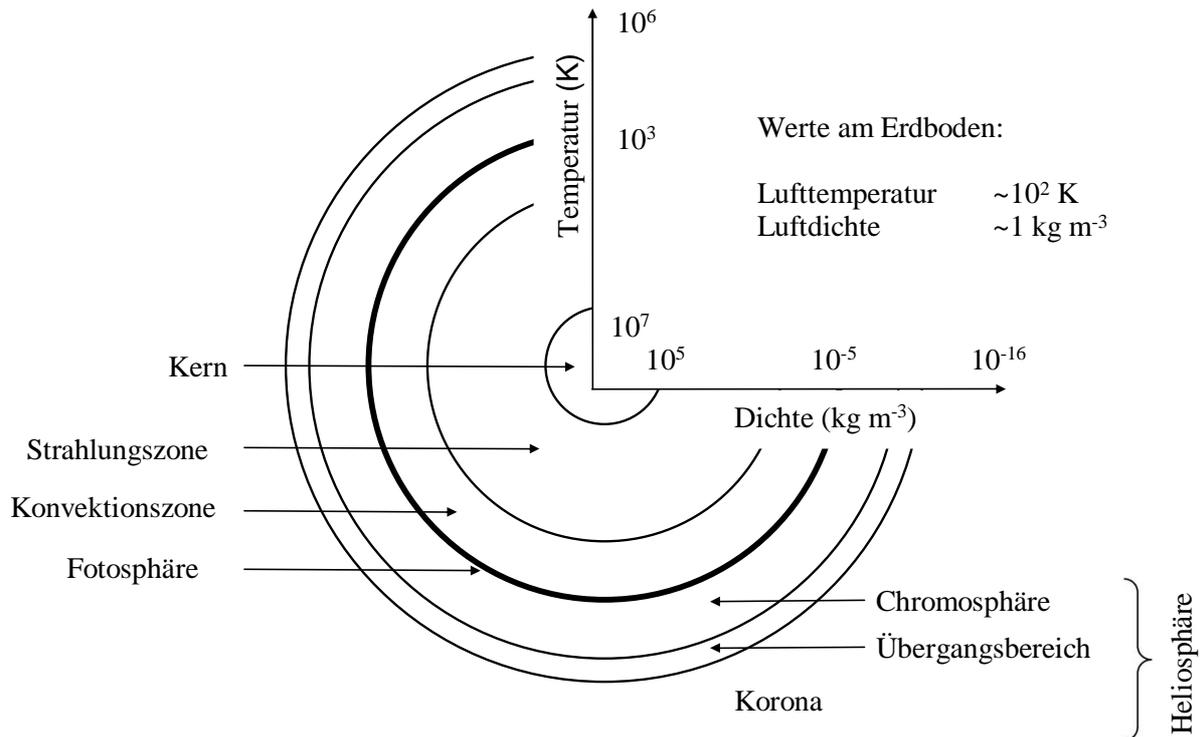
### 2.1 Interaktion zwischen Sonne und Erdmagnetfeld

Bei präzipitierenden Teilchen handelt es sich um geladene Teilchen, welche im Wesentlichen Energien von mehreren keV-GeV aufweisen [Kallenrode, 2010, Kap. 6, 8 und 10]. Die Hauptvertreter sind Protonen und Elektronen, wobei auch schwerere Ionen bis hin zum Eisen vereinzelt vorkommen. Präzipitierende Teilchen sollten nicht mit Fotoelektronen oder -ionen verwechselt werden, deren Existenz auf die Ionisation der atmosphärischen Bestandteile durch solare ultraviolette (UV) Strahlung zurückgeht. Weiterhin werden präzipitierende Teilchen nicht in der MA selbst gebildet, sondern entstehen im inneren Erdmagnetfeld ( $\approx 1.000-25.000$  km), stammen von der Sonne oder sogar von außerhalb des Sonnensystems.

Von der Sonne weht ein kontinuierlicher Plasmastrom (Sonnenwind) in Richtung Erde, welcher durch solare Ereignisse moduliert wird. Wenn die geladenen Teilchen nach einigen Tagen das Erdmagnetfeld erreichen, können sie dort entlang des Magnetfeldes nahe den geomagnetischen Polen direkt in die Erdatmosphäre eindringen. Des Weiteren führen die Schwankungen in der Geschwindigkeit des Sonnenwindes zu einer Kompression oder Expansion des Magnetfeldes. Dies verursacht Störungen im Erdmagnetfeld, was letztlich die zuvor im Magnetfeld gespeicherten Teilchen zum Teil in Richtung Erdoberfläche beschleunigt. Sobald die geladenen Teilchen in die Erdatmosphäre eindringen werden sie präzipitierende Teilchen genannt.

Die Sonne [Priest, 1995] stellt eine Hauptquelle für präzipitierende Teilchen dar und ihr schematischer Aufbau ist in Abb. 2.1 zu sehen. Im inneren besitzt die Sonne einen Kern, der auf Grund der Kernfusion von Wasserstoff zu Helium elektromagnetische Strahlung emittiert. Darüber liegen die Strahlungs- und die Konvektionszone, deren Namen sich von den dominierenden Energietransportprozessen ableiten. Die obere Grenze der Konvektionszone bildet die sichtbare Oberfläche der Sonne (Fotosphäre), wo folglich auch ein Großteil der sichtbaren Strahlung emittiert wird. Hier herrscht eine Temperatur von  $\approx 5.800$  K, welche aber etwa 3-4 Größenordnungen unterhalb der des Kerns liegt. Oberhalb der Fotosphäre erstreckt sich die Sonnenatmosphäre (Heliosphäre). Sie umfasst drei Schichten: die Chromosphäre, einen Übergangsbereich und die Korona. Erstere weist noch ähnliche Temperaturwerte wie die Fotosphäre auf und erstreckt sich über  $\approx 2.000$  km. Sie ist außerdem die Hauptquelle der solaren UV Strahlung. Dennoch weist sie eine rötliche Färbung auf, da der Hauptanteil der

## 2. Präzipitierende Teilchen



**Abbildung 2.1.** Schematischer Aufbau von Sonne und Heliosphäre. Die Größenordnungen von Temperatur und Dichte für den Kern, die Fotosphäre und die Korona wurden hinzugefügt.

hier emittierten Strahlung im roten Bereich des sichtbaren Lichtes (0,61-0,76  $\mu\text{m}$ ) und im Infrarotbereich ( $\approx \mu\text{m}$ -mm) liegt. Der darüber liegende Übergangsbereich ist nur einige 100 km dick und durch einen starken Temperaturanstieg gekennzeichnet, sodass in der Korona Temperaturwerte von etwa  $10^6$  K erreicht werden. Weiterhin ist die Korona nahezu isothermisch geschichtet und vollständig ionisiert, wobei das sehr dünne Plasma vorrangig aus Protonen und Elektronen besteht. Im Gegensatz zur Erdatmosphäre ist die Heliosphäre nicht stabil und strömt als Sonnenwind von der Sonne weg.

### 2.1.1 Eigenschaften des Sonnenwindes

Der Sonnenwind [Russel, 2001] ist ein heißer, kollisionsfreier Plasmafluss ( $\approx 10^5$  K), der kontinuierlich durch die Gasdruckdifferenz zwischen Korona und interstellarem Raum angetrieben wird. Dabei strömt das Plasma mit Überschallgeschwindigkeit ( $\approx 400$  km s<sup>-1</sup>) entgegen der Gravitationskraft annähernd radial von der Sonne weg. Somit benötigt der Sonnenwind etwa 4 Tage um die Erde zu erreichen. Des Weiteren können sich solare Ereignisse mit dem Sonnenwind bis in das Erdmagnetfeld ausbreiten, weshalb der

## 2. Präzipitierende Teilchen

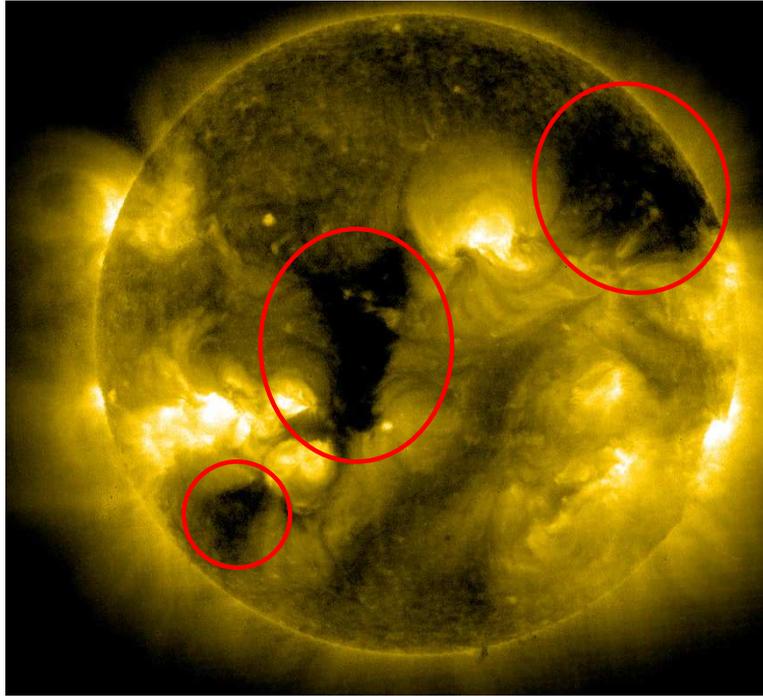
Sonnenwind ein Kopplungsmedium zwischen der Sonne und dem Erdmagnetfeld darstellt. Der Sonnenwind besteht, wie auch die Sonne, im Wesentlichen aus  $H^+$  ( $\approx 96\%$ ) und  $He^{2+}$  ( $\approx 4\%$ ). Da ein Plasma als elektrisch quasi-neutrales Medium definiert ist, stimmt auch hier die Anzahl an positiven Ionen und Elektronen annähernd überein ( $\approx 7 \times 10^6 \text{ m}^{-3}$ ). Impuls und Energie werden hauptsächlich durch  $H^+$  transportiert, was auf ihre erheblich größere Masse im Vergleich zu den Elektronen zurückzuführen ist. Weiterhin ist im Sonnenwind auch das solare Magnetfeld eingefroren, welches eine Stärke von etwa 5 nT aufweist und nahe der Ekliptik liegt.

Solare Ereignisse führen im Sonnenwind zu Schwankungen in der Geschwindigkeit ( $250\text{-}800 \text{ km s}^{-1}$ ) und der Teilchendichte ( $10^5\text{-}10^8 \text{ m}^{-3}$ ) [Kallenrode, 2010, Kap.6]. In Abhängigkeit der auftretenden solaren Ereignisse kann der Sonnenwind in einen schnellen und einen langsamen Sonnenwind unterteilt werden. Der schnelle Sonnenwind geht in der Regel auf die Existenz von koronalen Löchern zurück (s. nächstes Kap. 2.1.2) und ist über mehrere Sonnenrotationen relativ stabil. Weiterhin weist er im Mittel Geschwindigkeiten von  $400\text{-}800 \text{ km s}^{-1}$  und eine Teilchendichte von  $\approx 10^6 \text{ m}^{-3}$  auf. Der langsame Sonnenwind erreicht hingegen nur eine Durchschnittsgeschwindigkeit von  $250\text{-}400 \text{ km s}^{-1}$ , wobei die Teilchendichte um den Faktor 2-3 erhöht ist. Daher ist der Gesamtfluss an Impuls und Energie für beide Sonnenwindarten in etwa gleich. Dies trifft auch auf die Temperatur des Plasmas zu. Allerdings ist der langsame Sonnenwind deutlich variabler, da es in ihm gehäuft zur Ausbildung von Schockwellen kommt.

### 2.1.2 Die Entstehung des 27-Tage-Signals

Bei der Sonne handelt es sich um eine heiße, rotierende und magnetisierte Plasmakugel auf der es immer wieder zu Störungen im Magnetfeld kommt. In Folge dessen bilden sich Strukturen mit zum Teil relativ stabilen Zyklen aus, wobei die dominanten Perioden 27 Tage, 11 Jahre und 22 Jahre sind [Russel, 1975 und 2001]. In dieser Arbeit wurde allerdings nur der Einfluss des '27-Tage-Zyklus' (Carrington-Rotation) genauer untersucht. Dieser resultiert aus der Eigenrotation der Sonne und der Tatsache, dass alle Strukturen auf der Sonne und in der Heliosphäre an diese Rotation gekoppelt sind. Dazu zählen auch koronale Löcher (KL), die relativ schnelle Elektronenströme freisetzen und im extremen ultravioletten (EUV) Licht als dunkle Bereiche in der Korona sichtbar werden (Abb. 2.2). In diesen Regionen ist das solare Magnetfeld offen und mit dem Interplanetaren Magnetfeld verbunden. Koronale Löcher sollten aber nicht mit Sonnenflecken verwechselt werden, da letztere durch

## 2. Präzipitierende Teilchen

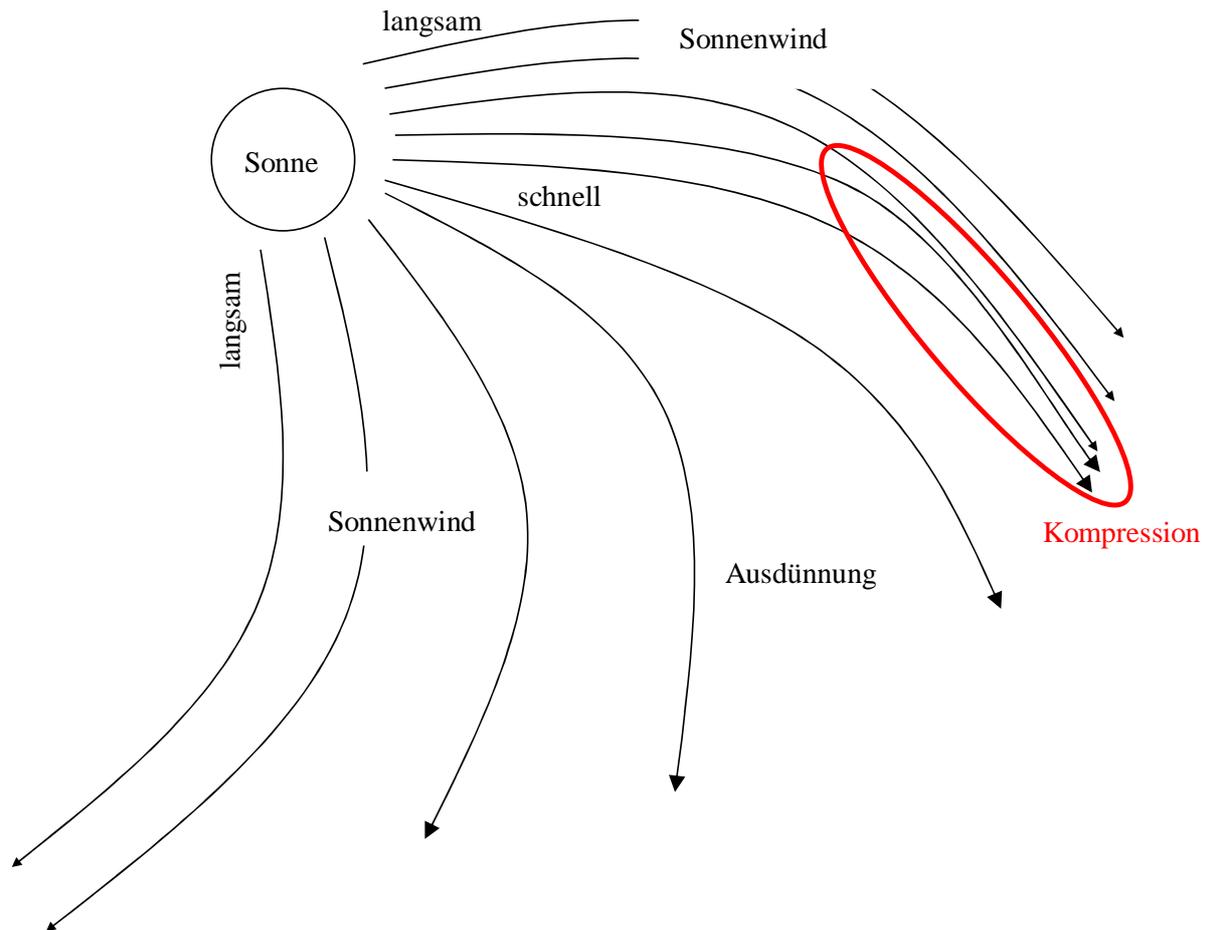


**Abbildung 2.2.** Koronale Löcher (rot umrandet) in der Sonnenkorona. Das Bild wurde vom solar and heliospheric observatory (SOHO) am 22.07.2013 um 1:06 UTC bei einer Wellenlänge von 28,4 nm aufgenommen. Die Abbildung wurde von der SOHO/EIT 284 Vereinigung zur Verfügung gestellt. SOHO ist ein internationales Gemeinschaftsprojekt zwischen der europäischen (ESA) und amerikanischen Weltraumbehörde (NASA).

Magnetfeldstörungen direkt auf der Sonnenoberfläche entstehen und ein einzelner Fleck eine geringere räumliche Ausdehnung hat. Zu beachten ist, dass sich der 27-Tage-Zyklus sowohl in der von der Sonne emittierten Strahlung als auch im Sonnenwind manifestiert. In dieser Arbeit wird aber nur das 27-Tage-Signal im Sonnenwind genauer untersucht.

Auf Grund der Sonnenrotation strömen der schnelle und langsame Sonnenwind nicht als gerade Strahlen von der Sonne weg, sondern erfahren eine Krümmung, wodurch auch das eingefrorene solare Magnetfeld gebogen wird (Abb. 2.3). Die Stärke der Krümmung hängt wiederum von der Geschwindigkeit des Sonnenwindes ab, wobei beide Faktoren antikorreliert sind. Somit kommt es an der Vorderseite des schnellen bzw. an der Rückseite des langsamen Sonnenwindes zu einer Kompression des Magnetfeldes, was zur Generierung von zwei Schockwellen führt [Dessler und Fejer, 1963]. Die so entstehende tangentielle Störung in der Geschwindigkeit des Sonnenwindes rotiert gleichläufig mit der Sonne und wird daher als gleichläufige wechselwirkende Region (engl. co-rotating interaction region, CIR) [Russel, 2001] bezeichnet. Da die Quellregionen des schnellen Sonnenwindes, die KL,

## 2. Präzipitierende Teilchen



**Abbildung 2.3.** Schematische Darstellung der Kompression des solaren Magnetfeldes im langsamen und schnellen Sonnenwind [adaptiert von Russel, 2001].

relativ stabil über mehrere aufeinanderfolgende Sonnenrotationen sind, handelt es sich bei einer CIR in der Regel auch um ein wiederkehrendes Ereignis mit einer Periodendauer von ca. 27 Tagen.

Untersuchungen von Richardson et al. [2000] zeigen allerdings, dass sich der Anteil von der CIR am gesamten 27-Tage-Signal innerhalb (außerhalb) des solaren Maximums auf etwa 30% (70%) beläuft. Der fehlende Beitrag stammt hingegen von koronalen Massenauswürfen (engl. coronal mass ejections, CMEs) [St. Cyr et al., 2000]. Diese unterliegen aber im Gegensatz zu einer CIR keinem zeitlich konstanten Entstehungsmechanismus und verursachen außerdem deutlich stärkere solare und geomagnetische Variationen. Koronale Massenauswürfe entstehen in der Fotosphäre am Sonnenäquator bzw. in niedrigen Breiten und injizieren solares Material in die Korona. Dort manifestieren sie sich als helle Strukturen im Sonnenwind. Koronale Massenauswürfe können ihre Energie kontinuierlich und langsam ( $<100 \text{ km s}^{-1}$ ) freisetzen oder aber explosionsartig, was zu einer starken Beschleunigung des

## 2. Präzipitierende Teilchen

Sonnenwindes auf bis zu  $2.000 \text{ km s}^{-1}$  führt.

Zu beachten ist, dass das 27-Tage-Signal nur eine quasi-periodische Schwankung ist und einzelne Zyklen daher durchaus von der mittleren Periodendauer abweichen können. Die Ursache hierfür liegt darin, dass die Sonne keine feste und zusammenhängende Oberfläche besitzt. Dies ermöglicht eine differentielle Rotation, wobei die Umlaufzeiten am Sonnenäquator (25 Tage) deutlich geringer sind als am Pol (36 Tage). Folglich hängt die tatsächliche Periodendauer des 27-Tage-Signals in erster Linie vom Entstehungsort der KL und CMEs ab. In engem Zusammenhang mit CMEs stehen auch so genannte solare Protonenereignisse (SPEs) [Kurt et al., 2004], welche daher ebenfalls nur sporadisch und verstärkt während des solaren Maximums auftreten. In der Regel wird ein solares Ereignis als SPE klassifiziert, wenn der entsprechende  $>10 \text{ MeV}$  Protonenfluss den Wert von  $10^5 \text{ m}^{-2} \text{ s}^{-1} \text{ sr}^{-1}$  überschreitet. Die einzelnen Protonen können eine Energie von bis zu  $1000 \text{ MeV}$  aufweisen und damit direkten Einfluss auf die MA nehmen. Da es in dieser Arbeit aber vorrangig um den kontinuierlichen Beitrag von präzipitierenden Teilchen geht, wurden SPEs in den Untersuchungen explizit herausgefiltert.

Während der Sonnenwind durch solare Ereignisse moduliert wird, wirkt er seinerseits der kosmischen Strahlung entgegen [Gray et al., 2010]. Bei der kosmischen Strahlung [Anchordoqui et al., 2003] handelt es sich allerdings um keine Strahlung im eigentlichen Sinne, sondern um einen dauerhaften Teilchenfluss innerhalb des Sonnensystems. Sie steht daher in keinem Zusammenhang zur kosmischen Hintergrundstrahlung, da es sich bei letzterer um eine kurz nach dem Urknall entstandene Mikrowellenstrahlung handelt. Die kosmische Strahlung trifft isotrop auf die Erde und besteht im Wesentlichen aus Protonen mit einer Energie von  $10 \text{ MeV}$  bis zu  $100 \text{ EeV}$  ( $=10^{14} \text{ MeV}$ ). Hinzukommen im erheblich geringeren Umfang noch  $\text{He}^{2+}$  (Alpha-Teilchen) und Elektronen. Auf Grund ihrer hohen Energie kann die kosmische Strahlung die Erdatmosphäre vollständig durchdringen. In der gesamten MA spielt sie aber für die Ionisation nur eine untergeordnete Rolle, da die zugehörigen Teilchenflüsse zu gering sind. Dahingegen trägt die kosmische Strahlung zum kontinuierlichen Nachfüllen der Strahlungsgürtel bei, was in Kap. 2.2.1 genauer beschrieben wird.

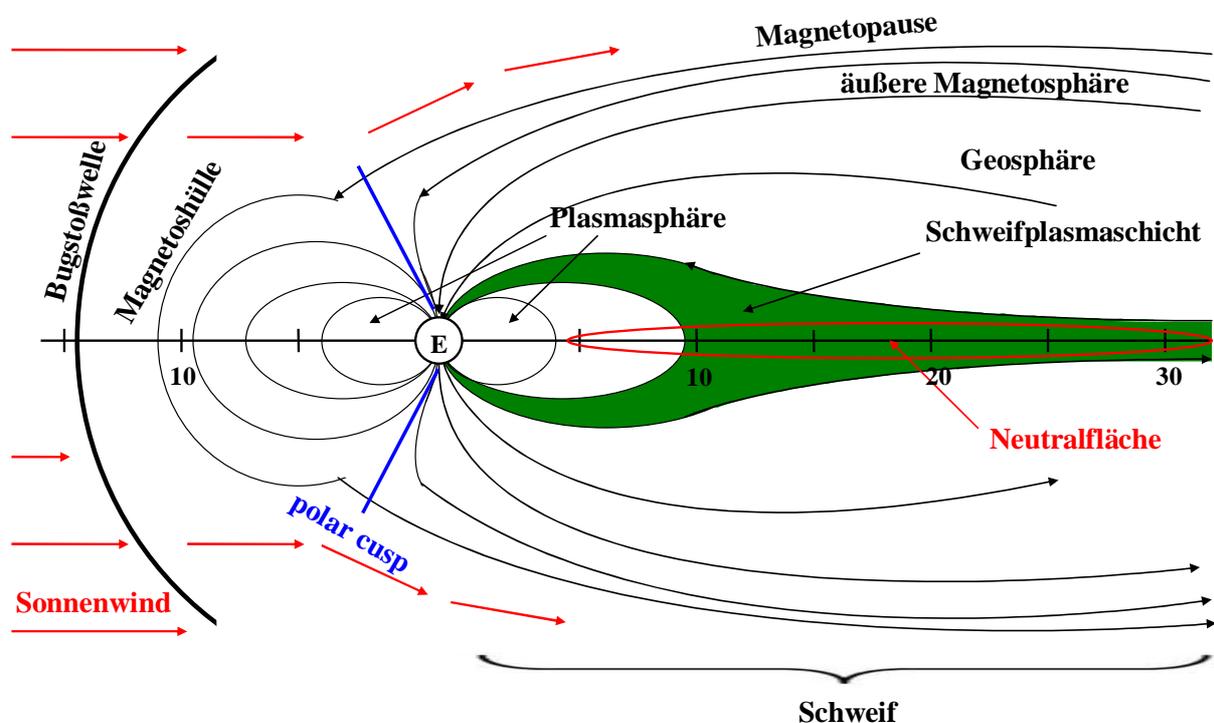
### 2.1.3 Die terrestrische Magnetosphäre

Innerhalb der Magnetosphäre der Erde [z. B. Kallenrode, 2010, Kap. 8] verlaufen die Teilchenbewegungen bis auf wenige Ausnahmen kollisionsfrei ab und werden im

## 2. Präzipitierende Teilchen

Wesentlichen durch das Erdmagnetfeld gesteuert. Dies impliziert, dass sich innerhalb der Magnetosphäre ein zumindest teilweise geladenes Medium (Plasma) geringer Teilchen- und Energiedichte befinden muss. Allerdings ist das Plasma hier nicht homogen verteilt und weist vor allem ein stark variierendes Höhenprofil auf. Die Magnetosphäre (Abb. 2.4) umfasst den Bereich zwischen der Ionosphäre (s. nächstes Kap. 2.1.4) bis hoch zur Magnetopause. Die untere Grenze liegt in Abhängigkeit der Sonnenaktivität in 500-2.000 km Höhe und wird auch als Plasmasphärenbase bezeichnet. Letztere ist definiert als diejenige Höhe, in welcher  $O^+$  von  $H^+$  als dominierender Luftbestandteil abgelöst wird. Die Magnetopause resultiert aus dem Gleichgewicht zwischen dem kinetischen Druck des Sonnenwindes und dem magnetischen Druck des Erdmagnetfeldes.

Durch den Sonnenwind wird die Magnetopause an der Tagseite auf etwa 10 Erdradien zusammengedrückt, während sie sich auf der Nachtseite über mehr als 100 Erdradien erstrecken kann. Der Bereich der sonnenabgewandten Seite wird auf Grund seiner Form auch als Schweif bezeichnet. Da sich die Ausbreitungsrichtung des Magnetfeldes im Zentrum des Schweifs umkehrt, ist dort das Magnetfeld relativ schwach und es kommt zur Bildung eines annähernd neutralen Bereichs (Neutralfläche). Umschlossen wird diese Region von der



**Abbildung 2.4.** Schematischer Aufbau des Magnetfeldes der Erde (E). Die x-Achse zeigt den Abstand zur Erde in Erdradien [adaptiert von Hughes, 1995, Abb. 9.11 und Wolf, 1995, Abb. 10.4].

## 2. Präzipitierende Teilchen

Schweifplasmaschicht, welche an ihren Fußpunkten direkt mit dem Polarlichtoval (s. Kap. 2.2.2) in  $55^{\circ}$ - $75^{\circ}$  geomagnetischer Breite verbunden ist. Folglich existiert ein kontinuierlicher Teilchenstrom aus der Schweifplasmaschicht in die MA. Bedingt durch das schwache Magnetfeld und der damit einhergehenden geringen Beschleunigung der Teilchen, bildet diese Region aber eine vernachlässigbare Quelle für präzipitierende Teilchen. Auf der Tagseite befindet sich 3-4 Erdradien außerhalb der Magnetopause eine stehende Schockwelle (Bugstoßwelle), wo der Sonnenwind stark abgebremst wird. Das Gebiet zwischen Bugstoßwelle und Magnetopause heißt Magnetohülle, in welcher das Sonnenwindplasma abgelenkt und entlang der Magnetopause um das Erdmagnetfeld herum geleitet wird.

Die Magnetopause selbst ist keine scharfe Grenze und hat eine Ausdehnung von etwa 100-1.000 km. Die Ursache hierfür ist, dass die Sonnenwindteilchen nicht sofort vom Erdmagnetfeld reflektiert werden und daher bis zu einer gewissen Tiefe in die Magnetosphäre eindringen können. In Abhängigkeit ihrer Geschwindigkeit werden die Teilchen vom Erdmagnetfeld in unterschiedlichen Höhen eingefangen und durch die Lorentzkraft in die entgegengesetzte Richtung umgelenkt. Folglich können geladene Teilchen in der Regel nicht direkt in die unteren Bereiche der Magnetosphäre oder in die Ionosphäre gelangen. Dies gilt aber nur für niedrige und mittlere geomagnetische Breiten, wo das Magnetfeld noch weitgehend parallel zur Erdoberfläche verläuft.

Zum geomagnetischen Pol hin richtet sich das Magnetfeld zunehmend senkrecht aus. Dadurch wird es den Sonnenwindteilchen ermöglicht in die Magnetosphäre einzudringen. Die entsprechenden Gebiete werden Polöffnungen (polar-cusps) genannt, wobei es sich um zwei Singularitäten in  $78^{\circ}$  geomagnetischer Breite auf der Tagseite der Magnetosphäre handelt. In diesen Punkten konvergiert das Magnetfeld und es sind die einzigen Orte, an denen eine direkte Verbindung von der Magnetopause bis zur Erdoberfläche besteht. Die Polöffnungen trennen außerdem den Bereich des geschlossenen Magnetfeldes der Tagseite vom offenen Magnetfeld auf der Nachtseite. Des Weiteren liegen sie nicht direkt über den geomagnetischen Polen, da das Erdmagnetfeld in höheren Breiten vom Sonnenwind in Richtung des Schweifs gedrückt wird.

Direkt unterhalb der Magnetopause befindet sich die Region der äußeren Magnetosphäre, die nahezu vollständig mit Sonnenwindteilchen gefüllt ist. Die Temperatur der Teilchen ist hier allerdings deutlich höher als im Sonnenwind, da durch dessen Abbremsung in Folge der Bugstoßwelle ein Teil der kinetischen Energie in thermische Energie umgewandelt wurde. Die darunter liegende Geosphäre speist sich bereits zu einem geringeren Anteil aus

## 2. Präzipitierende Teilchen

ionosphärischen Quellen ( $O^+$  und schwerere Ionen), während die dominierenden Bestandteile ( $H^+$ ,  $He^{2+}$ ) noch immer heliosphärischen Ursprungs sind. Somit ist der direkte Einfluss des Sonnenwindes weiterhin vorhanden, was auch in der asymmetrischen Form der Geosphäre bzgl. der Erde zum Vorschein kommt. Erhöhte solare und geomagnetische Aktivität wirken sich aber generell weniger auf die Zusammensetzung des Plasmas aus und tragen vielmehr zur Erhöhung der Energie der einzelnen Teilchen bei.

Die Plasmasphäre bildet die unterste Region der Magnetosphäre und umfasst den Bereich zwischen der Plasmasphärenbase und einer Höhe von 3-5 Erdradien. Sie besteht im Vergleich zu den anderen Bereichen der Magnetosphäre aus einem kalten ( $\approx 10^3$ - $10^4$  K) und dichten Plasma ( $\approx 10^6$ - $10^{10}$   $m^{-3}$ ) und setzt sich vorrangig aus ursprünglich ionosphärischen Protonen und  $O^+$  zusammen. Dabei sind erstere dominierend, weshalb diese Schicht auch Protonosphäre genannt wird. Im Gegensatz zu den darüber liegenden Schichten ist die gesamte Region annähernd sphärisch und hat nur eine schwache Ausbeulung zur Nachtseite hin. Anzumerken ist, dass die Plasmasphäre im Gegensatz zu der darunterliegenden Ionosphäre keine Kugelschale bildet und das Plasma vorrangig in den Strahlungsgürteln (s. Kap. 2.2.1) über der Äquatorregion konzentriert ist. In den Bereichen um die magnetischen Pole ist die Plasmadichte hingegen sehr dünn bis nicht vorhanden.

### 2.1.4 Die Ionosphäre

In Höhen oberhalb von 60 km ist der Anteil der EUV (10-121 nm) und Röntgenstrahlung (0,001-10 nm) bzgl. der solaren Einstrahlung relativ groß. Die damit einhergehende Ionisierung der Atmosphäre kann auf Grund der geringen Luftdichte nicht mehr vollständig durch Rekombination kompensiert werden, wodurch es zu einer permanenten teilweisen Ionisation der Atmosphäre kommt. Daher wird dieser Bereich als Ionosphäre [Luhmann, 1995] bezeichnet, welche sich bis zur Plasmasphärenbase in etwa 500-2.000 km erstreckt. Die Ionosphäre wird weiterhin in eine D- (60-90 km), E- (90-130 km) und F-Schicht (150 km–Plasmasphärenbase) unterteilt, wobei sich die Namen während ihrer Entdeckung ergaben. So basiert die Bezeichnung der E-Schicht auf dem physikalischen Formelzeichen des elektrischen Felds „E“, während die F-Schicht auf dem entsprechenden Zeichen für (elektrische) Kraft „F“ resultiert. Der Begriff der D-Schicht ist allerdings nur eine Konsequenz der ersten beiden Nomenklaturen und weitere Schichten wurden bis heute nicht gefunden.

## 2. Präzipitierende Teilchen

Die wesentlichen Bestandteile der Ionosphäre sind trotz ihrer teilweisen Ionisierung dennoch die neutralen Gase  $N_2$  und  $O$ . In der D- und E-Schicht kommen noch wesentliche Mengen an  $O_2^+$  und  $NO^+$  hinzu, während diese in der F-Schicht durch  $O^+$  verdrängt werden. Die Ionen- und Elektronendichten weisen in allen Schichten einen Tagesgang auf, wobei das Maximum am Nachmittag und das Minimum kurz vor Sonnenaufgang auftritt. Außerdem nehmen ihre absoluten Anzahldichten zunächst mit der Höhe zu und erreichen ihr Maximum ( $\approx 10^{11}$ - $10^{12}$  Teilchen  $m^{-3}$ ) in der F-Schicht in 200-300 km Höhe. Auf Grund vertikaler Transportprozesse stimmt die Höhe des F-Schichtmaximums nicht zwingend mit dem Ort der höchsten Ionisationsraten überein. Außerdem liegt die Dichte der geladenen Teilchen selbst hier noch um 3-4 Größenordnungen unterhalb der Neutralgasdichte. Trotz der vorhandenen Ionen gibt es mit Ausnahme über dem Äquator keine starken elektrischen Felder, da die Ionen mit dem Neutralgas transportiert werden und die Elektronen ihnen entlang des Magnetfeldes folgen können. Generell ist der Einfluss des Erdmagnetfeldes im Vergleich zur Magnetosphäre relativ gering. Die D- und E-Schicht überlagern sich räumlich mit dem oberen Teil der MA und umfassen damit den Bereich, in dem präzipitierende Teilchen einen direkten Einfluss auf die chemische Zusammensetzung der Atmosphäre nehmen. Darauf wird in Kap. 2.3 genauer eingegangen.

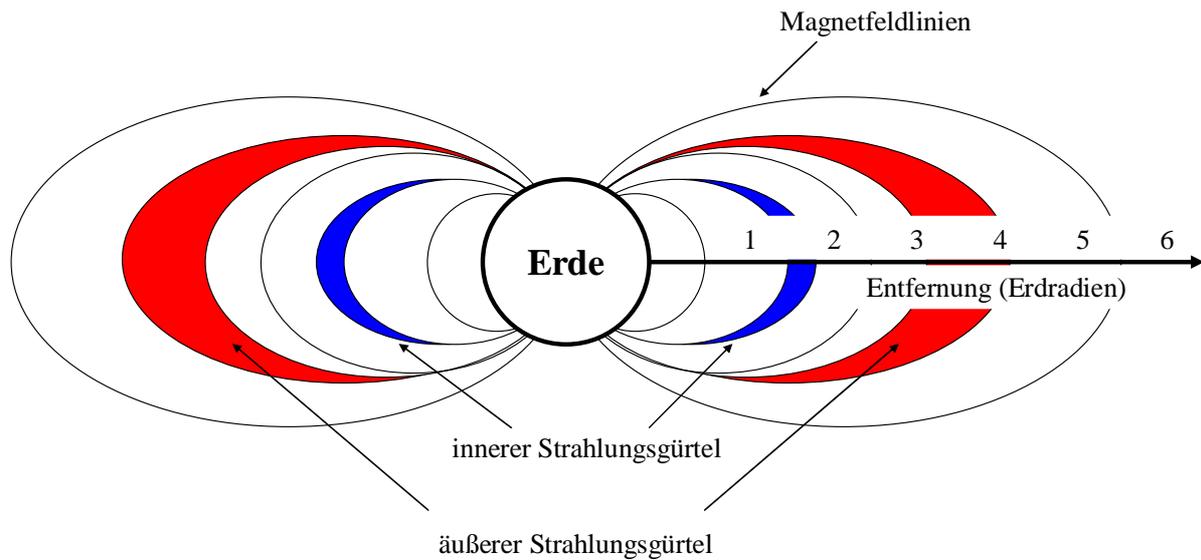
### 2.2 Quellen präzipitierender Teilchen

#### 2.2.1 Die Strahlungsgürtel der Erde

Die geladenen Teilchen gelangen nicht in allen Fällen auf direktem Weg vom Sonnenwind in die MA, sondern werden zuvor in bestimmten Regionen des Erdmagnetfeldes über mehrere Tage bis Monate gespeichert. Ein solcher Bereich sind die Strahlungsgürtel, die in  $55^\circ$ - $75^\circ$  geomagnetischer Breite mit der MA verbunden sind und sich dort mit dem Polarlichtoval (s. Kap. 2.2.2) überschneiden. Die Strahlungsgürtel [z. B. Kallenrode, 2010, Kap. 8] werden in einen inneren und einen äußeren Gürtel unterteilt (Abb. 2.5). Diese befinden sich im unteren Teil der Magnetosphäre in einer Höhe von etwa 0,2-2 Erdradien und 2,5-7 Erdradien, wobei die höchsten Teilchendichten in einer Entfernung von 1,5 bzw. 3,5 Erdradien auftreten. Auf Grund der höheren magnetischen Feldstärke an den Polen können die geladenen Teilchen nicht in hohe magnetische Breiten vordringen und sind daher über dem Erdäquator zentriert.

Die Teilchenpopulation im inneren Gürtel ist relativ stabil und unterliegt nur gelegentlich Schwankungen auf Grund solarer Einflüsse. Der Hauptbestandteil sind Protonen und

## 2. Präzipitierende Teilchen



**Abbildung 2.5.** Nicht maßstabsgetreue Darstellung der unteren Magnetosphäre und der Position ihrer Strahlungsgürtel.

Elektronen mit einer Energie in der Größenordnung von 10-100 MeV bzw. 0,01-1 MeV. Die Teilchen entstehen indirekt durch den Zerfall von kosmischer Strahlung, dem sogenannten „cosmic ray albedo neutron decay“ Mechanismus. So dringt die kosmische Strahlung bis in die unteren atmosphärischen Schichten vor, wo es zu Wechselwirkungen mit den vorhandenen Luftbestandteilen kommt. Die dabei entstehenden Neutronen werden nicht vom Erdmagnetfeld beeinflusst und können demnach auch hinauf bis in die untere Magnetosphäre gelangen. Dort zerfallen die Neutronen in ein Proton, ein Elektron und ein Antineutrino (Betazerfall) und gewährleisten somit einen kontinuierlichen Teilchennachschub, wenn dieser Vorgang innerhalb des inneren Gürtels stattfindet. Für das Erreichen des äußeren Gürtels ist die Lebensdauer der Neutronen ( $\approx 10$  min) allerdings zu kurz. Weiterhin kann es vorkommen, dass geladene Teilchen in der äußeren Magnetosphäre durch Rekombination neutrale Teilchen bilden. Diese können in Abwesenheit solarer Strahlung ebenfalls bis in den inneren Gürtel vordringen, wo sie dann auf der Tagseite als zusätzliche Quelle für Protonen und Elektronen dienen. Dahingegen stellen Wechselwirkungen der Teilchen mit neutralen Luftbestandteilen aus der Ionosphäre die Hauptsenke der Teilchen des inneren Gürtels dar.

Im Kontrast zum inneren Gürtel wird der äußere Gürtel stark von solaren und geomagnetischen Variationen beeinflusst. Der äußere Gürtel setzt sich im Wesentlichen aus Elektronen mit einer Energie in der Größenordnung  $>1$  MeV sowie aus  $H^+$ ,  $O^+$  und  $He^{2+}$  (0,1-5 MeV) zusammen. In der Nähe von Störungen im Erdmagnetfeld gelangen Teilchen aus

## 2. Präzipitierende Teilchen

der äußeren Magnetosphäre des Schweifs in den äußeren Gürtel. Nach dem Abklingen der Magnetfeldstörung bricht die zugehörige Verbindung beider Regionen aber zusammen, wodurch die Teilchen dann im äußeren Gürtel gefangen sind. Demnach ist der Nachschub an Teilchen an das Auftreten der Magnetfeldstörungen gebunden und erfolgt daher vergleichsweise unregelmäßig. Elektromagnetische Wellen und longitudinale Variationen des Magnetfeldes führen hingegen dazu, dass die Teilchen aus dem Gürtel heraus gestreut werden.

Störungen im Erdmagnetfeld stehen in der Regel im engen Zusammenhang mit Variationen im Sonnenwind und somit auch zu solaren Ereignissen. Beispielsweise kommt es durch die Beschleunigung des Sonnenwindes zur Kompression des Erdmagnetfeldes, was folglich zu einer Erhöhung der magnetischen Feldstärke führt. Die Teilchen im Magnetfeld rotieren (gyrieren) um einen Bereich gleicher Feldstärke. Durch die Kompression verringert sich daher ihr Gyroradius, was bei gleichzeitiger Drehimpulserhaltung zu einer Beschleunigung der Teilchen führt. Wenn das Magnetfeld nach der Normalisierung des Sonnenwindes wieder in seinen ursprünglichen Zustand zurückspringt, verursacht die damit einhergehende Schwächung des Magnetfeldes eine Expansion der Teilchenorbitale. Bei entsprechender Stärke der Kompression und anschließenden Expansion des Magnetfeldes kommt es zur Beschleunigung der Teilchen auf relativistische Geschwindigkeiten. Dadurch wird es den Teilchen ermöglicht den äußeren Strahlungsgürtel zu verlassen und bis in die MA einzudringen. Zu beachten ist, dass dieser Vorgang nur auf der Tagseite stattfindet, da dort der Sonnenwind direkt auf das Erdmagnetfeld trifft. Außerdem verlassen die Teilchen den äußeren Gürtel nicht zwangsweise Richtung Erdoberfläche.

### 2.2.2 Die Auroraregion

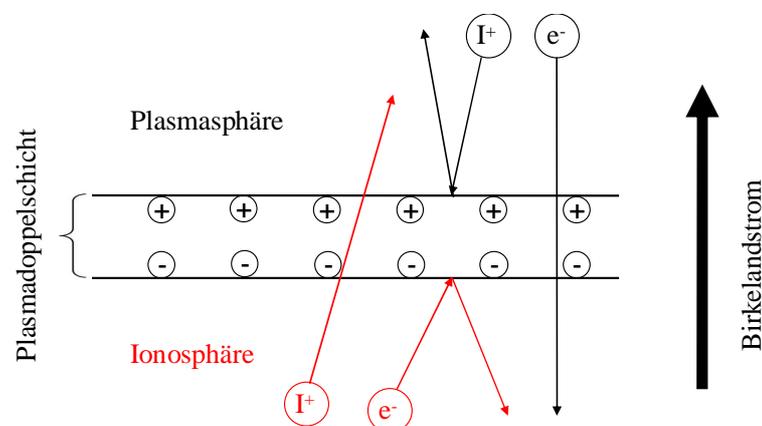
Die Auroraregion [Carlson und Egeland, 1995] ist ein Teil der Ionosphäre und erstreckt sich in etwa 80-500 km Höhe. Der Kernbereich liegt in ungefähr 90-150 km, wo sowohl relativ hohe Elektronendichten als auch eine hohe Leitfähigkeit der Atmosphäre auftreten. Dadurch kommt es zur Ausbildung eines westwärts fließenden Stroms (auroraler Elektrojet). Horizontal bedeckt die Auroraregion ungefähr das Gebiet  $55^{\circ}$ - $75^{\circ}$  geomagnetischer Breite, welches auf Grund seiner Form sowie dem Auftreten von Polarlichtern auch als Polarlichtoval bezeichnet wird. Polarlichter oder die Aurora entstehen durch die Emission von Licht von verschiedenen atmosphärischen Spurengasen. Da es sich bei den zu Grunde liegenden Prozessen um Ionisation und Anregung der vorhandenen Luftbestandteile handelt, stehen die räumliche Ausdehnung sowie das zeitliche Auftreten der Polarlichter im engen

## 2. Präzipitierende Teilchen

Zusammenhang mit solaren und geomagnetischen Ereignissen. Die Ionisation geht dabei vorrangig auf Elektronen zurück, welche zuvor auf eine relativistische Energie von mehreren 100 keV beschleunigt wurden.

Die Beschleunigung der Elektronen erfolgt vermutlich in Regionen mit einem starken Potentialabfall zwischen zwei kollisionsfreien Plasmen, was in Haerendel [2001] und Wolf [1995] genauer beschrieben ist. Die grundsätzliche Voraussetzung für die Entstehung einer derartigen Zone liegt im Auftreten eines parallel zum Magnetfeld fließenden Stroms. Dessen Strömungsgeschwindigkeit muss außerdem deutlich über den zugehörigen thermischen Geschwindigkeiten der freien Ladungsträger liegen. Ein solcher Strom existiert in der Atmosphäre in der Form des Birkelandstroms, welcher in polaren Breiten das relativ kalte und dichte ionosphärische Plasma mit dem vergleichsweise heißen und dünnen Plasma der Magnetosphäre verbindet. Angetrieben wird der Birkelandstrom durch Wechselwirkungen zwischen dem Sonnenwind und dem Erdmagnetfeld in der Magnetosphäre. Somit verursachen Variationen im Sonnenwind über Störungen im Erdmagnetfeld letztlich auch Schwankungen im Birkelandstrom. Kommt es dadurch zu einer Erhöhung des Stromflusses, werden mehr Ladungsträger zum Transport des Stroms benötigt. Besonders bei einem aufwärts gerichteten Birkelandstrom stehen dafür allerdings mitunter nicht genügend magnetosphärische Elektronen zur Verfügung. Somit kommt es an der Oberseite der Ionosphäre zur Ausbildung eines elektrischen Feldes, welches Spannungen von einigen kV aufweisen kann.

Die so entstandene Potentialbarriere wird auch Plasmadoppelschicht (PDS) genannt und weist hier eine Dicke von  $\approx$ mm-cm auf (Abb. 2.6). Innerhalb der PDS liegt Ladungstrennung vor



**Abbildung 2.6.** Ladungsverteilung in einer Plasmadoppelschicht und die Auswirkung auf die Bewegung von Ionen ( $I^+$ ) und Elektronen ( $e^-$ ) in der Plasma- (schwarz) und Ionosphäre (rot).

## 2. Präzipitierende Teilchen

und die Ausrichtung des elektrischen Felds stimmt mit der Flussrichtung des Birkelandstroms überein. Daher werden die nach oben wandernden ionosphärische Elektronen an der PDS reflektiert, wohingegen die ionosphärischen Ionen die Schicht durchdringen können. Der gegenteilige Fall gilt für magnetosphärische Ladungsträger, wo ein Abwärtswandern der Ionen verhindert wird und nur die Elektronen nach unten hindurch gelassen werden. Die Ladungsträger, welche die PDS tatsächlich durchdringen, erfahren auf Grund des hohen Potentialunterschieds eine starke Beschleunigung auf relativistische Geschwindigkeiten und können bis in die MLT-Region vordringen.

### 2.3 Einfluss auf die Chemie der mittleren Atmosphäre

Präzipitierende Teilchen unterscheiden sich vor allem hinsichtlich ihrer Energie, wodurch sie einen höhenabhängigen Einfluss auf die Ionisationsraten in der Erdatmosphäre nehmen (Tab. 2.1). Während EUV Strahlung vor allem in der Thermosphäre oberhalb von >110 km die primäre Ursache der Ionisation der Luftbestandteile ist, spielen in den darunter liegenden Regionen präzipitierende Teilchen die dominierende Rolle. Die Teilchenpopulation der Auroraelektronen hat einen maßgeblichen Einfluss oberhalb der Mesopause und kontrolliert die Ionisationsraten bis in etwa 110 km. Dahingegen können die relativistischen Elektronen aus den Strahlungsgürteln nahezu in die gesamte MA vordringen, wobei die größten Auswirkungen in der Mesosphäre zu erwarten sind. In der Stratosphäre und Troposphäre überwiegt der Einfluss von SPEs bzw. kosmischer Strahlung.

Unter der Annahme eines isotropisch einfallenden, nicht streuenden Teilchens (z. B.  $H^+$ ,  $He^{2+}$ ), kann der direkte mittlere Energieverlust des Teilchens  $\bar{E}$  entlang einer Strecke  $s$  in der Atmosphäre mit Hilfe der Bethe-Bloch-Gleichung beschrieben werden:

$$\frac{d\bar{E}}{ds} = \frac{-e^4}{4 \cdot \pi \cdot \epsilon_0^2 \cdot m_e} \cdot \frac{Z^2}{v^2} \cdot n_e \cdot \left[ \ln \left( 2 \cdot m_e \cdot \frac{v^2}{E_B \cdot (1 - \beta^2)} \right) - \beta^2 \right] \quad (Gl.1).$$

Der Energietransfer des Teilchens an die Hintergrundatmosphäre hängt zunächst von Fundamentalkonstanten wie der die Elementarladung  $e$ , der elektrischen Feldkonstante  $\epsilon_0$  und der Elektronenruhemasse  $m_e$  ab. Hinzukommen die Eigenschaften des einfallenden Teilchens (Ladungszahl  $Z$ , Geschwindigkeit  $v$ ) sowie die Charakteristika der Atmosphäre (mittlere Anregungsenergie  $\bar{E}_B$ , Elektronendichte  $n_e$ ). Die Elektronendichte ist hierbei eine Funktion der geometrischen Höhe. Bei relativistischen Geschwindigkeiten muss noch das Verhältnis

## 2. Präzipitierende Teilchen

**Tabelle 2.1.** Zusammenfassung verschiedener Teilchenpopulationen, deren Ursprung und ungefähren Energie- und Einflussbereiche.

Teilchenpopulation	Ursprung	Energiebereiche	Einflussbereich
Auroraelektronen	gleichläufig rotierende Regionen und koronale Massenauswürfe	0,001-0,01 MeV	untere Thermosphäre
relativistische Elektronen	Strahlungsgürtel	0,1-1 MeV	Mesosphäre und untere Thermosphäre
solare Protonenereignisse	koronale Massenauswürfe	1-1000 MeV	Stratosphäre und untere Mesosphäre
kosmische Strahlung	außerhalb des Sonnensystems	$10-10^{14}$ MeV	Troposphäre

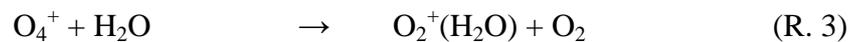
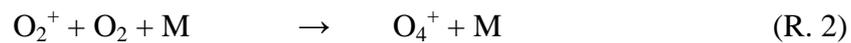
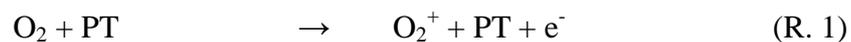
der Teilchengeschwindigkeit zur Lichtgeschwindigkeit berücksichtigt werden ( $\beta = v/c$ ). Für einen invarianten Hintergrund ( $n_e = \text{konst.}$ ) gilt bei sehr hohen Geschwindigkeiten ( $v \rightarrow c$ ,  $\beta \rightarrow 1$ ), dass die Energieabgabe einen konstanten Wert annimmt und für  $v = c$  minimal wird (hier nicht gezeigt). Somit findet während der Bewegung des Teilchens durch die Atmosphäre nahezu keine Ionisation der Luftbestandteile statt, während der Großteil der Teilchenenergie erst kurz vor Erreichen des Haltepunktes abgegeben wird. Über den dabei zurückgelegten Weg kann die ungefähre Eindringtiefe des Teilchens abgeschätzt werden.

Gleichung 1 kann allerdings nicht für Elektronen verwendet werden, da bei diesen weitere Energieverluste durch Bremsstrahlung berücksichtigt werden müssen. Dennoch kann auch durch die Einführung eines zusätzlichen Terms für die Bremsstrahlung kein Rückschluss auf die mittlere Eindringtiefe der Elektronen gezogen werden, da diese in der Atmosphäre stark streuen. Die Erstellung genauer Höhenprofile der Eindringtiefe von Elektronen in Abhängigkeit von ihrer Energie erfordern daher Monte-Carlo-Simulationen, welche z. B. in Wissing und Kallenrode [2009, Abb. 2] zu finden sind.

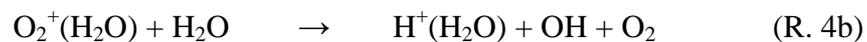
## 2. Präzipitierende Teilchen

### 2.3.1 Produktion von reaktiven Wasserstoffverbindungen (HO<sub>x</sub>)

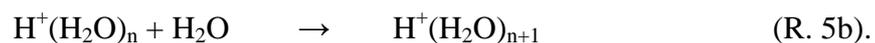
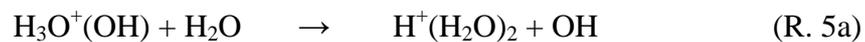
In der Regel entsteht HO<sub>x</sub> (=H+OH+HO<sub>2</sub>) in der oberen Mesosphäre und unteren Thermosphäre direkt aus der Fotolyse von Wasserdampf bei Wellenlängen <200 nm. In der unteren Mesosphäre und der Stratosphäre kommt es durch die Reaktion von H<sub>2</sub>O mit O(<sup>1</sup>D) ebenfalls zur Bildung von zwei OH, wobei das O(<sup>1</sup>D) aus der Fotolyse von H<sub>2</sub>O (λ<147 nm) oder O<sub>3</sub> (λ<320 nm) stammt. In Abwesenheit von solarer Strahlung sind vor allem präzipitierende Teilchen für die Bildung von HO<sub>x</sub> verantwortlich, was generell über komplexe Reaktionsketten aus den Ausgangsstoffen H<sub>2</sub>O und O<sub>2</sub> erfolgt. Die zu Grunde liegende Ionenchemie wurde bereits in Solomon et al. [1981] beschrieben und beginnt damit, dass die präzipitierende Teilchen (PT) O<sub>2</sub> ionisieren und dabei ein Elektron freisetzen (R. 1). Anschließend wird O<sub>2</sub><sup>+</sup> indirekt an ein Wasserdampfmolekül angelagert (R. 2 und R. 3), was zur Bildung eines Ionenclusters führt.



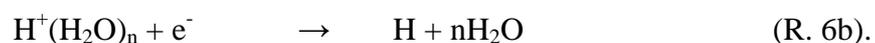
In Folge dessen wird das bestehende Ionencluster unter dem Abbau von H<sub>2</sub>O und der Entstehung von O<sub>2</sub> in ein weiteres Ionencluster konvertiert, was auf zwei unterschiedlichen Wegen erfolgen kann (R. 4a-b):



Anschließend führen erneute Reaktionen mit H<sub>2</sub>O zur Bildung von protonisierten Wasserclustern (R. 15a-b):



Diese beiden Reaktionen werden dabei auch von der Rekombination mit Elektronen begleitet:



## 2. Präzipitierende Teilchen

Somit ergeben sich mehrere mögliche Reaktionsabläufe, die aber alle im Endeffekt die Bildung von einem OH und einem H aus einem H<sub>2</sub>O zur Folge haben. Der gesamte Prozess der teilcheninduzierten HO<sub>x</sub>-Bildung weist eine starke Höhenabhängigkeit auf, was zum einen an der Druckabhängigkeit von R. 2 und zum anderen durch die zur Verfügung stehenden Menge an H<sub>2</sub>O liegt. Modellrechnungen [Sinnhuber et al., 2012, Abb. 6A] und in situ Raketenmessungen [Kopp et al., 1985] zeigen, dass das Auftreten von positiven Wasserionenclustern auf Höhen <80-85 km beschränkt ist. Unter Berücksichtigung von R. 4a-5b ist daher anzunehmen, dass dies auch für die HO<sub>x</sub>-Produktion gilt.

In der Stratosphäre und Mesosphäre kommt es außerdem durch die Reaktion von H mit O<sub>2</sub> zur Bildung einer weiteren HO<sub>x</sub>-Komponente (HO<sub>2</sub>), wobei dieser Vorgang einen Stoßpartner benötigt und daher in größeren Höhen keine Rolle mehr spielt. Neben H<sub>2</sub>O dient auch molekularer Wasserstoff (H<sub>2</sub>) als Quelle von H und OH, da dieser schnell mit O oder O(<sup>1</sup>D) reagiert. Allerdings gewinnen diese Reaktionen durch die Beteiligung von atomarem Sauerstoff erst in der oberen Mesosphäre und unteren Thermosphäre an Bedeutung. Im Gegenzug kommt es bei der Rekombination von H mit HO<sub>2</sub> oder durch die Fotolyse von H<sub>2</sub>O aber wiederum zur Bildung von H<sub>2</sub>.

### 2.3.2 Bildung von reaktiven Stickstoffverbindungen (NO<sub>x</sub>)

Die Produktion von NO<sub>x</sub> (=N+NO+NO<sub>2</sub>) durch präzipitierende Teilchen [z. B. Nicolet, 1965] basiert zunächst analog zu R. 1 auf der Bildung von O<sub>2</sub><sup>+</sup> und N<sub>2</sub><sup>+</sup>. Allerdings kann die Ionisation auch dissoziativ ablaufen, wodurch es zur Entstehung von N<sup>+</sup> und O<sup>+</sup> kommt. Die Bildung von N erfolgt anschließend hauptsächlich durch dissoziative Rekombination von N<sub>2</sub><sup>+</sup> (R. 7) und NO<sup>+</sup> (R. 8) oder durch einfachen (R. 9) und dissoziativen Ladungsaustausch (R. 10-12).



## 2. Präzipitierende Teilchen

Die Produktion von NO verläuft ähnlich, wobei vor allem folgende Reaktion von Bedeutung ist:



Unter der Berücksichtigung der sehr schnellen Rekombination von  $\text{NO}^+$  (R. 8), führen die Reaktionen R. 10-11 und R. 13 effektiv zur Bildung von zwei N. Modellrechnungen von Sinnhuber et al. [2012] und Nieder et al. [2014] deuten darauf hin, dass unterhalb von 65 km die Nettoproduktionsrate von  $\text{NO}+\text{N}$  relativ konstant bei etwa 1,1 pro Ionenpaar liegt. In höheren atmosphärischen Schichten, besonders in der unteren Thermosphäre, steigt sie dann auf ca. 1,8 pro Ionenpaar in 130-140 km an. Die Bildung von  $\text{NO}_2$  findet vorrangig durch die Reaktion von NO mit  $\text{O}_3$  statt. Während  $\text{NO}_2$  in der Nacht äußerst stabil ist, wird es am Tage entweder durch Fotolyse oder durch Rekombination mit O schnell abgebaut. Vor allem in der Stratosphäre dient  $\text{NO}_2$  als Reservoirgas für NO, wobei seine Bedeutung mit zunehmender Höhe stark abnimmt.

### 2.4 Geomagnetische Indizes

Der tatsächliche Einfluss präzipitierender Teilchen auf die Chemie der Atmosphäre lässt sich nur über deren direkte Messungen der Flüsse und Energiespektren bestimmen. Allerdings liegen noch keine langen Zeitreihen mit globaler Abdeckung vor. Außerdem weichen diese Beobachtungen vor allem in Zeiten schwacher geomagnetischer Aktivität erheblich von Bodenmessungen ab [Rodgers et al., 2013]. Daher werden in dieser Arbeit geomagnetische Indizes zur Abschätzung der Stärke der geomagnetischen Aktivität verwendet, die äquivalent zur Auftrittswahrscheinlichkeit von präzipitierenden Teilchen sind. Eine Übersicht der häufig verwendeten Indizes ist in Allen [1982] zu finden. Im Grunde geben alle Indizes Magnetfeldstörungen in der Magnetosphäre und Ionosphäre an. Allerdings enthalten die Indizes keine Information über die tatsächlichen Flüsse und nicht jede geomagnetische Störung muss auch zu Teilchenereignissen führen. Es existieren eine Reihe verschiedener Indizes und die geeignete Wahl hängt in erster Linie vom betrachteten Raum-Zeit-Intervall ab. Daher ist der Zusammenhang bzw. die Verwendung einiger ausgewählter Indizes in Tab. 2.2 zusammengefasst und wird im Folgenden näher erläutert.

Der grundlegende Index zur Charakterisierung der Stärke von Magnetfeldschwankungen ist der K-Index, welcher die lokalen Variationen auf kurzen Zeitskalen (3 h) beschreibt. Der K-Wert entspricht der mittleren Abweichung der am stärksten gestörten

## 2. Präzipitierende Teilchen

**Tabelle 2.2.** Übersicht einiger ausgewählter geomagnetischer Indizes in Abhängigkeit des Mittelungszeitraums und der Skalierung. Globale Indizes weisen ein „p“ (engl. planetary) im Namen auf. Werte in Klammern geben, wenn vorhanden, die entsprechende Einheit an.

	<b>quasi-logarithmisch</b>	<b>quasi-linear</b>
3-Stunden-Mittel	$K \rightarrow K_s \rightarrow K_p$	ap (2 nT)
Tagesmittel	---	Ap (2 nT)

Magnetfeldkomponente bzgl. eines ruhigen (regulären) Tagesganges. Hierbei werden aber nur die beiden horizontalen Komponenten berücksichtigt, da die vertikale Komponente auch durch lokale Effekte aus der Erdkruste beeinflusst wird. Der K-Index basiert auf einer quasi-logarithmischen Skala, die für stärkere geomagnetische Ereignisse eine gröbere Skalierung aufweist und diese folglich schlechter auflöst. Um die K-Werte verschiedener Observatorien vergleichen zu können, wurde der standardisierte  $K_s$ -Index eingeführt, welcher die geomagnetischen Schwankungen auf Grund von saisonalen und geografischen Gegebenheiten berücksichtigt.

Die bisher beschriebenen Indizes beziehen sich nur auf lokale Schwankungen des Erdmagnetfelds. Um Variationen auf einer globalen Skala abschätzen zu können, werden die  $K_s$ -Werte von mehreren Observatorien zum planetaren  $K_p$ -Index ( $K_p$ ) arithmetisch gemittelt. Da die Erstellung von Tagesmitteln aus den  $K_p$ -Werten durch die quasi-logarithmische Skala nicht direkt möglich ist, erfolgt zunächst die Transformation der  $K_p$ -Werte auf eine quasi-lineare Skala. Die dadurch erhaltene äquivalente 3-stündliche planetare Amplitude (ap-Index) kann dann über einen ganzen Tag gemittelt werden (Ap-Index) und gibt demnach die mittlere tägliche Störung auf globaler Skala an. Aus den ap-Werten können folglich auch Mittel über längere Zeiträume (Monate-Jahre) berechnet werden.

Es existieren neben den hier vorgestellten Indizes noch weitere geläufige Indikatoren, welche sich nur auf bestimmte atmosphärische Regionen beziehen. Dazu zählt beispielsweise der Ae-Index, welcher sich auf Messungen innerhalb der Auroraregion beschränkt und die dort stattfindenden Variationen im auroralen Elektrojet (s. Kap. 2.2.2) repräsentiert. In der vorliegenden Arbeit wurde hauptsächlich auf den Ap-Index zurückgegriffen, da dieser ein globaler Index ist und auch das Erstellen von mehrtägigen Mitteln auf Grund der quasi-linearen Skala arithmetisch erfolgen kann. Außerdem wird er häufig in der Literatur

## 2. Präzipitierende Teilchen

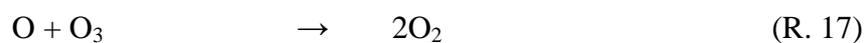
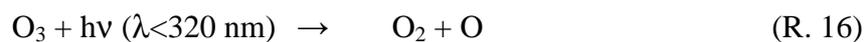
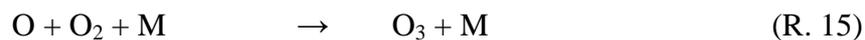
verwendet, weshalb ein direkter Vergleich mit den Ergebnissen in dieser Arbeit möglich ist. Details zur Verwendung und Interpretation des Ap-Index werden in Kap. 4.3 erläutert.

### 3. Ozon in der mittleren Atmosphäre

#### 3.1 Bildung und Abbau von Ozon

##### 3.1.1 Reaktionen in einer reinen Sauerstoffatmosphäre

Unter der Voraussetzung einer reinen Sauerstoffatmosphäre erfolgt die Ozonbildung in zwei Schritten [Chapman, 1930]. Zunächst kommt es durch die Absorption solarer UV Strahlung zur Fotolyse von  $O_2$  (R. 14). In der Thermosphäre findet dies vor allem bei Wellenlängen von 130-175 nm (Schumann-Runge-Kontinuum) statt, während in der Meso- und Stratosphäre längere Wellenlängen von 175-200 nm (Schumann-Runge-Banden) und 200-242 nm (Herzberg-Kontinuum) von Bedeutung sind. Anschließend rekombiniert der entstandene atomare Sauerstoff mit einem weiteren Sauerstoffmolekül und einem zusätzlichen Stoßpartner (M) zu  $O_3$  (R. 15), wobei M die überschüssige Reaktionsenergie aufnimmt. Dies ist die einzige bekannte Reaktion in der Atmosphäre, welche tatsächlich zur Nettobildung von  $O_3$  führt. Ihre Effektivität hängt dabei stark von der Konzentration von O ab, da der Anteil von  $O_2$  mehrere Größenordnungen über dem von O liegt. In diesem Zusammenhang spielt folglich auch die zur Verfügung stehende solare Strahlung eine wichtige Rolle. Der Abbau von  $O_3$  erfolgt in erster Linie durch die Fotodissoziation (R. 16) bei Wellenlängen von 200-320 nm (Hartley-Bande). Allerdings führt diese Reaktion auch zur Bildung des Ozonäquivalents O, was wiederum für die Ozonproduktion benötigt wird (R. 15). Folglich verursacht dieser Vorgang keinen Nettoozonverlust, wodurch lediglich die Rekombination von  $O_3$  mit O (R. 17) zu einem tatsächlichen Ozonabbau führt.

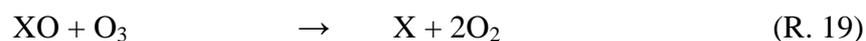
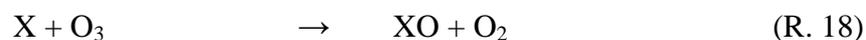


### 3. Ozon in der mittleren Atmosphäre

#### 3.1.2 Katalytischer Ozonabbau

Das im vorangegangenen Kap. 3.1.2 beschriebene Reaktionsschema ist auf Grund der Annahme einer reinen Sauerstoffatmosphäre stark vereinfacht und kann unter der Berücksichtigung weiterer atmosphärischer Radikale wie HO<sub>x</sub>, NO<sub>x</sub>, ClO<sub>x</sub> (=Cl+ClO+Cl<sub>2</sub>O<sub>2</sub>) und BrO<sub>x</sub> (=Br+BrO) erheblich komplexer werden. Die damit einhergehenden katalytischen Zyklen werden in diesem Kapitel genauer analysiert und sind in Lary [1997] ausführlich beschrieben. Der Ozonabbau umfasst in der Regel zwei freie Radikale (=Katalysatoren), wobei in den folgenden Reaktionsketten zunächst nur Radikale einer Familie berücksichtigt werden.

Im ersten Zyklus (R. 18-19) wird O<sub>3</sub> direkt durch das Radikal X abgebaut, was die Anlagerung von O an das Radikal nach sich zieht und zur Bildung von O<sub>2</sub> führt (R. 18). Bei der neuen Spezies XO handelt es sich ebenfalls um ein Radikal. Dieses zerstört erneut direkt O<sub>3</sub>, wobei neben O<sub>2</sub> auch das Ausgangsradikal X wieder gebildet wird (R. 19). Insgesamt werden somit zwei Ozonmoleküle in drei Sauerstoffmoleküle umgewandelt (R. 20), während die Gesamtkonzentration an ozonabbauenden Radikalen konstant bleibt. Letzteres ist auch der Grund für die hohe Effektivität dieser katalytischen Zyklen, da bereits geringe Mengen von diesen Radikalen zu erheblichen Ozonverlusten führen können.

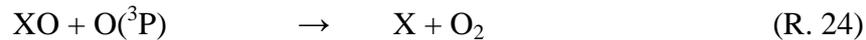
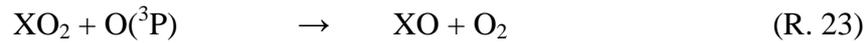


Alternativ kann der direkte Ozonabbau auch indirekt durch die Zerstörung des Ozonäquivalents O(<sup>3</sup>P) erfolgen. Dabei wird R. 19 durch R. 21 ersetzt, wobei der Nettoeffekt erhalten bleibt (R. 22).



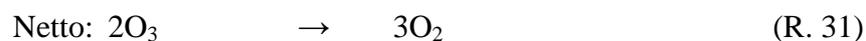
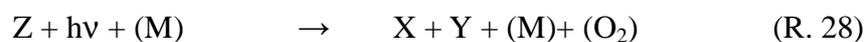
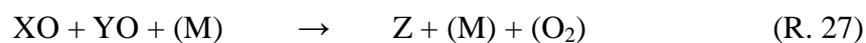
Sollten die beide Reaktionen (R. 18-19) O(<sup>3</sup>P) anstelle von O<sub>3</sub> abbauen (R. 23-24), muss ein zusätzlicher Schritt unter der Einbeziehung eines Stoßpartners stattfinden (R. 25), um das ursprüngliche Radikal wieder zu bilden.

### 3. Ozon in der mittleren Atmosphäre



Bei diesem Zyklus werden folglich zwei  $\text{O}({}^3\text{P})$  in ein  $\text{O}_2$  umgewandelt, wobei der Nettoeinfluss identisch zu den beiden oben vorgestellten Reaktionsketten ist. Anzumerken ist, dass  $\text{O}({}^3\text{P})$  hauptsächlich aus der Fotolyse von  $\text{O}_2$  entsteht und die Effektivität dieser Reaktionskette damit stark an die vorhandene solare Einstrahlung gekoppelt ist. Ein weiterer Aspekt ist, dass in R. 25 auch  $\text{O}_3$  an Stelle von  $\text{O}_2$  abgebaut werden. Diese Reaktion entspricht R. 18, was folglich in der Initialisierung des zugehörigen Reaktionszyklus' (R. 18-19) resultiert. Dieser führt aber letztlich zur erneuten Bildung des Radikals X, wodurch die Verbindung zum 3. Zyklus (R. 23-25) wieder hergestellt ist. Auch bei diesem Umweg bliebe der Nettoeffekt mit  $2\text{O}({}^3\text{P}) + 2\text{O}_3 \rightarrow 4\text{O}_2$  im Prinzip erhalten. Grundsätzlich können die drei vorgestellten Zyklen auch mit Radikalen aus unterschiedlichen Familien ablaufen. Allerdings muss hierbei berücksichtigt werden, dass diese Radikale nicht direkt ineinander umwandelbar sind. Dafür sind zusätzliche Reaktionen notwendig, wodurch sich die Komplexität der Reaktionszyklen erheblich erhöht. Dies soll mit einer vierten relevanten Reaktionskette verdeutlicht werden.

Im ersten Schritt (R. 27) werden die Ausgangsradikale XO und YO in ein Reservoirgas Z umgewandelt. Anschließend entstehen durch die Fotolyse von Z (R. 28) die Radikale X und Y, welche letztlich zu einem direkten Ozonverlust führen (R. 29-30)



Hierbei stellt R. 28 eine Nettoreaktion dar, die sowohl mehrere Fotolyse- als auch Stoßreaktionen umfassen kann. Dabei ist das Vorhandensein eines Stoßpartners nicht in allen Fällen notwendig und es kommt auch nur bei einer der beiden Reaktionen R. 27 oder R. 28

### 3. Ozon in der mittleren Atmosphäre

zur Bildung von  $O_2$ , was durch die Einklammerung von M bzw.  $O_2$  verdeutlicht werden soll. Generell gilt, dass der genaue Ablauf von R. 27-28 von den Ausgangsradikalen abhängt, der Nettoeffekt aber identisch bleibt (R. 31). Eine wichtige Eigenschaft des Zyklus' ist die nächtliche Unterbrechung, welche mit einer Anreicherung des Reservoirgases Z verbunden ist. Mit Sonnenaufgang werden dann in kurzer Zeit relativ große Mengen an Radikalen freigesetzt, wodurch die vorliegende Ozonkonzentration stark sinkt.

Die vier vorgestellten katalytischen Zyklen funktionieren im Prinzip für alle Radikale ( $HO_x$ ,  $NO_x$ ,  $ClO_x$ ,  $BrO_x$ ). Wegen der hauptsächlichen Luftbestandteile  $N_2$  und  $O_2$  sowie der relativ hohen Wasserdampfkonzentration im Vergleich zu anderen Spurengasen, führen präzipitierende Teilchen allerdings im Wesentlichen zur Bildung von  $HO_x$  und  $NO_x$ . Dahingegen stammen  $ClO_x$  und  $BrO_x$  vorrangig aus natürlichen und anthropogenen Emissionen von der Erdoberfläche. Da aber für den 4. Zyklus (R. 27-30) entweder eine  $ClO_x$ - oder  $BrO_x$ -Verbindung erforderlich ist, spielt diese Reaktionskette in dieser Arbeit nur eine untergeordnete Rolle.

Da  $HO_x$  eine relative kurze Lebensdauer ( $\approx$ Sekunden-Stunden) in der MA aufweist, sind dessen Auswirkungen auf  $O_3$  auf die Quellregion in der oberen Mesosphäre beschränkt. Dahingegen lebt  $NO_x$  zumindest in der Polarnacht deutlich länger ( $\approx$ Tage-Monate) und kann mit der vorherrschenden Zirkulation weit weg vom Entstehungsort in der oberen Mesosphäre und unteren Thermosphäre transportiert werden. Unter der weiteren Berücksichtigung der Effektivität der einzelnen Zyklen ist  $HO_x$  eher für den Ozonverlust in Mesosphäre auf kurzen Zeitskalen (Stunden-Tagen) verantwortlich. Dahingegen dominiert der Einfluss von  $NO_x$  vor allem in der Stratosphäre und verursacht dort auch saisonale Ozonvariationen [Jackman et al., 2014]. Modellsimulationen von Verronen und Lehmann [2015] weisen allerdings auf zusätzliche mesosphärische Ozonverluste auf saisonalen Zeitskalen durch  $NO_x$  hin, indem  $NO_x$  die Aufteilung der einzelnen  $HO_x$ -Komponenten untereinander modifiziert.

#### 3.2 Transportprozesse in der mittleren Atmosphäre

Die Dynamik der Troposphäre wird hauptsächlich durch die unterschiedliche solare Einstrahlung zwischen dem Äquator und den Polen bestimmt. Dahingegen geht der Antrieb der Zirkulation der MA auch zu einem wesentlichen Teil auf atmosphärische Wellen zurück [Andrews et al., 1987, Kap. 1]. Die Wellenamplituden sind in ihrer vorrangigen Entstehungsregion in der Troposphäre noch sehr klein ( $\approx cm\ s^{-1}$ ). Auf Grund der nach oben

### 3. Ozon in der mittleren Atmosphäre

exponentiell abnehmenden Luftdichte wachsen sie allerdings mit steigender Höhe sehr schnell auf  $10\text{-}100\text{ m s}^{-1}$  an, was der Größenordnung des Hintergrundwindes entspricht. Erreichen die Wellenamplituden eine kritische Größe, werden die Wellen instabil und brechen. Dabei geben sie Energie und Impuls auf die Hintergrundzirkulation ab. Die sich vorrangig in zonaler Richtung ausbreitenden Wellen führen so zunächst zu einer Beschleunigung des zonalen Hintergrundwindes in Richtung der Phasengeschwindigkeit der Welle. In Kombination mit der Corioliskraft wird eine zusätzliche meridionale Beschleunigung induziert, welche letztlich den globalen meridionalen und vertikalen Transport steuert, die sogenannte Brewer-Dobson-Zirkulation (BDZ) [Butchart, 2014].

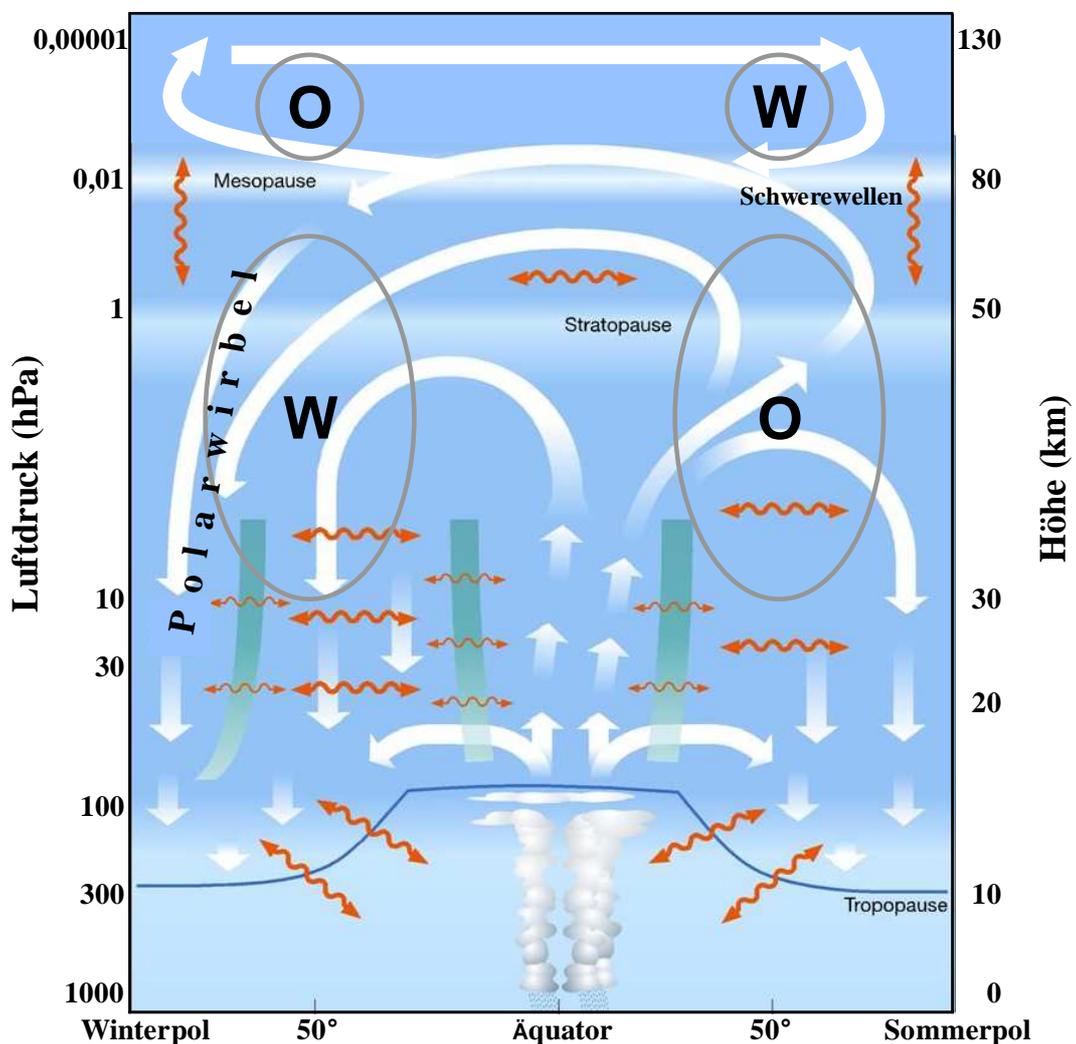
Die BDZ wurde nach ihren Entdeckern Alan Brewer und Gordon Dobson benannt, die eine derartige Zirkulation auf Grund von globalen Wasserdampf- und Ozonbeobachtungen postulierten. Allerdings umfasste die BDZ ursprünglich nur die Stratosphäre und wurde erst später um den mesosphärischen Zweig erweitert, weshalb abweichende Nomenklaturen in der Literatur auftreten. Hier bezieht sich die BDZ folglich auf die meridionalen und vertikalen Luftbewegungen in der Strato- und Mesosphäre. Die gesamte Zirkulation beruht darauf, dass der diabatische Einfluss der atmosphärischen Wellen einen Temperaturgradienten in zonaler Richtung verursacht. Dieser wird im Folgenden von adiabatisch aufsteigenden und absinkenden Luftmassen bzw. durch die damit einhergehende Erwärmung und Abkühlung der Luft kompensiert.

Das grundsätzliche stratosphärische Zirkulationsmuster der BDZ (Abb. 3.1) ist durch aufsteigende Luftmassen über der tropischen Tropopause und einer polwärts gerichteten Bewegung in Höhe der Stratopause gekennzeichnet. Auf Grund der Massenerhaltung muss dies ein Absinken der Luft in mittleren und hohen Breiten zur Folge haben, wodurch es sowohl in der Nordhemisphäre (NH) als auch in der Südhemisphäre (SH) zur Ausbildung von je einer Zirkulationszelle kommt. Zu beachten ist, dass der Kreislauf nicht in der Stratosphäre, sondern in der Troposphäre geschlossen wird. Dafür dringt stratosphärische Luft durch turbulente Austauschprozesse in polaren Breiten in die Troposphäre ein und gelangt mittels hochreichender Konvektion in den Tropen in die Stratosphäre zurück. Diese gesamte Zirkulation verläuft relativ langsam ( $\approx \text{mm s}^{-1}$  bis  $\text{m s}^{-1}$ ) und das mittlere Alter der Luft beträgt in etwa 5 Jahre [Li et al., 2012].

Die stratosphärische Zirkulation wird im Wesentlichen durch planetaren Wellen (PW) angetrieben. Dabei handelt es sich um relativ zum Hintergrundwind westwärts wandernde, globalskalige Wellen, die beim überströmen von Gebirgen (z. B. Rocky Mountains,

### 3. Ozon in der mittleren Atmosphäre

Himalaya) oder durch zonal inhomogene Wärmefreisetzung (z. B. Land-Meer-Verteilung) entstehen. Die PW weisen horizontale Wellenlängen von  $\approx 10.000$  km und Periodendauern von mehreren Tagen auf, wobei die quasi-2, quasi-5, quasi-10 und quasi-16 Tage Welle dominieren. Die Aktivität der PW und damit auch die Stärke der stratosphärischen Zirkulation ist im Winter erheblich größer als in den Sommermonaten. Dadurch kommt zu einer Verringerung der meridionalen Spurengasgradienten in mittleren Breiten in der Winterhemisphäre. In dieser sogenannten Surfzone [McIntyre und Palmer, 1984] entstehen



**Abbildung 3.1.** Schematische Darstellung der Brewer-Dobson-Zirkulation und der Transportmuster in der unteren Thermosphäre. Weiße (rote) Pfeile zeigen die Bewegung der Luftmassen (Welleneinfluss). Grüne Balken kennzeichnen meridionale Transportbarrieren. Winde in zentraler Richtung (W = Westwind, O = Ostwind) sind als graue Kreise bzw. Ellipsen dargestellt [adaptiert von der Goethe Universität Frankfurt am Main, <https://www.uni-frankfurt.de/44336503/Atmosphaerischer-Transport>, zuletzt besucht am 26.10.15].

### 3. Ozon in der mittleren Atmosphäre

durch die erhöhte Turbulenz meridionalen Transportbarrieren in den Subtropen. Die verstärkte winterliche Aktivität der PW kann auch zum Zusammenbruch des Polarwirbels führen. Dabei dreht sich die vorherrschende Zirkulation um und es kommt zu einer schnellen und starken Erwärmung der Stratosphäre. Dieses Ereignis wird daher auch plötzliche Stratosphärenenerwärmung genannt, deren Auswirkungen sich aber auf Grund der Umkehr der Zirkulationsmuster in der gesamten MA zu sehen sind.

Der mesosphärische Zweig der BDZ geht im Wesentlichen auf Schwerewellen (SW) zurück. Letztere entstehen, wenn ein Luftpaket durch eine äußere Einwirkung aus seiner Ruhelage vertikal ausgelenkt wird (z. B. durch Orographie oder Konvektion). Folglich sind Gravitations- und Auftriebskraft die dominierenden Rückstellmechanismen. Schwerewellen werden in interne und externe SW unterteilt. Ersteren kommt dabei auf globaler Skala eine größere Bedeutung zu, da sie nicht an atmosphärische Grenzflächen gebunden sind. Bei SW handelt es sich um relativ hochfrequente, kleinskalige Wellen mit Periodendauern von wenigen Minuten bis Stunden und horizontalen Wellenlängen von  $\approx 10$ -1.000 km.

Im Gegensatz zu PW haben SW auf Grund ihrer Entstehungsmechanismen keine bevorzugte Ausbreitungsrichtung. Allerdings wird bei beiden Wellenarten die vertikale Ausbreitung stark durch die vorherrschenden zonalen Windfelder beeinflusst. Letztere sind die Folge der unterschiedlichen Erwärmung in der Winter- und Sommerhemisphäre, was in Kombination mit der Corioliskraft zu ausgeprägten Ostwinden im Sommer und Westwinden im Winter führt. Wie alle Wellen, breiten sich auch SW bevorzugt entgegengesetzt zum Hintergrundwind aus. Beim Brechen induzieren sie daher generell eine meridionale Beschleunigung vom Sommer- zum Winterpol. Auf Grund dessen kommt es in der Mesosphäre über dem Sommerpol zu aufsteigenden und über dem Winterpol zu absinkenden Luftbewegungen, wodurch die mesosphärische Zirkulation mit dem stratosphärischen Teil der BDZ verbunden wird. Weiterhin verursachen SW vor allem im Mesopausenbereich starke Turbulenz.

Die Zirkulation in der unteren Thermosphäre (Mesopause-130 km) ist kein Teil der BDZ und unterliegt auch keinem direkten Antriebsmechanismus. Sie resultiert vielmehr aus der darüber liegenden thermosphärischen Zirkulationszelle und dem mesosphärischen Zweig der BDZ. Wie in der Mesosphäre entsteht auch in der Thermosphäre auf Grund der unterschiedlichen solaren Einstrahlung eine meridionale Zirkulation vom Sommer- zum Winterpol. Aus Kontinuitätsgründen wird daher in der unteren Thermosphäre eine Luftbewegung vom Winter- zum Sommerpol induziert [Forbes, 2007]. In Kombination mit dem gegenläufigen Transportmuster der BDZ kommt es oberhalb der Mesopause über dem Winterpol zu einer

### 3. Ozon in der mittleren Atmosphäre

Aufwärtsbewegung, während über dem Sommerpol ein Absinken vorliegt. Anzumerken ist, dass sich ein Teil dieser Region bereits oberhalb der Homopause befindet. Hier geht der Transport der Spurengase aber im Wesentlichen auf die molekulare Diffusion zurück und wird weniger durch turbulente Prozesse bestimmt. Daher können sich die Spurengase hier auch gegen die vorherrschende Hintergrundzirkulation ausbreiten, wodurch im Winter ein Transport von Spurengaserhöhungen aus der unteren Thermosphäre in die Mesosphäre ebenfalls möglich ist.

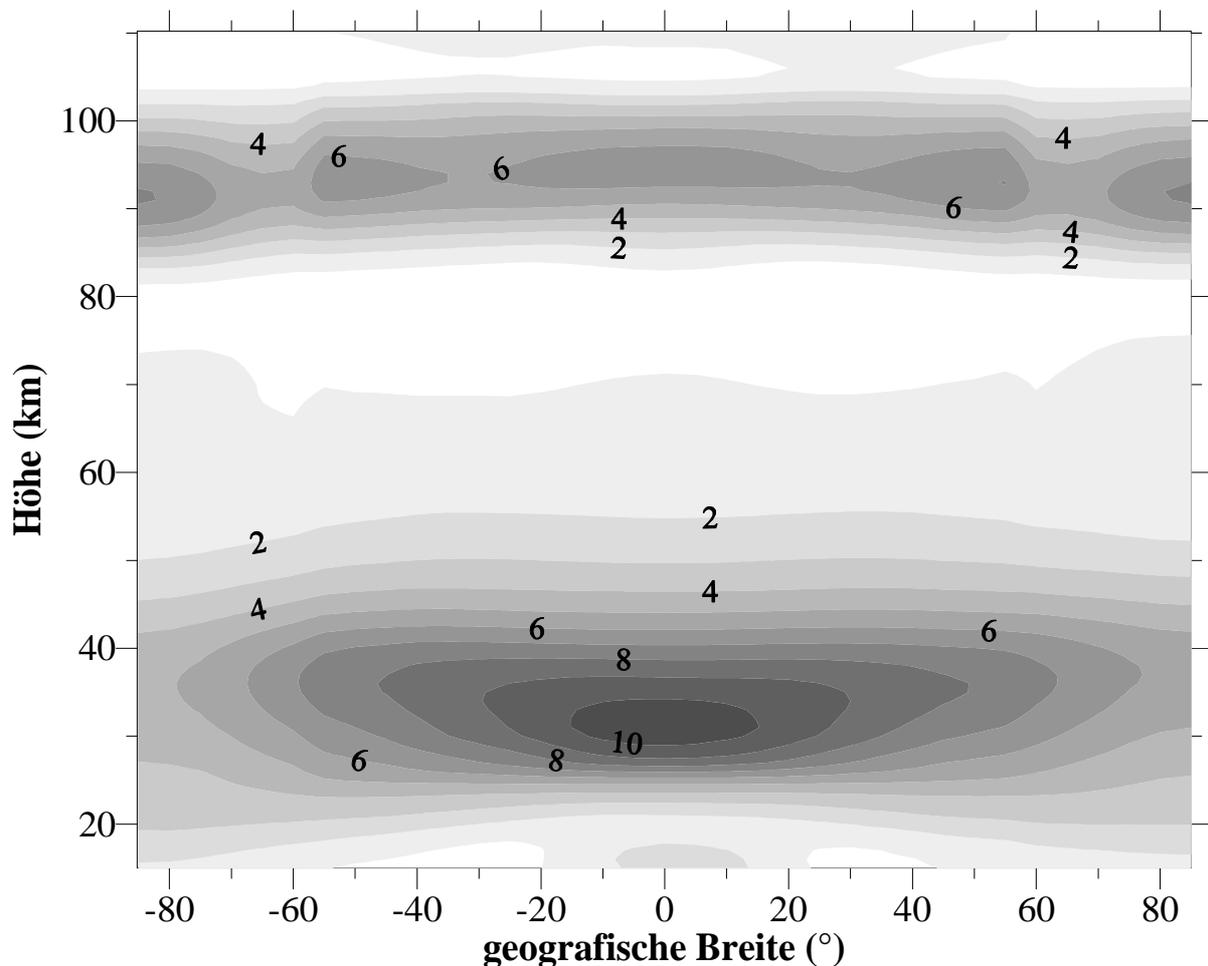
#### 3.3 Räumliche und zeitliche Ozonvariationen

Ozonwerte werden üblicherweise in Partialdruck, Volumenmischungsverhältnis (engl. volume mixing ratio, vmr) oder Dobsonenheiten (engl. Dobson units, DU) angegeben. Bei ersterem handelt es sich um den absoluten Gasdruck von  $O_3$  in der Atmosphäre. Dahingegen ist das vmr das Verhältnis aus Gasdruck zum Luftdruck und stellt damit ein relatives Maß dar. Dabei ergeben sich für  $O_3$  in der Atmosphäre Werte in der Größenordnung von  $10^{-6}$ , wobei diese zumeist in Anteilen pro Million (engl. parts per million, ppm) angegeben werden. Bei geringeren Konzentrationen ( $10^{-9}$ ) bzw. einem Anteil pro Milliarde ist auch die Einheit ppb (engl. parts per billion) üblich. Die DU gibt die Höhe der Gesamtozonmenge innerhalb einer vertikalen Luftsäule unter Normalbedingungen ( $T=273,15\text{ K}$ ,  $p=1013,25\text{ hPa}$ ) an. Die Angabe in DU entspricht daher einer äquivalenten Ozonschichtdicke oder absoluten Konzentration und schwankt im globalen Mittel etwa um den Wert von 300 DU bzw. 3 mm Ozonsäule unter Normalbedingungen.

Im Gegensatz zu den atmosphärischen Hauptbestandteilen  $N_2$  und  $O_2$  ist  $O_3$  in der MA nicht homogen verteilt. Die Variationen in  $O_3$  hängen in erster Linie von dessen Lebensdauer und dem damit einhergehenden Einfluss der chemischen und dynamischen Prozesse ab. Generell wird die Ozonkonzentration in großen Teilen der MA, vor allem aber im Höhenbereich zwischen 20 und 80 km, durch chemische Reaktionen gesteuert [Garcia und Solomon, 1985]. Auf Grund der fehlenden solaren Einstrahlung gilt dies aber nicht für die winterliche Polarregion ( $>60^\circ$ ), wo die Chapmanreaktionen (R. 14-17) zum Erliegen kommen. In diesem Gebiet, sowie in der unteren Stratosphäre ( $<20\text{ km}$ ) und unteren Thermosphäre ( $>90\text{ km}$ ), werden die Ozonvariationen hingegen im Wesentlichen durch dynamische Vorgänge kontrolliert.

### 3. Ozon in der mittleren Atmosphäre

Eine zonal und über 10 Jahre gemittelte Ozonklimatologie aus Satellitenmessungen [Smith et al., 2013] ist in Abb. 3.2 als Funktion von Breite und Höhe dargestellt. Ausgehend von den Chapmanreaktionen R. 14-17 (s. Kap. 3.1.1) wird die Ozonbildung durch die zur Verfügung stehende UV Strahlung und der vorhandenen Menge an  $O_2$  gesteuert. Die absolute Menge an  $O_2$  nimmt auf Grund der sinkenden Luftdicht mit der Höhe ab, während die zur Verfügung stehende UV Strahlung mit der Höhe zunimmt. Daher muss sich eine Schicht maximaler Ozonproduktion bilden [Chapman, 1930]. Dies ist hier in etwa 30-35 km der Fall, wobei über dem Äquator Werte von etwas mehr als 10 ppm erreicht werden. In Höhe der Mesopause ist ein zweites Maximum ( $\approx 6$  ppm) zu erkennen, was auf zusätzlich gebildeten atomaren Sauerstoff zurückgeht.



**Abbildung 3.2.** Höhen-Breiten-Schnitt von  $O_3$  (vmr) aus Satellitenmessungen für 2002-2012. Die zugrunde liegenden Daten sind freizugänglich und können von <http://saber.gats-inc.com/custom.php> herunter geladen werden. Die Ergebnisse wurden in geänderter Form bereits in Huan et al. [2008] und Smith et al. [2013] veröffentlicht.

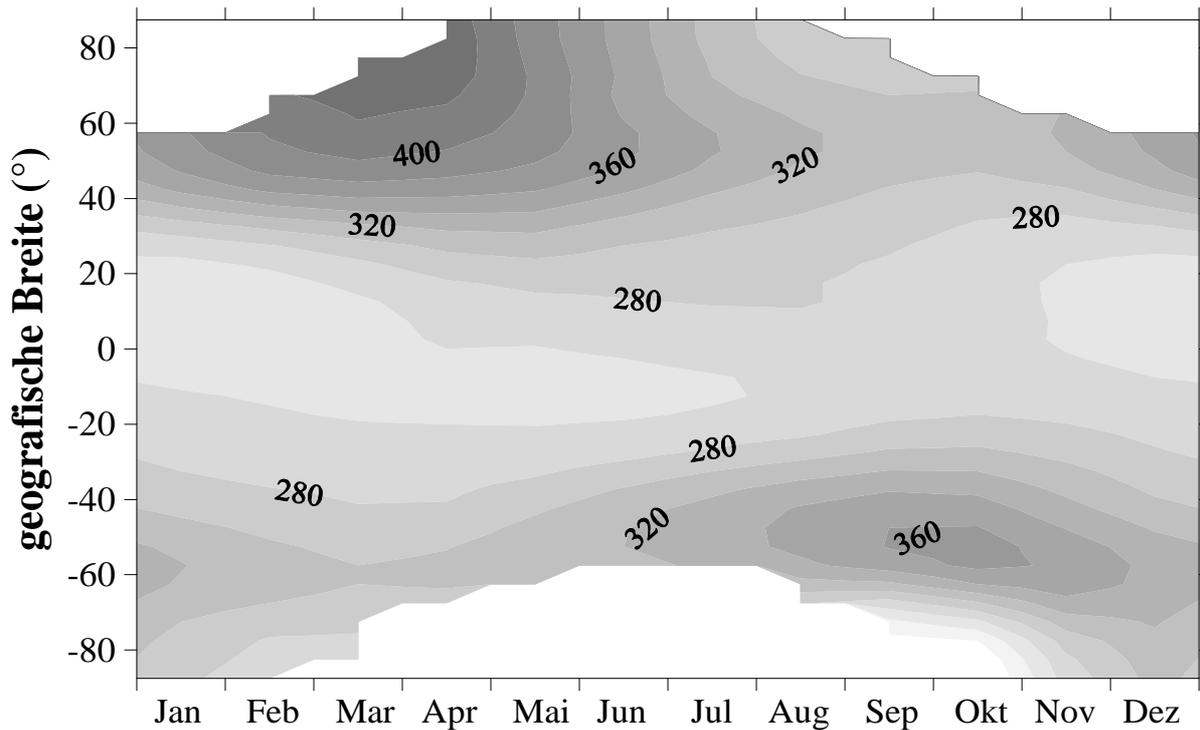
### 3. Ozon in der mittleren Atmosphäre

In 65-75 km wurde von Sofieva et al. [2009] ein tertiäres Maximum beobachtet, welches Werte von ca. 2-3 ppm erreicht. Dieses tritt aber nur in den Wintermonaten auf, weshalb es im hier gezeigten jährlichen Mittel nicht zu erkennen ist. Das tertiäre Maximum steht vermutlich im Zusammenhang mit dem abgeschwächten katalytischen Ozonabbau durch  $\text{HO}_x$ , da die  $\text{HO}_x$ -Produktion aus der Fotolyse von  $\text{H}_2\text{O}$  auf Grund der fehlenden solaren Einstrahlung ebenfalls vermindert ist. Weiterhin sind in hohen polaren Breiten in der unteren Stratosphäre erhebliche Mengen an  $\text{O}_3$  zu sehen, obwohl die maximale Ozonproduktion über den Tropen oberhalb von 30 km stattfindet. Diese Beobachtungen deuten stark auf einen weiteren Einfluss von dynamischen Prozessen hin, worauf im nächsten Abschnitt eingegangen wird. Bei der Betrachtung absoluter Werte (hier nicht gezeigt) fällt auf, dass die vertikale Ozonverteilung eine deutlich andere Form als in Abb. 3.2 aufweist. So treten auf Grund der nach oben hin exponentiell abnehmenden Luftdichte die höchsten Ozonmengen bereits in etwa 20 km auf, während das sekundäre Maximum nur sehr schwach zu erkennen ist. Außerdem wird ersichtlich, dass sich ca. 90% des Gesamt Ozons in der Stratosphäre befinden und nur etwa 10% in der Troposphäre.

In Abb. 3.3 ist der über 16 Jahre gemittelte Gesamt ozongehalt der Atmosphäre in DU dargestellt. Die gezeigten Ergebnisse basieren auf Spektrometermessungen des Nimbus 7 Satelliten und weisen in mittleren und hohen Breiten erheblich größere Werte auf als am Entstehungsort über den Tropen. Diese Diskrepanz lässt sich mit Hilfe der BDZ erklären (s. Kap. 3.2), wobei  $\text{O}_3$  mit der Hintergrundzirkulation in mittlere und hohe Breiten transportiert wird. Allerdings ist zu beachten, dass das  $\text{O}_3$  hierfür nicht direkt aus der tropischen Quellregion stammt. Dort befindet es sich im fotochemischen Gleichgewicht und weist daher sehr kurze Lebensdauern auf, um mit der vergleichsweise langsamen Hintergrundzirkulation effektiv in polare Breiten transportiert werden zu können. Daher wird vielmehr das  $\text{O}_3$  aus den Übergangsbereichen zwischen chemisch und dynamisch kontrollierten Regionen in hohe Breiten transportiert [Garcia und Solomon, 1985].

Die generell größeren Werte im Winter und in der NH sind auf die höhere Aktivität der PW und auf die damit einhergehende stärkere Meridionalzirkulation zurückzuführen. Longitudinale Variationen sind vergleichsweise gering und verschwinden in langjährigen Mitteln fast vollständig. Neben den räumlichen Unterschieden treten auch deutliche saisonale Schwankungen auf, welche durch ein Frühjahrsmaximum in  $>50^\circ\text{N}$  ( $>420$  DU) und in etwa  $60^\circ\text{S}$  (360 DU) zum Vorschein kommen. Die Ursache für die schwächere räumliche Ausprägung des Maximums in der SH lässt sich mit dem Auftreten eines ausgeprägten

### 3. Ozon in der mittleren Atmosphäre



**Abbildung 3.3.** Klimatologie der Gesamtozonsäule (DU) als Funktion von geografischer Breite und Zeit. Die Farbintervalle betragen 20 DU. Die Werte basieren auf Nimbus 7-Satellitenmessungen des total ozone mapping Spectrometers (TOMS) von 1978-1993 und wurden vom TOMS Science Team zur Verfügung gestellt: *TOMS/Nimbus-7 Total Column Ozone Daily and Monthly Zonal Means, version 008*, Greenbelt, MD:NASA Goddard Earth Science Data and Information Services Center, Zugriff am 26.10.15 über [http://disc.sci.gsfc.nasa.gov/datacollection/TOMSN7L3ztoz\\_V008.html](http://disc.sci.gsfc.nasa.gov/datacollection/TOMSN7L3ztoz_V008.html).

Minimums (antarktisches Ozonloch) in 60°S-90°S begründen. Außerdem wird ersichtlich, dass dieser markante Jahresgang auf mittlere und hohe Breiten beschränkt ist. Diese Schwankungen resultieren aber hauptsächlich aus Ozonvariationen in der unteren Stratosphäre (10-20 km) und legen wiederum einen Zusammenhang mit der BDZ bzw. der Aktivität von PW nahe.

Neben der Dynamik haben auch die Sonnenaktivität sowie der Sonnenzenitwinkel einen Einfluss auf die Ozonkonzentration. So wirkt sich letzterer stark auf den Tagesgang aus, der vorrangig aus dem Zusammenspiel zwischen Ozonfotolyse und Rekombination entsteht. Dabei stehen die Chapmanreaktionen (R. 14-17, s. Kap. 3.1.1) am Tage im Gleichgewicht miteinander. Nach Sonnenuntergang kommt die Ozonfotolyse (s. R. 16) und somit auch die Bildung von O (s. R. 14) zum Erliegen. Der noch vorhandene atomare Sauerstoff rekombiniert

### 3. Ozon in der mittleren Atmosphäre

zu  $O_3$  zurück, weshalb die Ozonkonzentrationen am Tage generell niedriger sind als in der Nacht. Diese chemisch bedingten Schwankungen betragen in der Stratosphäre nur einige Prozent. Dahingegen kann  $O_3$  in der Mesosphäre auf Grund der hohen Menge an solarer UV Strahlung am Tage fast vollständig abgebaut werden, wodurch der Tagesgang um mehrere Größenordnungen variiert [Huang et al., 1997; Abb. 6]. Unter der Einwirkung von katalytischen Reaktionen kann der reale Tagesgang aber substantiell von diesem ungestörten Beispiel abweichen. Außerdem weisen Beobachtungen auf ein weiteres Maximum nach Mitternacht hin. Diese ist nicht allein auf chemische Prozesse zurückzuführen und resultiert wahrscheinlich aus dynamischen Variationen [Zommerfelds et al., 1989].

## 4. Datensätze

### 4.1 Messungen

Grundsätzlich können Ozonmessungen sowohl in situ als auch mit Hilfe von Fernerkundungsverfahren durchgeführt werden. Erstere weisen zeitlich und räumlich hochauflösende Beobachtungen auf und erfolgen in der Regel durch die Verwendung von Ozonsonden. Diese messen den entstehenden elektrischen Strom bei der chemischen Reaktion zwischen  $O_3$  und einer verdünnten Kaliumiodidlösung. In Analogie zu meteorologischen Radiosonden werden auch die Ozonsonden an Ballonen befestigt und gewährleisten somit Ozonmessungen bis in die mittlere Stratosphäre ( $\approx 35$  km). Allerdings sind die Beobachtungen auf die wenigen Radiosondenstationen in zumindest vorübergehend bewohnten Gebieten beschränkt. Größere Höhen können mit Ozonsonden nicht erreicht werden, da die Ballone auf Grund des geringen Luftdrucks vorher platzen. Vereinzelt Messkampagnen mit Hilfe von Forschungsflugzeugen kommen ebenfalls nicht über Höhen von 25 km hinaus und sind außerdem sehr kostenintensiv. Höhere atmosphärische Schichten bis in die untere Thermosphäre können mit Hilfe von Raketen sondiert werden, wobei derartige Kampagnen auf Grund der hohen Kosten ebenfalls sehr selten und räumlich stark begrenzt sind.

Bodengebundene Fernerkundungsmethoden haben wie die in situ Messungen den Nachteil, dass sie nur lokale Datensätze liefern. Diese weisen aber ebenfalls eine hohe zeitliche und vertikale Auflösung auf. Zumeist werden hierbei Spektrometer (z. B. nach Dobson oder Brewer) verwendet, welche das direkte und zurück gestreute solare UV Licht messen. Dadurch sind Rückschlüsse auf die komplette Ozonsäule und vertikale Profile bis in etwa 50 km möglich. Die Beobachtungen werden aber hinsichtlich ihrer Qualität erheblich von stark streuenden und absorbierenden Luftbestandteilen (z. B. Aerosolen) beeinträchtigt. Außerdem sind sie auf die Richtung der Sonne beschränkt. Eine weitere Möglichkeit der bodengebundenen Fernerkundung sind sogenannte light detection and ranging (LIDAR) Instrumente. Deren Messprinzip basiert auf dem Vergleich der Absorptions- und Streukoeffizienten von  $O_3$  bei verschiedenen ausgesandten Wellenlängen. Hierfür müssen allerdings Luftdruck und -temperatur sowie die zugehörigen Absorptions- und Streukoeffizienten bei den jeweiligen Wellenlängen sehr genau bekannt sein. Ein weiterer großer Vorteil dieser Methode ist die hohe vertikale Auflösung ( $\ll 1$  km). Im Gegenzug liegen allerdings nur quasi-durchgehende Beobachtungen vor, da Wolken vom ausgesendeten Laser

## 4. Datensätze

nicht durchdrungen werden können und für die meisten LIDAR-Instrumente das Signal-zu-Rausch-Verhältnis am Tage zu klein ist. Während das LIDAR mit Wellenlängen zwischen dem UV und dem Infrarotbereich arbeitet, können Messungen der Ozonkonzentration auch im Mikrowellenbereich ( $\approx$ mm) erfolgen. Die entsprechenden Beobachtungen sind unabhängig von Wetter und Tageszeit, wobei die vertikale Auflösung vergleichsweise gering ist.

Da der Schwerpunkt dieser Arbeit auf saisonalen und jährlichen Ozonschwankungen auf großen horizontalen Skalen ( $\approx$ 10.000 km) liegt, sind hierfür weder bodengebundene Fernerkundungsmethoden noch in situ Messungen geeignet. Um eine globale Abdeckung zu gewährleisten wurde daher auf Satellitendaten zurückgegriffen. Bei den hier verwendeten Satellit/Instrument Systemen handelt es sich um „environmental satellite/Michelson Interferometer for passive atmospheric sounding“ (ENVISAT/MIPAS), „thermosphere ionosphere mesosphere energetics and dynamics/sounding of the atmosphere using broadband emission radiometry“ (TIMED/SABER), „Odin/sub-millimetre radiometer“ (SMR) und „Aura/earth observing system microwave limb sounder“ (EOS MLS; im weitem nur mit MLS bezeichnet). Die MIPAS-, SABER- und SMR-Beobachtungen wurden zur Analyse des indirekten Teilcheneffektes verwendet (s. Kap. 6), während die Untersuchungen des teilcheninduzierten 27-Tage-Signales auf MLS-Messungen basieren (s. Kap. 7). Darüber hinaus erfolgte ein Vergleich der Beobachtungen mit verschiedenen Simulationen des globalen 3-dimensionalen Chemie-Transport-Modells. Die individuellen Charakteristika der Satellitendaten und des Modells werden in den Unterkapiteln 4.1.2, 4.1.3 und 4.2 genauer beschrieben.

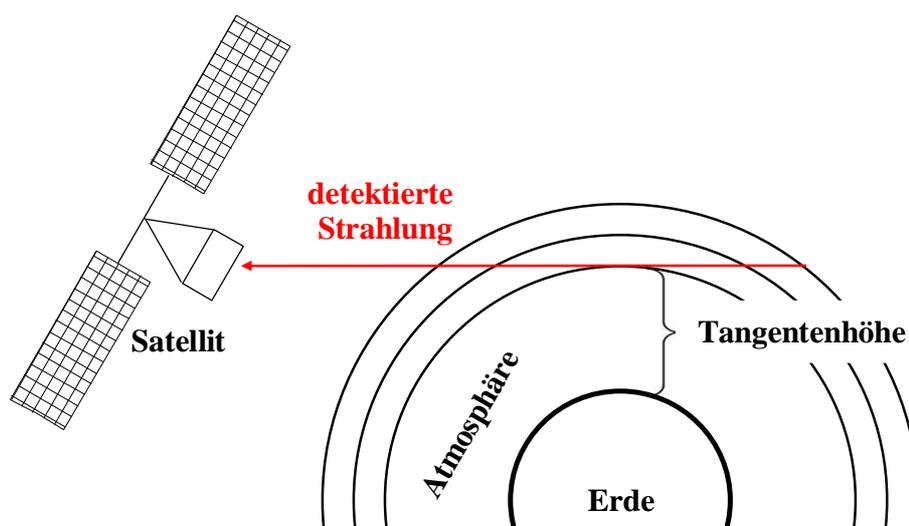
### 4.1.1 Satellitenmessprinzip

Alle hier berücksichtigten Satelliten bewegen sich in 600-800 km Höhe auf sonnensynchronen Orbits, was durch eine Inklination der Satellitenflugbahn bzgl. der Rotationsachse der Erde erreicht wird. Dadurch bleibt die Satellitenposition zur Sonne konstant, wodurch die Messungen an einem geografischen Ort immer zur selben Lokalzeit stattfinden. Die Ausnahme bildet der TIMED-Satellit, welcher sich nur auf einer quasi-sonnensynchronen Umlaufbahn um die Erde befindet. Dadurch verschiebt sich der Messzeitraum pro Tag um etwa 20-30 min, sodass nach ca. 60 Tagen alle Lokalzeiten abgedeckt sind. Auf die damit verbundenen Probleme wird in Kap. 4.1.2 und 5.1.2 genauer eingegangen. Die verwendeten Instrumente gehören zur Gruppe der Horizontalsondierer

#### 4. Datensätze

(engl. limb sounder), wobei die Beobachtung der Atmosphäre waagrecht zum Horizont erfolgt (Abb. 4.1). Folglich ist der optische Pfad der detektierten Strahlung (roter Pfeil) erheblich länger als bei Nadirmessungen, welche die Atmosphäre senkrecht zur Erdoberfläche sondieren. Die damit einhergehende hohe Sensitivität der Messungen ermöglicht Spurengasbeobachtungen bis in die Mesosphäre und die untere Thermosphäre. Da das detektierte Signal eine Akkumulation des gesamten optischen Pfades ist, kann aus der Satellitengeometrie zunächst nur die Tangentenhöhe ermittelt werden. Ausgehend von sphärischer Symmetrie stimmt die geometrische Höhe des Signals mit der Tangentenhöhe überein. Ein weiterer Vorteil der Geometrie der Horizontalsondierung ist die feine Höhenauflösung (hier  $\approx 2\text{-}10\text{ km}$ ) im Vergleich zu Nadirmessungen. Letztere weisen in Abhängigkeit der getroffenen Annahmen nur eine vertikale Auflösung von etwa  $10\text{-}15\text{ km}$  auf. Im Gegenzug ist horizontale Auflösung der Horizontalsondierung erheblich gröber. Außerdem erweist sich die Sondierung der Troposphäre auf Grund des Auftretens von Wolken ebenfalls als schwierig. Diese beiden Effekte spielen aber für diese Arbeit keine oder nur eine untergeordnete Rolle.

Das Satellitenmessprinzip beruht im Grunde darauf, dass Moleküle zunächst durch die Absorption von Strahlung zur Ausführung von Rotations- oder Vibrationsbewegungen angeregt werden. Außerdem kann es im Molekül in Folge der Strahlungsabsorption auch zu einer unregelmäßigen Verteilung der Elektronen kommen, was die Ausbildung eines elektrischen Dipolmomentes nach sich zieht. Allerdings ist hierfür sehr viel Energie



**Abbildung 4.1.** Prinzipielle Geometrie einer Horizontalsondierung. Abbildung ist nicht maßstabsgetreu.

#### 4. Datensätze

notwendig, sodass der Vorgang nur bei Licht mit Wellenlängen unterhalb des sichtbaren Spektrums ( $<380$  nm) stattfindet. Dahingegen ist für den Übergang des Moleküls in einen Vibrations- oder Rotationszustand erheblich weniger Energie erforderlich. So treten Vibrationszustände vorrangig bei Wellenlängen im nahen-mittleren Infrarot bei etwa  $\approx 10$   $\mu\text{m}$  auf, während für die Rotationsanregung Strahlung im thermischen Infrarot bzw. Mikrowellenbereich ( $\approx \text{mm}$ ) ausreicht. Bei einer Wellenlänge zwischen 4 und 17  $\mu\text{m}$  treten beide Zustände parallel auf und es entstehen sogenannte gemischte Vibrations-Rotationsübergänge. Wenn die angeregten Moleküle wieder in einen energetisch niedrigeren Zustand übergehen kommt es zur Emission von Strahlung im entsprechenden Wellenlängenbereich, welche von den Satelliteninstrumenten detektiert wird.

Im Prinzip detektieren die Instrumente an Bord der Satelliten die gesamte von der Atmosphäre nach oben ausgesandte Strahlung. Diese umfasst aber nicht nur die Emissionen der Spurengase, sondern beinhaltet auch reflektierte Strahlung und Beiträge von der Erdoberfläche. Zur Bestimmung des Emissionsanteils der Spurengase wird die Gesamtintensität des empfangenen Signals spektral mit der Strahlung eines Modellspektrums ohne die Emission des betreffenden Spurengases verglichen. Da die hier verwendeten Datensätze auf Emissionsmessungen im thermischen Infrarot- oder Mikrowellenbereich basieren, stehen kontinuierliche Zeitreihen sowohl am Tage als auch in der Nacht zur Verfügung. Letzteres ist vor allem für Untersuchungen im polaren Winter von großer Bedeutung.

##### 4.1.2 Satellitenmessungen in der Stratosphäre und unteren Mesosphäre

Das MIPAS-Instrument [Fischer et al., 2008] war ein Emissionsspektrometer an Bord des polumlaufenden ENVISAT-Satelliten. Die Messungen von MIPAS fanden im Infrarotbereich bei etwa 4,2-14,6  $\mu\text{m}$  statt und das detektierte Signal wurde mit Hilfe einer Fourier-Transformation spektral analysiert. Somit konnten die Spurengaskonzentrationen von z. B.  $\text{O}_3$ ,  $\text{NO}_2$ ,  $\text{HNO}_3$  und  $\text{ClONO}_2$  ermittelt werden, wobei eine globale Abdeckung von  $87^\circ\text{S}$ – $89^\circ\text{N}$  gewährleistet war. Für Juli 2002–April 2012 befand sich MIPAS im operationellen Zustand, wobei dieser Zeitraum eine größere Datenlücke auf Grund einer Fehlfunktion des Instruments beinhaltet. Daher wird die gesamte Beobachtungsperiode in zwei Abschnitte P1 (Juli 2002-März 2004) und P2 (Januar 2005-April 2012) unterteilt. Während für P1 nahezu kontinuierliche Messungen vorliegen, weist P2 vor allem vor dem Oktober 2006 einige größere Datenlücken von mehreren Tagen auf. Der systematische Fehler

#### 4. Datensätze

zwischen beiden Perioden wurde mit Hilfe eines multilinearen Trendmodells abgeschätzt [Eckert et al., 2014]. Die Durchführung der Messungen erfolgte unabhängig von der geografischen Position in 17 (P1) bzw. 23 (P2) festen Tangentenhöhen. Demzufolge verbesserte sich die vertikale Auflösung von 3,5–8 km in P1 [Steck et al., 2007] auf 2,5–5 km in P2 [Eckert et al., 2014], wobei größere Höhen mit einer gröberen Auflösung zusammenfallen. Während P1 (P2) wurde O<sub>3</sub> bei 9,0–9,4 μm (9,6–9,7 μm) und bei 12,5–13,5 μm (12,7–13,2 μm) gemessen. Für die weiteren Spurengase lagen die Wellenlängenbereich bei 6,1–6,3 μm (NO<sub>2</sub>), 11,2–11,6 μm (HNO<sub>3</sub>) und 12,8 μm (ClONO<sub>2</sub>). Um den Rechenaufwand zu minimieren wurde allerdings nicht der gesamte Spektralbereich berücksichtigt, sondern nur kleine Teilbereiche (microwindows). Die Bestimmung von Position und Breite der microwindows erfolgte über das optimale Verhältnis zwischen der Signalstärke der Emissionsstrahlung des gesuchten Spurengases und dem Gesamtfehler. Letzterer setzt sich im Wesentlichen aus dem systematischen Fehler der Messung und spektralen Beiträgen von anderen atmosphärischen Bestandteilen unbekannter Konzentration zusammen.

Für diese Arbeit wurde der komplette Datensatz (P1+P2) des Nominalmodus für O<sub>3</sub> in 20–70 km Höhe verwendet, während sich die Analyse für NO<sub>2</sub>, HNO<sub>3</sub> und ClONO<sub>2</sub> auf P2 beschränkte. Der Nominalmodus deckt ca. 80% des Messzeitraumes ab und ist daher besonders für die Untersuchung der Stratosphäre und unteren Mesosphäre geeignet. Die Erstellung des zugehörigen MIPAS-level-2 Datensatzes erfolgte durch den MIPAS-level-2 Forschungsprozessor, welcher in Kooperation zwischen dem Institut für Meteorologie und Klimaforschung mit dem Instituto de Astrofísica de Andalucía (dt. Institut für Astrophysik Andalusien) entstand. Eine genaue Beschreibung der Retrievals für O<sub>3</sub>, HNO<sub>3</sub> und ClONO<sub>2</sub> ist in Clarmann et al. [2003 und 2009] und Glatthor et al. [2006] zu finden, während die Details für NO<sub>2</sub> in Funke et al. [2005 und 2011] erläutert werden. Allen hier verwendeten MIPAS-Versionen (V3O\_O3\_9, V5R\_O3\_220, V5R\_O3\_221, V5R\_HNO3\_220, V5R\_HNO3\_221, V5R\_CLONO2\_220, V5R\_CLONO2\_221, V5R\_NO2\_220, V5R\_NO2\_221) liegt ein ähnliches Retrievalgitter zu Grunde, welches für O<sub>3</sub>, HNO<sub>3</sub> und ClONO<sub>2</sub> (NO<sub>2</sub>) eine Gitterbreite von 1 km unterhalb 44 km (50 km) und von 2 km in den darüber liegenden Höhen aufweist.

Ein Spurengasdatenpunkt wurde im weiteren Verlauf verwendet, wenn die Spektraldaten an diesem Punkt auch tatsächlich vorhanden waren (visibly flag = 1) und die zugehörige Averaging Kernel Diagonalmatrix den empirisch bestimmten Wert von 0,03 überschreitet. Der

#### 4. Datensätze

Averaging Kernel gibt den Anteil der tatsächlichen MIPAS-Messung am Retrievalprofil wieder. Unterhalb des Grenzwertes ist das Retrievalsignal allerdings zu stark verrauscht und resultiert zu einem wesentlichen Teil aus zuvor getroffenen Annahmen über die Charakteristika des untersuchten Spurengases (a priori Wert). Beim a priori Wert kann es sich z. B. um eine bereits bekannte Spurengasklimatologie handeln. Der hier verwendete Wert des Averaging Kernels ist daher immer ein Kompromiss zwischen einem möglichst niedrigen a priori Einfluss und realistischen Retrievalprofilen mit geringen Fehlern.

Das SABER-Instrument an Bord des TIMED-Satelliten [Russel et al., 1999] liefert seit Januar 2002 nahezu kontinuierliche Messungen von mehreren atmosphärischen Zustandsgrößen und Spurengasen. Darunter befindet sich auch O<sub>3</sub>, dessen Vertikalprofil von der Erdoberfläche bis in ca. 110 km bestimmt wird. Die zugehörige vertikale Auflösung liegt höhenunabhängig bei ca. 2 km. Auf Grund des Satellitenorbits wechselt das Beobachtungsfenster im Rhythmus von etwa 60 Tagen zwischen dem südhemisphärischen (83°S–52°N) und dem nordhemisphärischen Modus (52°S–83°N), sodass lückenlose Messreihen nur vom Äquator bis in mittlere Breiten vorliegen. Allerdings variiert der Tag, an dem der Satellit in den anderen Modus wechselt, nur um wenige Tage von Jahr zu Jahr. Die Messungen von O<sub>3</sub> erfolgten bei  $\approx 9,6 \mu\text{m}$  und der verwendete Datensatz (SABER Level 2A Ozone96, Version 2.0 und 1.07) [Rong et al., 2009] wurde vom entsprechenden Datenserver (<http://saber.gats-inc.com/custom.php>) heruntergeladen. Version 1.07 diente dabei lediglich zum Füllen der Lücken von Version 2.0, wobei keine gravierenden Unstimmigkeiten zwischen den verschiedenen Versionen in den entsprechenden Zeiträumen (15.-31. Mai 2005 und 7.-31. August 2008) ersichtlich sind. Alle Ozonbeobachtungen wurden auf den empirisch bestimmten Grenzwert  $<20 \text{ ppm}$  beschränkt, um mögliche Ausreißer herauszufiltern. Die Untersuchungen wurden für alle Höhenlevel von 20-70 km durchgeführt und die erhaltenen Werte dem jeweils nächstliegenden Höhenintervall des MIPAS-Retrievalgitters zugeordnet. Bei mehr als einen SABER-Wert pro MIPAS-Höhenintervall erfolgte eine arithmetische Mittelung.

Die Mission des Odin-Satelliten begann im Februar 2001 und ist ein gemeinsames Projekt der Länder Schweden, Kanada, Frankreich und Finnland [Murtagh et al., 2002]. Bei Odin handelt es sich um einen polumlaufernden Satelliten, der unter anderem das SMR-Instrument trägt. Die hier verwendeten Odin/SMR Level 2 Ozondaten der Version 2.0 (<http://odin.rss.chalmers.se/>) basieren auf Messungen im fernen Infrarotbereich ( $\approx 544,6 \text{ GHz}$  bzw.  $\approx 0,55 \text{ mm}$ ) und gewährleisten eine globale Abdeckung von 83°S–83°N [Urban et al.,

#### 4. Datensätze

2005]. Vertikale Ozonprofile zwischen 20 und 70 km Höhe mussten das Filterkriterium einer measurement response  $>0,9$  erfüllen, wobei diese äquivalent zum Averaging Kernel des MIPAS-Retrievals ist. Die vertikale Höhenauflösung der hier verwendeten Datenversion beträgt unterhalb von 45 km weniger als 3 km, welche aber in 50-60 km (5-6 km) und in 60-70 km (7-10 km) deutlich gröber ist. Somit sind die Ergebnisse von SMR im Vergleich zu MIPAS und SABER oberhalb von ca. 50 km erheblich verrauschter. Außerdem war Odin bis April 2007 ein zwei-disziplinärer Satellit, der regelmäßig zwischen dem atmosphärischen Aeronomiemodus und dem Astronomiemodus wechselte. Daher stehen Beobachtungen im relevanten Aeronomiemodus nur an einem von drei Tagen vor April 2007 zur Verfügung, während danach eine kontinuierliche Zeitreihe vorliegt. Um einen direkten Vergleich mit Messungen von MIPAS und SABER zu ermöglichen wurden auch die SMR-Beobachtungen individuell dem dichtesten MIPAS-Retrievalgitterpunkt zugewiesen und gegebenenfalls arithmetisch gemittelt.

##### 4.1.3 Satellitenbeobachtungen in der Mesosphäre und unteren Thermosphäre

Das MLS-Instrument an Bord des polumlaufenden Aura-Satelliten [Waters et al., 2006] befindet sich seit August 2004 im operationellen Betrieb und sondiert die Atmosphäre u. a. hinsichtlich der Spurengase  $O_3$  und OH. Die Messungen erfolgen über die thermische Emission der Rotationslinien (s. Kap. 4.1.1) bei  $\approx 1,25$  mm für  $O_3$  und bei  $\approx 0,12$  mm für OH und gewährleisten eine globale Abdeckung ( $82^\circ N$ - $82^\circ S$ ). Der hier verwendete Level 2 Datensatz von  $O_3$  und OH (Version 3.3/3.4) [Livesey et al., 2013] wurde von der Webseite <http://mls.jpl.nasa.gov/> heruntergeladen. Dabei konnte für  $O_3$  der komplette Zeitraum zwischen August 2004 und August 2014 analysiert werden. Dahingegen standen für OH nur Messungen bis Dezember 2009 zur Verfügung, um Batterieenergie des entsprechenden Radiometers zu sparen [Pickett et al., 2008]. Für diese Arbeit wurden nur Schwankungen in OH ( $O_3$ ) im Höhenbereich von 60-81 km (60-75 km) betrachtet, wobei eine vertikale Auflösung von etwa 2,5 km (5 km) vorliegt. Die Berechnung der einzelnen Höhen des MLS-Retrievalgitters basiert auf den zugehörigen MLS-Druckleveln, welche in Tab. 4.1 zu sehen sind. Das Fehlen von Ozonwerten in 68 und 73 km resultiert aus dem gröberen MLS-Retrievalgitter in atmosphärischen Regionen oberhalb von 0,1 hPa. Jeder Datenpunkt des Retrievalgitters weist außerdem einen Präzisionsfehler auf, welcher die Messungengenauigkeit der einzelnen Spurengasprofile repräsentiert. Um ein genügend hohes Signal-zu-Rausch-Verhältnis und einen konvergierenden Retrievalalgorithmus zu

#### 4. Datensätze

**Tabelle 4.1.** Zusammenfassung der zur Verfügung stehenden MLS-OH- und MLS-O<sub>3</sub>-Messungen zwischen 60 und 81 km [adaptiert von Fytterer et al., 2015b].

Drucklevel (Pa)	Nominelle Höhe (km)	OH Verfügbarkeit	O <sub>3</sub> Verfügbarkeit
21,44	60	ja	ja
14,68	63	ja	ja
10,00	65	ja	ja
6,81	68	ja	---
4,64	70	ja	ja
3,16	73	ja	---
2,15	75	ja	ja
1,47	78	ja	---
1,00	81	ja	---

gewährleisten, muss der Datenpunkt einen positiven Präzisionswert und ein Statusfeld = 0 aufweisen. Der Konvergenzwert musste unterhalb von 1,1 (1,18) für OH (O<sub>3</sub>) liegen, wobei für O<sub>3</sub> ein zusätzlicher Qualitätswert >0,6 galt.

#### 4.2 Numerische Modellierung

Das globale 3-dimensionale Chemie-Transport-Modell (3dCTM) [Nieder, 2015] basiert auf dem Bremen 3dCTM [z. B. Wissing et al., 2010] und erstreckt sich auf 47 Druckhöhen von der Tropopause bis in die untere Thermosphäre (≈10–133 km). Die vertikale Distanz der einzelnen Modellschichten beträgt ca. 3 km in der Stratosphäre und Mesosphäre, 2 km im Bereich der Mesopause und bis zu 7 km in der unteren Thermosphäre. Der horizontale Abstand des Breiten- × Längengitters ist 2,5°×3,75°. Das Modell wurde vor kurzem um eine variable H<sub>2</sub>- und O<sub>2</sub>-Verteilung erweitert, was zu verbesserten HO<sub>x</sub>-Werten und letztlich zu genaueren nächtlichen Ozonkonzentrationen oberhalb von 60 km führt. Die Advektion im 3dCTM wurde nach dem Schema von Prather [1986] eingebaut. Um Rechenzeit zu sparen, wird in der Stratosphäre die Zu- und Abnahme der Spurengasfamilien CHO<sub>x</sub> (=CH<sub>3</sub>+CH<sub>3</sub>O<sub>2</sub>+CH<sub>3</sub>OOH+CH<sub>3</sub>O+HCO), ClO<sub>x</sub>, BrO<sub>x</sub>, NO<sub>x</sub>, HO<sub>x</sub> und O<sub>x</sub> (=O(<sup>3</sup>P)+O(<sup>1</sup>D)+O<sub>3</sub>) nur für die Familien selbst berechnet. Dies ist möglich, da sich die einzelnen Komponenten der Spurengasfamilien im fotochemischen Gleichgewicht befinden. Letzteres gilt allerdings

#### 4. Datensätze

nicht mehr in der MLT für  $O_x$ ,  $NO_x$  und  $HO_x$ . Dieser Ansatz wurde dort folglich nicht mehr angewendet.

Das 3dCTM wird von meteorologischen Daten des 3-dimensionalen Leibniz-Institute middle atmosphere (LIMA) Dynamikmodells [Berger, 2008 und Lübken et al., 2013] angetrieben. Bis in eine Höhe von  $\approx 40$  km ist LIMA vollständig an die ERA-40 Reanalysedaten des Europäischen Zentrums für mittelfristige Wettervorhersage (engl. European centre for medium-range weather forecast, ECMWF) gekoppelt und oberhalb von 50 km komplett freilaufend. Somit sind bis etwa zur Stratopause realistische Temperatur- und Windfelder gewährleistet. Die hohe horizontale  $\times$  vertikale Auflösung von  $110 \text{ km} \times 1,1 \text{ km}$  ist besonders gut für Simulationen der MLT geeignet.

Die im 3dCTM verwendeten globalen Ionisationsraten auf Grund präzipitierender Teilchen (Elektronen, Protonen, Alpha-Teilchen) stammen vom 3-dimensionalen atmospheric ionization module Osnabrück (AIMOS) Version 1.6 [Wissing und Kallenrode, 2009]. Das AIMOS-Modell basiert auf Messungen der polar-orbiting operational environmental satellites (POES) sowie eines geostationären Satelliten (geostationary operational environmental satellites, GOES). Es ist daher auf die Energiebereiche der jeweiligen Instrumente beschränkt und berücksichtigt Elektronen mit 154 eV bis 300 keV, Protonen mit 154 eV bis 500 MeV und Alpha-Teilchen mit 4-500 MeV. Da sich die untersuchten Energiebereiche von Elektronen und Protonen zum Teil überlagern, können die Elektronenmessungen durch Protonen kontaminiert sein. Daher wurden die Elektronenmessungen für 30-300 keV nicht berücksichtigt, wenn der entsprechende 165-500 MeV Protonenfluss den empirischen Grenzwert 2 überschreitet. Dadurch gehen die Hauptphasen der SPEs und der Bereich der südatlantischen Anomalie (Region schwacher Erdmagnetfeldstärke über dem Südatlantik) nicht in das Modell mit ein. Die beobachteten Teilchenflüsse werden anschließend über 2 Stunden gemittelt (=zeitliche Auflösung) und in 3-dimensionale Produktionsraten der Ionenpaare umgewandelt. Die theoretische horizontale Auflösung von AIMOS entspricht der einer Modellgitterzelle von  $3,6^\circ \times 3,6^\circ$ . Regionen entlang geomagnetischer Breiten weisen allerdings sehr homogene Teilchenflüsse auf, weshalb dort zur Reduzierung der Rechenzeit die horizontale Auflösung auf bis zu  $28,8^\circ \times 90^\circ$  gesenkt wird.

Die durch präzipitierende Teilchen hervorgerufene Produktion von  $NO_x$  pro Ionenpaar beruht auf der Parametrisierung von Nieder et al. [2014]. Diese hängt vom Zustand der Atmosphäre ab und basiert auf verschiedenen Ionen- und Neutralgasreaktionen. Der Einfluss der Fotoionisation wurde mit Hilfe des Lambert-Beer Absorptionsgesetzes im 3dCTM

#### 4. Datensätze

implementiert [Nieder, 2015], welches den Sonnenzenitwinkel und eine Wellenlängenabhängigkeit [Solomon und Qian, 2005] berücksichtigt. Die Parametrisierungen von HO<sub>x</sub> und O basieren auf Ergebnissen von Solomon et al. [1981] bzw. Porter et al. [1976]. Der Einfluss des 11-jährigen solaren Zyklus' wird im 3dCTM durch das solare Spektralmodell von Lean et al. [2005] berücksichtigt, welches auf Beobachtungen der Sonnenfleckenanzahl, dem Mg-Index (=Proxy für solare UV Strahlung) und dem Index für den solaren Fluss im Radiowellenlängenbereich (F10.7, s. Kap. 4.3) beruht.

Für die Initialisierung der hier verwendeten 3dCTM-Läufe erfolgte zunächst eine mehrjährige Einschwingphase der 2-dimensionalen Version des 3dCTMs [Sinnhuber et al., 2003], um eine annähernd realistische Modellatmosphäre auf einem Länge-Höhen-Modellgitter zu erhalten. Die Ergebnisse dieses Modelllaufs wurden als Ausgangszustand für eine weitere Einschwingphase des 3dCTMs verwendet. Nach etwa 5 Modelljahren ergibt sich dann eine gut durchmischte globale Verteilung der Spurengase. Deren Gesamtkonzentration stimmt aber zum Teil nicht mit bekannten Beobachtungen überein. In diesen Fällen erfolgte unter Beibehaltung der simulierten räumlichen Spurengasverteilung eine lineare Anpassung der modellierten Spurengasmenge an die gemessene atmosphärische Gesamtkonzentration. Die sich daraus ergebene skalierte Spurengasverteilung wurde letztlich als Anfangsbedingung für die 3dCTM-Läufe verwendet.

Für die vorliegende Arbeit wurden die 3dCTM-Daten von verschiedenen Simulationen zwischen 20 und 133 km untersucht und bzgl. des Einflusses präzipitierender Teilchen auf Spurengase in polaren Breiten analysiert. Der Modellzeitraum war generell auf Januar 2002-Mai 2010 beschränkt, da vorher keine verlässlichen AIMOS-Ionisationsraten vorlagen und für einen späteren Zeitpunkt keine LIMA-Daten zur Verfügung standen. Alle Modellläufe lieferten einmal täglich einen globalen Schnappschuss der Erdatmosphäre um 0 UTC. Außerdem berücksichtigten sie keine heterogene Chemie, obwohl diese im Modell implementiert war. Allerdings spielen derartige Reaktionen auch nur im polaren Frühjahr unterhalb von 25 km eine Rolle und sind für die hier durchgeführten Untersuchungen von geringerer Bedeutung. Eine Zusammenfassung aller analysierten Simulationen ist in Tab. 4.2 zu finden.

Die erste Modellstudie diente zur Untersuchung des indirekten Teilcheneffektes auf O<sub>3</sub> und beschränkte sich auf die Region innerhalb des antarktischen Polarwirbels zwischen 20 und 70 km von 2003 bis 2009. Für das Modelljahr 2002 standen zum Zeitpunkt der Analysen noch keine Läufe zur Verfügung, während auf 2010 auf Grund des nicht vollständig vorhandenen

#### 4. Datensätze

antarktischen Winters (April-Oktober) ebenfalls verzichtet wurde. Um im Folgenden Verwechslungen mit den Analysen in der MLT zu vermeiden, wurde das Präfix „SLM“ für „stratosphere and lower mesosphere“ (dt. Stratosphäre und untere Mesosphäre) hinzugefügt. Der erste Modelllauf (SLM\_Base) dient hierbei als Referenzlauf und enthält noch keine präzipitierenden Teilchen, welche aber in einer zweiten Simulation (SLM\_PT) berücksichtigt werden. Dies ist durch die Bezeichnung „PT“ für „präzipitierende Teilchen“ verdeutlicht. Beiden Modellläufen lag ein konstantes solares Spektrum zu Grunde, was einem  $F_{10.7}=70 \times 10^{-22} \text{ W m}^{-2} \text{ Hz}^{-1}$  bzw. schwacher solarer Aktivität entspricht. Somit konnten Ozonschwankungen durch variierende solare Aktivität ausgeschlossen werden.

Die 2. Gruppe der Modellsimulationen befasste sich mit der Untersuchung des teilcheninduzierten 27-Tage-Signals und umfasste den Höhenbereich von 60 bis 133 km. Dieser stimmt zum größten Teil mit der Höhe der MLT überein, weshalb die Simulationen das Präfix „MLT“ erhielten. Die Analyse bezog sich auf  $55^\circ$ - $75^\circ$  geomagnetischer Breite und den Zeitraum von Januar 2002 bis August 2008, da nur für diese Periode verlässliche AIMOS-Ionisationsraten und solaren Spektraldaten zur Verfügung standen. Die Modellläufe ohne (MLT\_Base) und mit präzipitierenden Teilchen (MLT\_PT) wurden noch um eine Simulation mit Fotoionisation (MLT\_PT+PI) ergänzt. Hierbei wurde zunächst erneut dasselbe konstante Sonnenspektrum von etwa  $F_{10.7}=70 \times 10^{-22} \text{ W m}^{-2} \text{ Hz}^{-1}$  verwendet. Allerdings erfolgte auch eine Analyse der zugehörigen Simulationen mit variabler Sonnenaktivität. Die entsprechenden Modellläufe erhalten den Zusatz „F“ (von  $F_{10.7}$ , s. Kap. 4.3) im Namen (MLT\_Base+F, MLT\_PT+F, MLT\_PT+PI+F).

**Tabelle 4.2.** Zusammenfassung der Spezifikationen der verwendeten 3dCTM-Läufe.

<b>3dCTM-Laufspezifikationen</b>	<b>ohne Teilchen</b>	<b>mit Teilchen</b>	<b>mit Teilchen und Fotoionisation</b>
<b>Januar 2003–Dezember 2009 von 20-70 km konstantes Sonnenspektrum</b>	SLM_Base-Lauf	SLM_PT-Lauf	---
<b>Januar 2002–August 2008 von 60-133 km konstantes Sonnenspektrum</b>	MLT_Base-Lauf	MLT_PT-Lauf	MLT_PT+PI-Lauf
<b>Januar 2002–August 2008 von 60-133 km variables Sonnenspektrum</b>	MLT_Base+F-Lauf	MLT_PT+F-Lauf	MLT_PT+PI+F-Lauf

### 4.3 Geomagnetische und solare Indikatoren

Der geomagnetische Ap-Index (Ap) dient hier als Proxy für planetare geomagnetische Störungen in der Ionosphäre und Magnetosphäre. Der Index basiert auf bodengebundenen Magnetometermessungen der Ks-Werte (s. Kap. 2.4) von 13 verschiedenen Observatorien. Letztere liegen alle in mittleren und hohen geomagnetischen Breiten ( $46^{\circ}$ - $63^{\circ}$ ), wobei sich nur zwei von ihnen auf der Südhalbkugel befinden. Schwankungen in den Magnetometerbeobachtungen können durch eine Vielzahl von Ereignissen ausgelöst werden, sodass Ap keine Aussage über die Ursache der Störung geben kann. Weiterhin enthält Ap keine Informationen über die tatsächlich auftretenden Teilchenflüsse bzw. die Energien der einzelnen Teilchen. Dennoch ist Ap ein geeigneter Proxy zur Abschätzung der Gesamtstärke aller Störungen in der Ionosphäre und Magnetosphäre, da eine positive Korrelation zwischen Ap und der Auftretswahrscheinlichkeit präzipitierender Teilchen vorliegt. Ein wesentliches Merkmal im Ap ist das Auftreten des 27-Tage-Signals (s. Kap. 2.1.2). Dieses wurde für die Analyse der stratosphärischen Ozonvariationen unterdrückt (s. Kap. 6), wohingegen es in der MLT-Region explizit untersucht wurde (s. Kap. 7 und Kap. 8). Die Berechnung der Ap-Tagesmittel erfolgte auf Basis des 3-stündigen ap-Index ([ftp://ftp.ngdc.noaa.gov/STP/GEOMAGNETIC\\_DATA/INDICES/KP\\_AP/](ftp://ftp.ngdc.noaa.gov/STP/GEOMAGNETIC_DATA/INDICES/KP_AP/)).

Der  $\geq 2$  MeV Elektronenfluss (2MeV) wurde von GOES gemessen. Der verwendete Datensatz ([ftp://ftp.ngdc.noaa.gov/STP/SOLAR\\_DATA/SATELLITE\\_ENVIRONMENT/Daily\\_Fluences/](ftp://ftp.ngdc.noaa.gov/STP/SOLAR_DATA/SATELLITE_ENVIRONMENT/Daily_Fluences/)) ist über einen Tag gemittelt und berücksichtigt Kontamination der Elektronendetektoren durch Protonen  $>32$  MeV. Zwar befinden sich GOES innerhalb der Strahlungsgürtel und liefern daher keine direkten Beobachtungen präzipitierender Teilchen. Allerdings ist in Analogie zum Ap eine positive Korrelation zwischen 2MeV und den präzipitierenden Teilchen aus den Strahlungsgürteln sehr wahrscheinlich. Folglich wird 2MeV hier auch als Proxy für den Einfluss relativistischer Elektronen aus den Strahlungsgürteln verwendet und nicht für den direkten Teilcheneintrag. Im Unterschied zu Ap berücksichtigt 2MeV Teilchen mit erheblich höheren Energien. Aufsummierte Flüsse präzipitierender Teilchen können allerdings auch direkt mit den POES-Detektoren gemessen werden, deren Zeitreihen im Vergleich zu GOES-Beobachtungen einen höheren Korrelationskoeffizienten mit geomagnetischen Indizes aufweisen [Sinnhuber et al., 2011]. Bodengebundene Beobachtungen legen allerdings nahe, dass die POES-Messungen vor allem in Zeiten schwacher geomagnetischer Aktivität den tatsächlichen Teilchenfluss unterschätzen [Rodger et al., 2013]. Da ein wesentlicher Teil des untersuchten Zeitraumes für 2002–2011 von

#### 4. Datensätze

schwacher geomagnetischer Aktivität geprägt ist, erschien es für diese Arbeit sinnvoller auf GOES-Daten zurückzugreifen.

Der tägliche solare Radioemissionsflussindex bei 10,7 cm (F10.7, <http://spidr.ngdc.noaa.gov/spidr/>) dient als Indikator für solare Variabilität und basiert auf bodengebundenen Messungen des Penticton Radio Observatory in British Columbia, Kanada (49°N, 119°W). Für den hier untersuchten Zeitraum ist F10.7 der am besten geeignete solare Proxy, da er unabhängig von der aktuellen Wetterlage (z. B. Wolken) und frei von subjektiven Einflüssen ist. Da der Ursprung der zu Grunde liegenden Strahlung in der oberen Chromosphäre und unteren Korona liegt (s. Kap. 2.1), enthält die Zeitreihe auch Informationen über emittierte Strahlung anderer Wellenlängen (z. B. UV Strahlung). Als Indikator für solare UV Strahlung eignet sich allerdings die Strahlung der Wasserstoffemissionslinie bei 121,6 nm (auch Lyman-Alpha-Strahlung, Ly- $\alpha$ ) wesentlich besser, da diese innerhalb des UV Spektrums liegt. Die zugehörigen Tagesmittel (<http://lasp.colorado.edu/lisird/lya/>) basieren auf einer Kombination von mehreren verschiedenen Messungen und Modellen. Die Beobachtungen können allerdings nur mit Hilfe von Satelliteninstrumenten durchgeführt werden, da Ly- $\alpha$  nur bis in die Mesosphäre dringt.

## 5 Datenfilterung und Analysemethoden

### 5.1 Datenanalyse in der Stratosphäre und unteren Mesosphäre

#### 5.1.1 Abschätzung von Position und Ausdehnung des antarktischen Polarwirbels

Mit Hilfe von Gl. 2 wurde hier zunächst die potentielle Vorticity (PV) berechnet, welche von der relativen Vorticity  $\zeta_r$  (Verwirbelung der Luftmassen durch ihre Bewegung), der planetaren Vorticity  $f$  (Verwirbelung auf Grund der Erdrotation), der Luftdichte  $\rho$  und der Änderung der potentiellen Temperatur  $\Theta$  mit der Höhe  $z$  abhängt.

$$PV = \frac{\zeta_r + f}{\rho} \cdot \frac{\partial \Theta}{\partial z} \quad (\text{Gl.2})$$

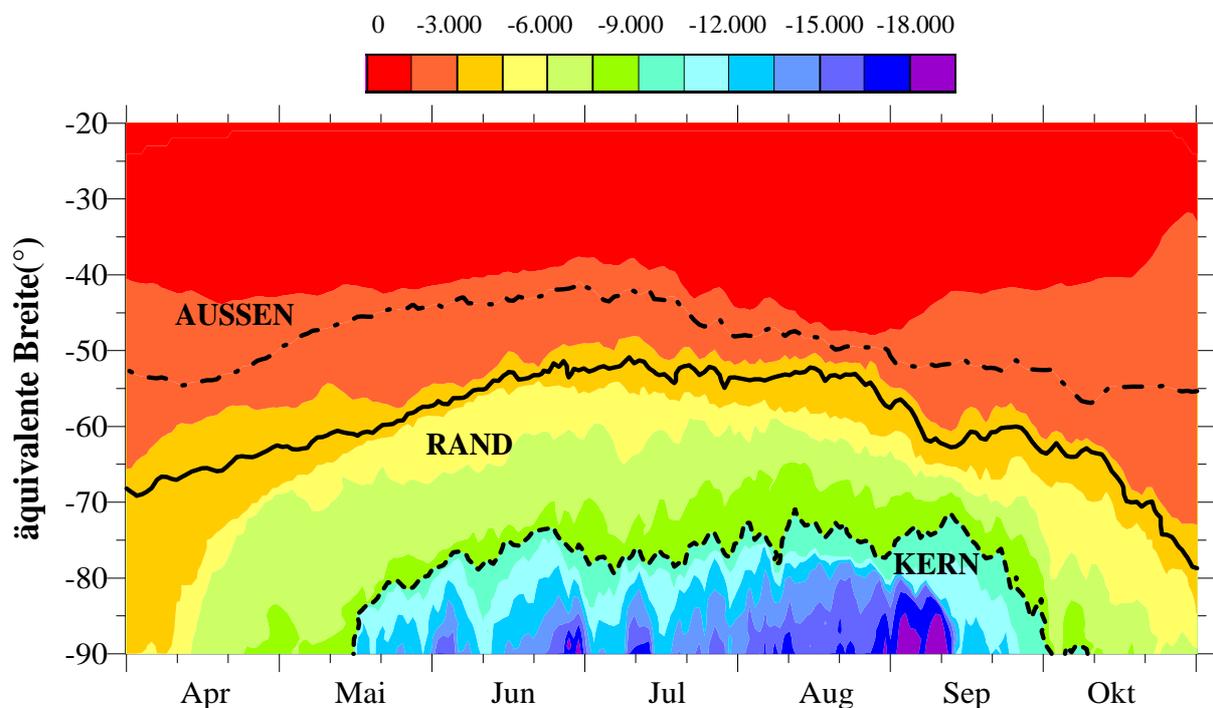
Da sich die relative Vorticity direkt aus der Verwirbelung des Windes ergibt, kann auch die PV als Maß für die Bestimmung der Wirbelstärke eines Windfeldes verwendet werden. In einer baroklinen Atmosphäre (Isobaren schneiden Isothermen) ist die PV im Gegensatz zur relativen Vorticity aber eine Erhaltungsgröße. Daher dient die PV hier zur Abschätzung von Position und Ausdehnung des antarktischen Polarwirbels, was im Detail mit der Hilfe des meridionalen Gradienten der PV erfolgte [Nash et al., 1996].

Die PV wurde individuell für alle nominellen Höhen zwischen 20 und 64 km berechnet. Hierfür wurde eine trockene Atmosphäre, ein Referenzdruck von 1000 hPa sowie eine breiten- und höhenabhängige Gravitationskonstante angenommen. Alle weiteren notwendigen Eingangsparameter (relative Vorticity, Luftdruck und -temperatur, geografische Breite) stammten aus der ERA-Interim-Version (<https://ecaccess.ecmwf.int/ecmwf>) der globalen ECMWF-Reanalysedaten [Dee et al., 2011]. Hierbei wurden meteorologische Beobachtungen assimiliert und mit einem konsistenten Algorithmus bzw. Modellversion untersucht, wodurch Abweichungen auf Grund verschiedener Analysemethoden entfallen. Die Anwendung eines einzigen Analysealgorithmus ist bei globalen Datensätzen über mehrere Dekaden in der Regel nicht gegeben, da die Daten von verschiedenen Gruppen gewonnen und somit auch individuell untersucht wurden. Der ERA-Interim-Datensatz weist ein horizontales Breiten-  $\times$  Längengitter von  $1,125^\circ \times 1,125^\circ$  auf und umfasst 60 Schichten zwischen 1000 und 0,1 hPa. Die Erstellung der Tagesmittel der PV erfolgte individuell für alle Gitterpunkte und Höhenlevel auf der Basis der 6-Stunden-Mittel für die Jahre 2002–2011. Letztlich wurden die erhaltenen Werte wiederum dem dichtesten MIPAS-Retrievalgitterpunkt zugeordnet und

## 5. Datenfilterung und Analysemethoden

gegebenenfalls arithmetisch gemittelt. Zu beachten ist, dass der verwendete ERA-Interim-Datensatz oberhalb von 50 km hauptsächlich auf Modellergebnissen und weniger auf Beobachtungen beruht. Allerdings weisen die Resultate der PV über den gesamten Bereich konsistente Strukturen auf.

Zur Visualisierung der Ergebnisse dient beispielhaft Abb. 5.1, welche die PV als Funktion von Zeit und äquivalenter Breite in 40 km im antarktischen Winter 2011 darstellt. Die Abbildung beinhaltet alle wesentlichen Eigenschaften der einzelnen Höhen und Jahre. Anstelle der geografischen Breite wurde hier die äquivalente Breite verwendet, da sich der Polarwirbel nicht zwangsläufig radialsymmetrisch über dem geografischen Südpol befindet. Zur Bestimmung der äquivalenten Breite einer PV-Isolinie erfolgte zunächst die Berechnung der von dieser PV-Isolinie umschlossenen Fläche. Anschließend wurde diese Fläche radialsymmetrisch auf den geografischen Südpol projiziert und die geografische Breite des Flächenrandes entspricht der äquivalenten Breite. Die Definition der Wirbelgrenze erfolgte über den maximalen meridionalen Gradienten der PV. Allerdings wiesen mehrere äquivalente Breiten ähnliche PV-Gradienten auf, weshalb hier eine zusätzliche visuelle Analyse



**Abbildung 5.1.** Potentielle Vorticity ( $10^{-6} \text{ K m}^2 \text{ s}^{-1} \text{ kg}^{-1}$ ) als Funktion von äquivalenter Breite und Zeit während des antarktischen Winters 2011 in ca. 40 km Höhe [adaptiert von Fyterer et al., 2015a].

## 5. Datensätze und Analysemethoden

durchgeführt wurde. Dadurch lässt sich die SH in drei Zonen unterteilen. Die erste Region repräsentiert das Wirbelzentrum (KERN), während der RAND das gesamte Gebiet des Polarwirbels, inklusive dem KERN, umfasst. Die dritte Zone heißt AUSSEN und bezieht sich auf die Fläche zwischen dem Äquator und der zugehörigen AUSSEN-Grenze. Sie ist vom RAND durch eine Pufferzone getrennt und repräsentiert demnach einen vom Wirbel nicht beeinflussten Bereich. Im Folgenden wird die RAND-Region als wahrer Polarwirbel angenommen, während die Gebiete KERN und AUSSEN zur Validierung der beobachteten Strukturen im RAND dienen. Die Grenzwerte der drei Zonen sind in Abhängigkeit von der Höhe in Tab. 5.1 dargestellt und gelten für den gesamten Zeitraum von 2002 bis 2011. Zwar liegen die Daten von ECWMF ERA-Interim nur bis etwa 64 km vor. Allerdings weist der

**Tabelle 5.1.** Grenzwerte der potentiellen Vorticity ( $10^{-6} \text{ K m}^2 \text{ s}^{-1} \text{ kg}^{-1}$ ) für die Regionen KERN, RAND und AUSSEN von 2002 bis 2011 in Abhängigkeit von der Höhe. Die Höhen wurden dem MIPAS-Retrievalgitter zugeordnet [adaptiert von Fyterer et al., 2015a].

Nominelle Höhe (km)	KERN	RAND	AUSSEN	Nominelle Höhe (km)	KERN	RAND	AUSSEN
20	-60	-50	-30	37	-3600	-1900	-1000
21	-70	-50	-30	38	-6000	-2500	-1500
22	-90	-70	-40	39	-6000	-3000	-2000
23	-150	-90	-40	40	-9000	-3500	-2000
24	-200	-100	-60	41	-9000	-4000	-2000
25	-180	-110	-60	42	-9000	-4000	-2000
26	-280	-160	-100	43	-15000	-5000	-3000
27	-360	-220	-120	44	-15000	-5500	-3000
28	-600	-250	-120	46	-22000	-8000	-4000
29	-900	-300	-150	48	-18000	-10000	-2000
30	-800	-400	-200	50	-36000	-12000	-4000
31	-1000	-400	-200	52	-32000	-16000	-4000
32	-1600	-600	-300	54	-36000	-16000	-4000
33	-2000	-800	-400	56	-60000	-30000	-5000
34	-1800	-1100	-400	58	-60000	-30000	-10000
35	-2800	-1400	-800	60	-60000	-30000	-10000
36	-4000	-1600	-1000	62–70	-180000	-90000	-30000

## 5. Datenfilterung und Analysemethoden

antarktische Polarwirbel in 60-70 km Höhe keine wesentlichen Variationen auf [Preusse et al., 2009, Abb. 2a], wodurch eine Verwendung der Grenzwerte für 64 km bis hoch in 70 km gewährleistet ist.

### 5.1.2 Datenfilterung und Analyse saisonaler Spurengasvariationen

Die Satellitendatensätze von MIPAS, SABER und SMR sowie die 3dCTM-SLM-Simulationen wurden zur Untersuchung saisonaler Schwankungen in O<sub>3</sub> im antarktischen Polarwirbel verwendet. Die Analysen wurden auf NO<sub>2</sub>, HNO<sub>3</sub> und ClONO<sub>2</sub> aus MIPAS-Messungen ausgeweitet, um einen möglichen chemischen Zusammenhang zu O<sub>3</sub> zu betrachten. Zunächst wurden sowohl für die Messungen als auch die Simulationen Tagesmittel erstellt, wenn zumindest 10 verlässliche Werte innerhalb des Polarwirbels im entsprechenden Höhenbereich vorlagen. Aus mindestens 13 Tagesmitteln wurde schließlich das laufende 26-Tage-Spurengasmittel im antarktischen Winter (April–Oktober) berechnet. Der Algorithmus wurde individuell für alle Jahre (2002–2011) und Höhenintervalle (20–70 km) angewendet.

Die Wahl des Zeitintervalls von 26 Tagen diene zur Minimierung eines möglichen Einflusses des 27-Tage-Zyklus' (s. Kap. 2.1.2) und um sicher zu stellen, dass jedes Intervall nur höchstens ein Maximum des Signals enthält. Allerdings deckt der SABER-Datensatz erst nach ca. 60 Tagen alle Lokalzeiten ab, wodurch es oberhalb von 50 km zu Ausbildung einer quasi-60 Tage Welle in O<sub>3</sub> kam. Daher wurde für die SABER-Messungen in diesem Höhenbereich ein 60-Tage-Mittel verwendet, welches auf mindestens 30 Tagesmitteln basiert. Die SMR-Messungen vor April 2007 erfolgten im relevanten Aeronomiemodus nur etwa alle drei Tage. Dennoch konnte auch in dieser Periode ein 26-Tage-Mittel berechnet werden, da die Beobachtungen den Zeitraum von 12 UTC bis 12 UTC des Folgetages umfassten und sich damit über 2 Tage (=2 Tagesmittel) erstreckten. Auf Grund der Regelmäßigkeit der auftretenden Datenlücken, ist das entsprechende 26-Tage-Spurengasmittel repräsentativ für den zugehörigen Zeitraum.

Alle Beobachtungen und Simulationen von September bis Oktober 2002 erhielten auf Grund des Zusammenbruchs des Polarwirbels keine weitere Berücksichtigung [Azeem et al., 2001]. Im Gegenzug zeigte sich kein wesentlicher Einfluss auf die Ergebnisse auf Grund des SPEs Ende Oktober 2003 [Jackman et al., 2005], was vermutlich daran liegt, dass auch die Analyse nicht über den Oktober eines Jahres hinaus ging. Für die Indizes Ap, F10.7 und 2MeV wurden

## 5. Datensätze und Analysemethoden

ebenfalls 26-Tage-Mittel erstellt, die um den 1. April zentriert sind. Auf deren Grundlage erfolgte die Einordnung der einzelnen Jahre 2002–2011 in Jahre „hoher“ und „niedriger“ Indexwerte. Die Eingruppierung wurde für die jeweiligen Indizes unabhängig voneinander durchgeführt und basierte auf der Berechnung des Indexmedians. Anschließend erfolgte die Berechnung des arithmetischen Mittelwertes für die Jahre mit niedrigen und hohen Indexwerten sowie für den gesamten Zeitraum.

Letztlich konnte so mit Hilfe von Gl. 3 die Spurengasamplitude in Abhängigkeit vom Tag  $d$  und der Höhe  $z$  berechnet werden, welche die mit dem Index assoziierten Schwankungen des Spurengases relativ zum Mittelwert aller Jahre repräsentiert.

$$\text{SLM\_Spurengasamplitude}(d, z) = \frac{\overline{\text{JahrehoherIndexwerte}(d, z)} - \overline{\text{JahreniedrigerIndexwerte}(d, z)}}{\overline{\text{alleJahre}(d, z)}} \cdot 100\% \quad (\text{Gl.3})$$

Dabei dient der Faktor 100% lediglich zur Skalierung der Werte. Das Präfix „SLM“ weist in Analogie zur Namensgebung der Modellläufe auf den Bereich der Stratosphäre und unteren Mesosphäre hin. Die Entscheidung Amplituden bzw. relative Abweichungen anstelle von absoluten Änderungen zu untersuchen resultierte aus dem Auftreten starker saisonaler und hemisphärischer Schwankungen in den Spurengasen. Die Berechnung erfolgte für  $\text{O}_3$ ,  $\text{NO}_2$ ,  $\text{HNO}_3$  und  $\text{ClONO}_2$  und wurde auch für die 26-Tage-Mittel der Indizes um den 1. Mai und 1. Juni durchgeführt, um mögliche zeitliche Verzögerungen in der Signalausbreitung zu analysieren.

Die Klassifizierung der Jahre hoher und niedriger Indexwerte berücksichtigte aber nur Jahre mit vorhandenen Spurengasmessungen. Somit hing die Einteilung der einzelnen Jahre nicht nur vom Index, sondern auf Grund von Datenlücken auch von der jeweiligen nominellen Höhe, dem Tag und dem betrachteten Instrument ab. Die erhaltenen Amplituden aller drei Instrumente wurden zusätzlich durch arithmetische Mittelung kombiniert, um das Messrauschen der einzelnen Instrumente zu verringern und folglich die statistische Signifikanz zu erhöhen. Auch hier fand die Berechnung der kombinierten Amplitude nur statt, wenn für alle Instrumente auch Messwerte des Spurengases vorlagen.

In Anlehnung an die Spurengasamplitude wurde unter Verwendung der 3dCTM-Läufe SLM\_Base und SLM\_PT eine Modellamplitude nach Gl. 4 berechnet:

$$\text{SLM\_Modellamplitude}(d, z) = 2 \cdot \frac{\text{SLM\_PT - Lauf}(d, z) - \text{SLM\_Base - Lauf}(d, z)}{\text{SLM\_PT - Lauf}(d, z) + \text{SLM\_Base - Lauf}(d, z)} \cdot 100\% \quad (\text{Gl. 4}).$$

## 5. Datenfilterung und Analysemethoden

Diese ist äquivalent zur Spurengasamplitude nach Gl. 3, da der SLM\_Base-Lauf keine Teilchen enthält und somit keine bzw. schwache geomagnetische Aktivität repräsentiert. Dahingegen berücksichtigt der SLM\_PT-Lauf den Einfluss präzipitierender Teilchen und stellt im Vergleich zum SLM\_Base-Lauf eine Zeit hoher geomagnetischer Aktivität dar.

### 5.2 Datenanalyse in der Mesosphäre und unteren Thermosphäre

#### 5.2.1 Datenselektierung

Die Daten zur Analyse des 27-Tage-Signals in atmosphärischen Spurengasen stammten von MLS-Beobachtungen (OH und O<sub>3</sub>) sowie von 3dCTM-MLT-Simulationen für mehrere Spurengase (H<sub>2</sub>O, H<sub>2</sub>, H, OH, HO<sub>2</sub>, NO, NO<sub>2</sub>, O(<sup>1</sup>D), O<sub>3</sub>) und deren Familien (HO<sub>x</sub>, NO<sub>x</sub>, O<sub>x</sub>). Die Untersuchungen umfassten unterschiedliche Zeit- und Höhenintervalle zwischen 2002 und 2014 in 60-133 km (s. Kap. 4.1.3 und 4.2) und konzentrierten sich auf O<sub>3</sub>. Auf Grund des starken Tagesgangs von O<sub>3</sub> in diesem Höhenbereich (s. Kap. 3.3), war eine differenzierte Betrachtung von Tag- und Nachtdaten erforderlich. Außerdem ist der Einfluss präzipitierender Teilchen auf die Chemie der MA in der Nacht von größerer Bedeutung, da keine Fotolyse stattfindet.

Daher wurden die Spurengasdatensätze zunächst mit Hilfe von empirisch bestimmten Grenzwerten in Tag- (Sonnenzenitwinkel <88°) und Nachtdaten (Sonnenzenitwinkel >96°) eingeordnet. Auf Basis dessen erfolgte anschließend die Erstellung von täglichen bzw. nächtlichen, zonal gemittelten Tagesmitteln für 55°-75° geomagnetischer Breite. Die zeitliche und räumliche Auflösung vom AIMOS-Modell von 2 Stunden bzw. 3,6°×3,6° (s. Kap. 4.2) ist für diese Untersuchungen daher ausreichend hoch. Die zonal gemittelten Tagesmittel wurden individuell für beide Hemisphären sowie für Sommer- und Winterbedingungen berechnet, wobei die saisonale Unterscheidung über die Tagundnachtgleichen erfolgte. Im Detail umfasste der nordhemisphärische Sommer/südhemisphärische Winter (NHS/SHW) den Zeitraum von 22. März bis zum 19. September, während sich der nordhemisphärische Winter/südhemisphärische Sommer (NHW/SHS) vom 24. September bis zum 19. März des Folgejahres erstreckte.

Die Berechnung der geomagnetischen Breiten basierte auf der Annahme eines symmetrischen Dipolfeldes, welches die zeitliche Änderung der Position des magnetischen Pols berücksichtigt (<http://www.ngdc.noaa.gov/geomag/data/poles/NP.xy>). Dessen Koordinaten stammen wiederum aus dem internationalen geomagnetischen Referenzfeldmodell

## 5. Datensätze und Analysemethoden

(Version 10) [Maus et al., 2005]. Mit dieser Approximation kann es zu größeren hemisphärischen Unterschieden kommen, da das Erdmagnetfeld in der SH deutlich stärker von der angenommenen Dipolform abweicht als in der NH. Da die Ionisationsraten des AIMOS-Modells auf Satellitenmessungen beruhen, liegt sowohl den Ergebnissen des 3dCTMs als auch den MLS-Beobachtungen das reale Erdmagnetfeld zu Grunde. Folglich spielt die angenommene vereinfachte Form des Erdmagnetfeldes in dieser Arbeit beim Vergleich der Simulationen mit den Messungen nur eine untergeordnete Rolle, da in beiden Datensätzen identische Regionen betrachtet wurden.

Aus den Datensätzen wurde der Einfluss von SPEs entfernt. Dabei galt ein Tag als kontaminiert, wenn der entsprechende  $>10$  MeV Protonenfluss den Grenzwert von  $10^5$  Protonen  $\text{m}^{-2} \text{s}^{-1} \text{sr}^{-1}$  überschritt. Die Protonenflüsse stammten von GEOS-Messungen und das genaue Datum sowie der Grenzwert eines SPEs wurden der Webseite <http://umbra.nascom.nasa.gov/SEP/> entnommen. Da einige SPEs aber um 0 UTC begannen, war ein Einfluss auf den Vortag nicht vollständig auszuschließen. Des Weiteren dauert es in der Regel einige Tage bis die einzelnen Spurengase nach einem SPE wieder ihr ursprüngliches Niveau erreicht haben. Daher wurde die gesamte Periode zwischen einem Tag vor und fünf Tagen nach dem SPE in den weiteren Untersuchungen nicht berücksichtigt. Allerdings weisen  $\text{O}_3$  und  $\text{H}_2\text{O}$  eine deutlich längere Lebensdauer als die anderen Spurengase auf, weshalb für diese beiden Spezies eine Ausweitung der Periode auf 10 Tage nach einem SPE erfolgte. Diese empirisch ermittelten Grenzen basierten auf Beobachtungen nach dem SPE im Januar 2005, welche ein Abklingen des SPE-Signals in  $\text{O}_3$  [Damiani et al., 2008] und  $\text{H}_2\text{O}$  [Winkler et al., 2012] innerhalb dieses Zeitraums nahelegen. Letztlich konnte so für die gefilterte Zeitreihe die MLT\_Spurengasamplitude in Abhängigkeit vom Tag  $d$  und der nominellen Höhe  $z$  mit Hilfe von Gl. 5 berechnet werden:

$$\text{MLT\_Spurengasamplitude}(d, z) = \frac{\text{Spurengas}(d, z) - 27\text{-Tage-Spurengasmittel}(d, z)}{27\text{-Tage-Spurengasmittel}(d, z)} \cdot 100\% \quad (\text{Gl. 5}),$$

Die MLT\_Spurengasamplitude repräsentiert die relative Abweichung bzgl. des Spurengashintergrundes (=27-Tage-Spurengasmittel), wobei der Faktor 100% erneut nur zur Skalierung der Werte diente. Das 27-Tage-Spurengasmittel ist ein laufendes Mittel um den Tag  $d$  und basiert auf mindestens 13 Tagesmitteln. Weiterhin diente es zur Filterung von Spurengasschwankungen mit Frequenzen  $>1/27 \text{ d}^{-1}$ . Da die Eigenrotation der Sonne nicht konstant bei 27 Tagen liegt (s. Kap. 2.1.2) wurde die Berechnung für verschiedene Spurengasmittel zwischen 25 und 30 Tagen wiederholt, wodurch sich aber keine wesentlichen

## 5. Datenfilterung und Analysemethoden

Unterschiede ergaben (hier nicht gezeigt). In Analogie zur SLM\_Spurengasamplitude wurden auch hier relative anstelle von absoluten Spurengasänderungen betrachtet. Der Grund ist, neben den vorhandenen saisonalen und hemisphärischen Schwankungen, aber vor allem der sehr variable Höhenverlauf bei einigen Spurengasen. Somit war ein Vergleich der Vertikalprofile nur mit Hilfe von relativen Spurengasänderungen möglich.

### 5.2.2 Überlagerte Epochenanalyse

In der Regel hängt eine Messgröße von mehr als einem Eingangsparameter ab, wodurch die Zuordnung von Variationen der untersuchten Größe zu einer bestimmten Eingangsgröße schwierig ist. Dies gilt besonders dann, wenn der gesuchte Zusammenhang vergleichsweise schwach ist und somit von anderen Signalen stark überlagert wird. Zur Isolierung des gesuchten Signals aus dem Hintergrundrauschen wird daher in dieser Arbeit eine sogenannte überlagerte Epochenanalyse (engl. superposed epoch analysis, SEA) verwendet. Diese statistische Methode wurde zum Ersten Mal von Chree [1913] beschrieben und basiert auf der Sortierung des gesamten Datensatzes nach definierten Schlüsselereignissen. Anschließend werden die Datenreihen um alle Schlüsselereignisse (Epochen) übereinander gelegt (überlagert) und letztlich arithmetisch gemittelt. Durch die Überlagerung der einzelnen Epochen sollte sich eine nicht zufällig induzierte Variation in der Messgröße durch den Eingangsparameter theoretisch verstärken, wohingegen sich Schwankungen auf Grund anderer Ursachen gegeneinander aufheben oder zumindest abschwächen. Somit ist die SEA besonders geeignet periodische und sporadische Signale zu extrahieren, die mit anderen statistischen Methoden (z. B. einer Fourier-Analyse) auf Grund der relativ schwachen Amplituden und der Phasenverschiebung des Signals schwer zu detektieren sind. Allerdings muss hierfür ein genügend großer Datensatz zur Verfügung stehen, dessen erforderliche Größe von der Stärke des Zusammenhangs zwischen Mess- und Eingangsparameter abhängt.

Mit Hilfe der SEA wurde der Einfluss präzipitierender Teilchen auf Spurengase in der MLT hinsichtlich des 27-Tage-Signals untersucht. Die SEA wurde hierbei auf die Tagesmittel von  $A_p$ , AIMOS-Ionisationsraten sowie den Spurengasamplituden aus MLS-Beobachtungen ( $O_3$  und OH) und 3dCTM-Simulationen ( $H_2O$ ,  $H_2$ , H, OH,  $HO_2$ ,  $HO_x$ , NO,  $NO_2$ ,  $NO_x$ ,  $O(^1D)$ ,  $O_3$ ,  $O_x$ ) in 60-133 km Höhe angewendet. Hierbei sind die täglichen MLS-Beobachtungen um 12 h zu den täglichen 3dCTM-Simulationen verschoben, weil letztere auf einen Schnappschuss der Atmosphäre um 0 UTC basieren. Auf Grund der Betrachtung von Variationen von nur wenigern Tagen spielt dieser Versatz beim Vergleich zwischen MLS- und 3dCTM-

## 5. Datensätze und Analysemethoden

Ergebnissen eine wesentliche Rolle. Da sich die Spurengasvariationen zeitlich auf Ap bezogen (s. nächster Abschnitt), konnte diesem Problem durch eine Verschiebung des Mittelungsintervalls des Ap-Tagesmittels entgegengewirkt werden. So bezog sich das Ap-Tagesmittel für die 3dCTM-Simulationen in der MLT auf den Zeitraum von 12 UTC bis 12 UTC des Folgetages, während Ap für die MLS-Messungen weiterhin zeitlich mit dem Kalendertag übereinstimmt.

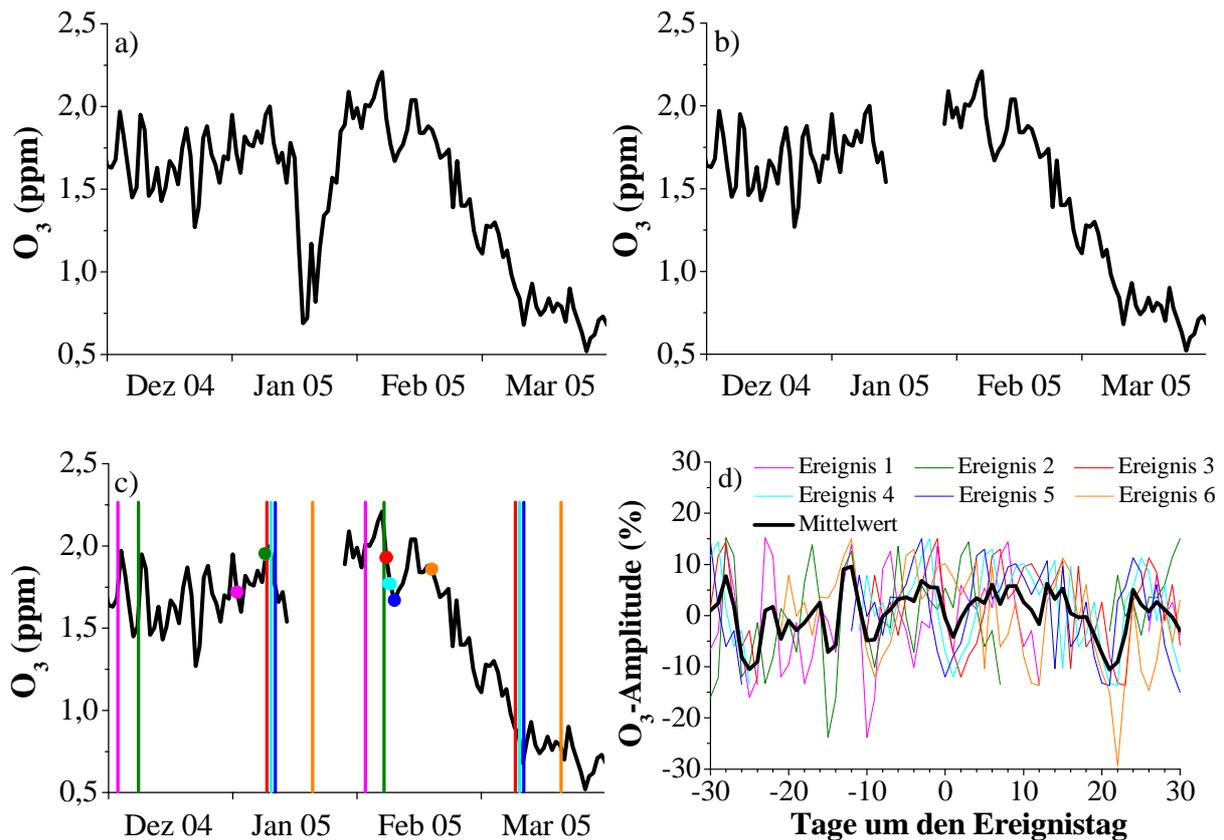
Die einzelnen Schritte zur Extrahierung des 27-Tage-Signals sind in Abb. 5.2 am Beispiel für O<sub>3</sub> aus MLS-Beobachtungen in etwa 75 km von Dezember 2004 bis März 2005 dargestellt. Zunächst wurden aus der ursprünglichen Zeitreihe (Abb. 5.2a) die durch SPEs beeinflussten Tage (15.01.15-27.01.15) herausgefiltert (Abb. 5.2b). Ausgehend von der zugehörigen Zeitreihe des Ap erfolgte anschließend die Definition der Schlüsselereignisse. Hierfür wurde in einem ersten Schritt der Mittelwert (27-Tage-Ap-Mittel) und die Standardabweichung  $\sigma(\text{Ap})$  für ein gleitendes 27-Tage-Fenster um den Tag  $d$  berechnet. Im zweiten Schritt wurde ein Tag als Ereignistag definiert, wenn der Ap folgende Bedingung erfüllte:

$$[\text{Ap}(d) - 27\text{-Tage-Ap-Mittel}(d)] > \sigma[\text{Ap}(d)] \quad (\text{Gl. 6})$$

Außerdem musste die Spurengasamplitude an diesem Tag auch tatsächlich vorhanden sein, was auf Grund von Datenlücken in den Messungen nicht immer der Fall war. Um das 27-Tage-Signal zu untersuchen, erfolgte anschließend die Betrachtung der Epochen  $\pm 30$  Tage um alle Ereignistage (Abb. 5.2c). Im nächsten Schritt wurden die zugehörigen O<sub>3</sub>-Amplituden (Gl. 5) aller Epochen überlagert (Abb. 5.2d), deren arithmetischer Mittelwert letztlich dem SEA-Signal entspricht. In diesem Beispiel sind nur die Ereignistage als solche gekennzeichnet, deren Epochen auch vollständig im betrachteten Zeitraum liegen. Dies diente allein der besseren Veranschaulichung. Für die eigentliche Analyse musste der Ereignistag noch innerhalb der Jahreszeit (Winter oder Sommer) liegen, was aber für die zugehörige Epoche nicht notwendig war.

Im gezeigten Beispiel sind noch keine Ozonvariation bzgl. geomagnetischer Aktivität zu erkennen, da die zugehörigen Ozonänderungen im Vergleich zu den Schwankungen im Ozonhintergrund deutlich geringer sind. Somit reichen die sechs berücksichtigten Ereignisse nicht aus, um das gesuchte Signal aus dem Hintergrundrauschen zu filtern. Daher wurden die Filterkriterien für das Schlüsselereignis so gewählt, dass mindestens 50 Ereignisse in jedes Hemisphäre-Jahreszeit-Intervall fallen. Auf Grund der unterschiedlichen Länge der einzelnen Datensätze von MLS und 3dCTM, schwankt auch die Anzahl der untersuchten Ereignisse.

## 5. Datenfilterung und Analysemethoden



**Abbildung. 5.2.** Einzelnen Schritte der SEA zur Extrahierung des 27-Tage-Signals am Beispiel von Aura/MLS-O<sub>3</sub>-Beobachtungen in 75 km Höhe und 55°-75°N geomagnetischer Breite: **a)** Originalzeitreihe von nächtlichen O<sub>3</sub> für Dezember 2004-April 2005, **b)** Zeitreihe nach Filterung des SPEs, **c)** Markierung aller Ereignistage und der zugehörigen ±30 Tageintervalle (Epochen), **d)** Überlagerung der zugehörigen O<sub>3</sub>-Amplituden (%) aller Epochen und deren arithmetischer Mittelwert (=SEA-Signal).

Deren individuellen Werte in Abhängigkeit von Jahreszeit, Hemisphäre und Datensatz sind in Tab. 5.2 aufgelistet, wobei die nicht identischen Werte für NHS/SHW und SHS/NHW in den MLS-Messungen aus Datenlücken resultieren.

Das erste Kriterium zur Definition eines Schlüsselereignisses (Gl. 6) führt dazu, dass auch Tage mit einem schwächeren Ap in geomagnetisch ruhigen Zeiträumen durch die dann ebenfalls kleine Standardabweichung als Ereignistag definiert werden können. Die entsprechenden Ereignisse tragen zwar folglich nur zu einem geringen Teil zur Ausprägung eines SEA-Signals bei. Ihre Berücksichtigung hat aber den Vorteil, dass alle Ereignistage relativ gleichmäßig über den gesamten Untersuchungszeitraum verteilt sind. Somit repräsentiert das erhaltene Signal den Mittelwert über den gesamten Untersuchungszeitraum.

**Tabelle 5.2.** Anzahl der Ereignisse der SEA für verschiedene Datensätze in Abhängigkeit vom Hemisphäre-Jahreszeit-Intervall.

	<b>MLS-OH (2004-2009)</b>	<b>MLS-O<sub>3</sub> (2004-2014)</b>	<b>3dCTM-MLT-Läufe (2002-2008)</b>
<b>NHS</b>	58	117	150
<b>SHS</b>	123	209	151
<b>NHW</b>	141	245	151
<b>SHW</b>	122	228	150

Weiterhin lies das gewählte Kriterium mehrere direkt aufeinanderfolgende Tage als Ereignistage zu (vgl. Abb. 5.2c). Daher sind nur etwa 70% aller Ereignistage auf einzelne Teilchenereignisse zurückzuführen, wenn direkt aufeinanderfolgende Ereignisse zu einem einzigen zusammengefasst werden.

### 5.3 Bestimmung des Signifikanzniveaus

Die statistische Signifikanz aller berechneten Amplituden aus Gl. 3-5 wurde auf Basis der Standardabweichung (Standardfehler) der laufenden 26- bzw. 27-Tage-Mittel bestimmt. Der Standardfehler entspricht dem statistischen Fehler der Mittelwerte und repräsentiert die Variation des zugehörigen Spurengashintergrundes. Ausgehend vom ungünstigsten Fall von vollständig korrelierten Standardfehlern der 26- bzw. 27-Tage-Mittel wurde eine Fehlerfortpflanzung der Beträge der Absolutfehler angenommen (Größtfehlerabschätzung). Der Fehler der MLT\_Spurengasamplitude konnte dabei direkt aus dem Standardfehler der 27-Tage-Mittel berechnet. Dahingegen erfolgte für die SLM\_Amplituden (Gl. 3-4) zunächst die Abschätzung der Fehler für deren Eingangsgrößen (Jahre hoher Aktivität, Jahre niedriger Aktivität, alle Jahre, SLM\_Base-Lauf, SLM\_PT-Lauf), welche letztlich zur Bestimmung der Fehler der SLM\_Amplituden verwendet wurden. Die zu überschreitenden Grenzwerte der Amplituden für die Signifikanzniveaus von 95% und 99% basierten auf einer studentischen t-Verteilung und hängen von der Anzahl der Freiheitsgrade ab. Demnach liegen die Werte für das 95% und 99% Signifikanzniveau für die SLM\_Amplituden bei  $\approx 2,1\sigma$  bzw.  $\approx 2,9\sigma$  und für die MLT\_Amplituden bei  $\approx 2,0\sigma$  bzw.  $\approx 2,6\sigma$ . Weiterhin wurden die MLT\_Amplituden aus MLS-Beobachtungen zusätzlich durch den Präzisionsfehler der

## 5. Datenfilterung und Analysemethoden

individuellen Spurengasmessungen validiert (s. Kap. 4.1.3). Da die Präzisionsfehler der einzelnen Messungen unabhängig voneinander sind, konnte folglich eine Fehlerfortpflanzung nach Gauß angewendet werden.

## 6. Ergebnisse und Diskussionen I: Stratosphärische Ozonverluste durch den indirekten Teilcheneffekt

Die fotochemische Lebensdauer von  $\text{NO}_x$ -Verbindungen ist zumindest während der Nacht relativ lang ( $\approx$ Tage-Monate), weshalb diese innerhalb des Polarwirbels von ihrem ursprünglichen Entstehungsort in der MLT bis hinunter in die untere Stratosphäre transportiert werden können [z. B. Solomon et al., 1982]. Dort führt der erhöhte Eintrag von  $\text{NO}_x$  in Kombination mit solarer Strahlung nach Sonnenaufgang zu katalytischen Ozonverlusten (s. Kap. 3.1.2). Somit kann es im polaren Winter zu einem indirekten Teilcheneinfluss auf das stratosphärische Ozonbudget kommen, weshalb dieser Vorgang in der englischsprachigen Fachliteratur als “energetic particle precipitation (EPP) indirect effect” bezeichnet wird.

Die relativ geringe Anzahl an vorhandenen Messungen liefern bisher nur einige Hinweise für diesen indirekten Teilcheneffekt. Randell et al. [1998] analysierten Satellitendaten für 1993-1996 und fanden eine Antikorrelation zwischen  $\text{NO}_2$  und  $\text{O}_3$  im antarktischen Winter und Frühling in 25-35 km Höhe. Dieser Zusammenhang konnte nicht durch die Zuführung von ozonarmer Luft aus höheren atmosphärischen Schichten erklärt werden und weist auf den fotochemischen Abbau von  $\text{O}_3$  durch  $\text{NO}_x$  hin. Weitere Beobachtungen aus kombinierten Satellitendatensätzen von 1992 bis 2005 zeigen außerdem, dass die Erhöhung von stratosphärischem  $\text{NO}_x$  (hier:  $=\text{NO}+\text{NO}_2$ ) in der SH auf erhöhten Teilcheneintrag zurückzuführen ist [Randell et al., 2007]. Darüber hinaus bestätigen Satellitenmessungen für 2002-2012 einen Abwärtstransport von Luftmassen mit erhöhten  $\text{NO}_y$ -Komponenten (hier:  $=\text{NO}+\text{NO}_2+\text{N}_2\text{O}_5+\text{HNO}_3+\text{HNO}_4+\text{ClONO}_2$ ) aus der Mesosphäre in die Stratosphäre [Funke et al., 2014]. Allerdings konnte das damit einhergehende Absinken von Ozonverlusten auf Grund fehlender Langzeitmessungen noch nicht in Beobachtungen nachgewiesen werden. Jedoch deuten Modellstudien daraufhin, dass es hierbei zu Ozonabnahmen von bis 30% in der unteren Stratosphäre kommen kann [z. B. Reddman et al., 2010].

Für eine Beobachtung des indirekten Teilcheneinflusses ist eine stabile Hintergrundzirkulation notwendig, welche sowohl ein ausreichend starkes Absinken induzieren als auch eine horizontale Vermischung der Luftmassen weitgehend verhindern muss. Derartige Bedingungen auf großräumigen Skalen ( $\approx 10.000$  km) werden zumeist nur im antarktischen Polarwirbel erfüllt. Dahingegen wird der arktische Polarwirbel zu stark durch atmosphärische Wellen gestört, was auch zu dessen Zusammenbruch führen kann (s. Kap. 3.2). Die damit

## 6. Stratosphärische Ozonverluste durch den indirekten Teilcheneffekt

einhergehende starke dynamische Variabilität des arktischen Polarwirbels verursacht hohe Schwankungen in den Ozonkonzentrationen, welche den indirekten Teilcheneinfluss überlagern (hier nicht gezeigt).

Daher wurde der Fokus in dieser Arbeit auf Ozonbeobachtungen innerhalb des antarktischen Polarwirbels in 20-70 km Höhe gelegt. Die verwendeten Datensätze umfassen die Jahre 2002-2011 und stammen von den unabhängigen Satelliteninstrumenten ENVISAT/MIPAS, Odin/SMR und TIMED/SABER (s. Kap. 4.1.2). Die Messergebnisse wurden hinsichtlich ihrer Beziehung zur geomagnetischen Aktivität ( $A_p$ ), dem Einfluss relativistischer Elektronen aus den Strahlungsgürteln (2MeV) und der solaren Variabilität (F10.7) untersucht (s. Kap. 4.3). Außerdem erfolgte ein Vergleich mit den 3dCTM-SLM-Läufen (s. Kap. 4.2). Bei den dargestellten Amplituden handelt es sich um SLM\_Amplituden (s. Gl. 3-4, Kap. 5.1.2), wobei zur Erhöhung der Lesbarkeit auf das Präfix „SLM“ im Text in Kap. 6 verzichtet wird. Die nachfolgenden Ergebnisse wurden bereits teilweise in Fytterer et al. [2015a] veröffentlicht.

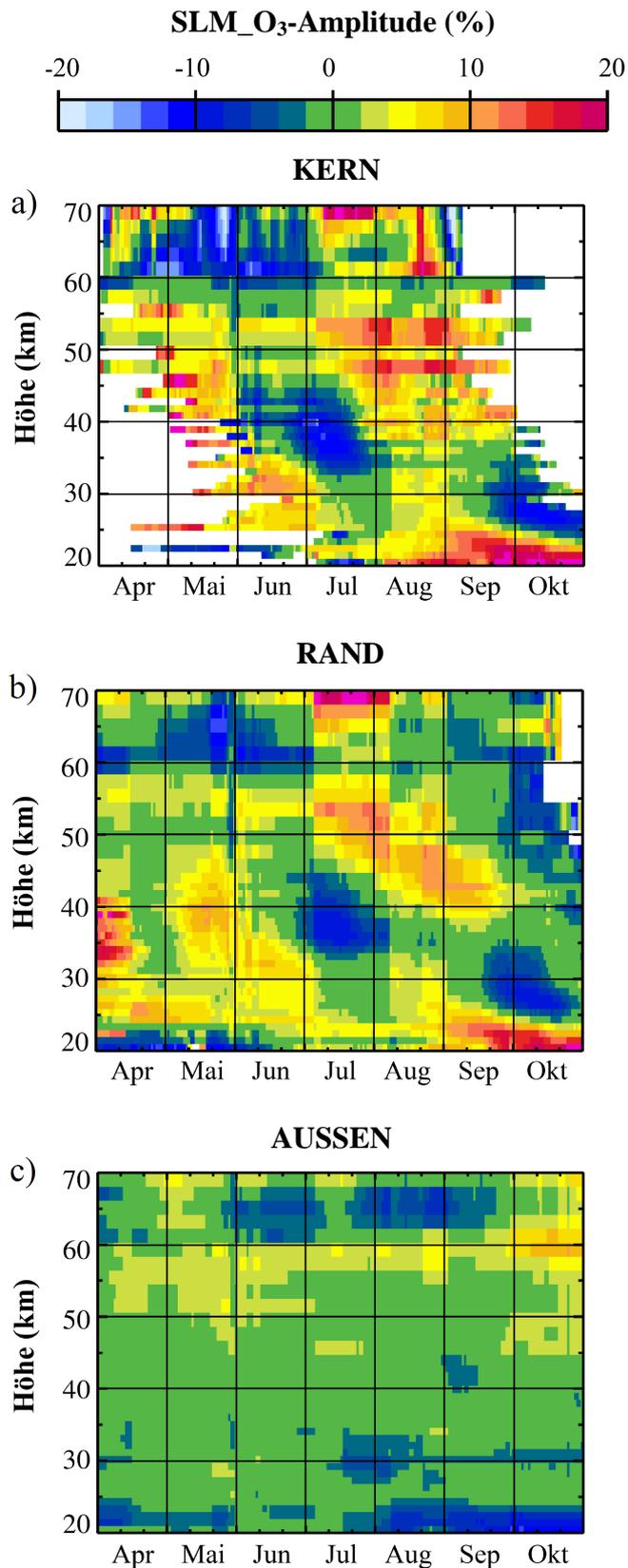
### 6.1 Indirekter Teilcheneffekt im antarktischen Polarwirbel

#### 6.1.1 Ozonvariationen von 2002 bis 2011

Die  $O_3$ -Amplituden auf Basis des 26-Tage- $A_p$ -Mittels vom 1. April wurden für alle drei Bereiche des Polarwirbels (KERN, RAND, AUSSEN) berechnet (s. Kap. 5.1). Ein Beispiel für die entsprechenden Ergebnisse aus MIPAS-Beobachtungen ist in Abb. 6.1 dargestellt, welche repräsentativ für alle Instrumente stehen und auch für die gemittelten Indizes um den 1. Mai und 1. Juni gelten. Die Muster innerhalb vom KERN (Abb. 6.1a) sind deutlich stärker verrauscht als in der RAND-Region (Abb. 6.1b), wobei beide Zonen grundsätzlich ähnliche Strukturen aufweisen. Im Gegenzug ergeben sich erhebliche Unterschiede zu den Mustern der Amplituden in der AUSSEN-Zone (Abb. 6.1c). Vor allem in der Stratosphäre sind fast keine Übereinstimmungen zu finden. Die Ergebnisse bestätigen, dass die beobachteten Ozonstrukturen hauptsächlich aus dem Wirbel selbst stammen und unterstützen die Verwendung der RAND-Region als wahren Polarwirbel.

Abbildung 6.2 zeigt die Resultate der  $O_3$ -Amplituden innerhalb der RAND-Region zwischen 2002 und 2011 bzgl. der Indexwerte um den 1. April. Dabei sind nur Strukturen oberhalb des Signifikanzniveaus von 95% dargestellt und Gebiete mit Amplituden zwischen 95% und 99% Signifikanz wurden schraffiert. Auf die Präsentation der Ergebnisse für die Indizes um

## 7. Beobachtung des 27-Tage-Signals in Spurengasen



**Abbildung 6.1.** Die SLM\_O<sub>3</sub>-Amplitude aus MIPAS-Messungen von 2002 bis 2011 zwischen Jahren mit hohen und niedrigen Ap für die Regionen a) KERN, b) RAND und c) AUSSEN [adaptiert von Fytterer et al., 2015a].

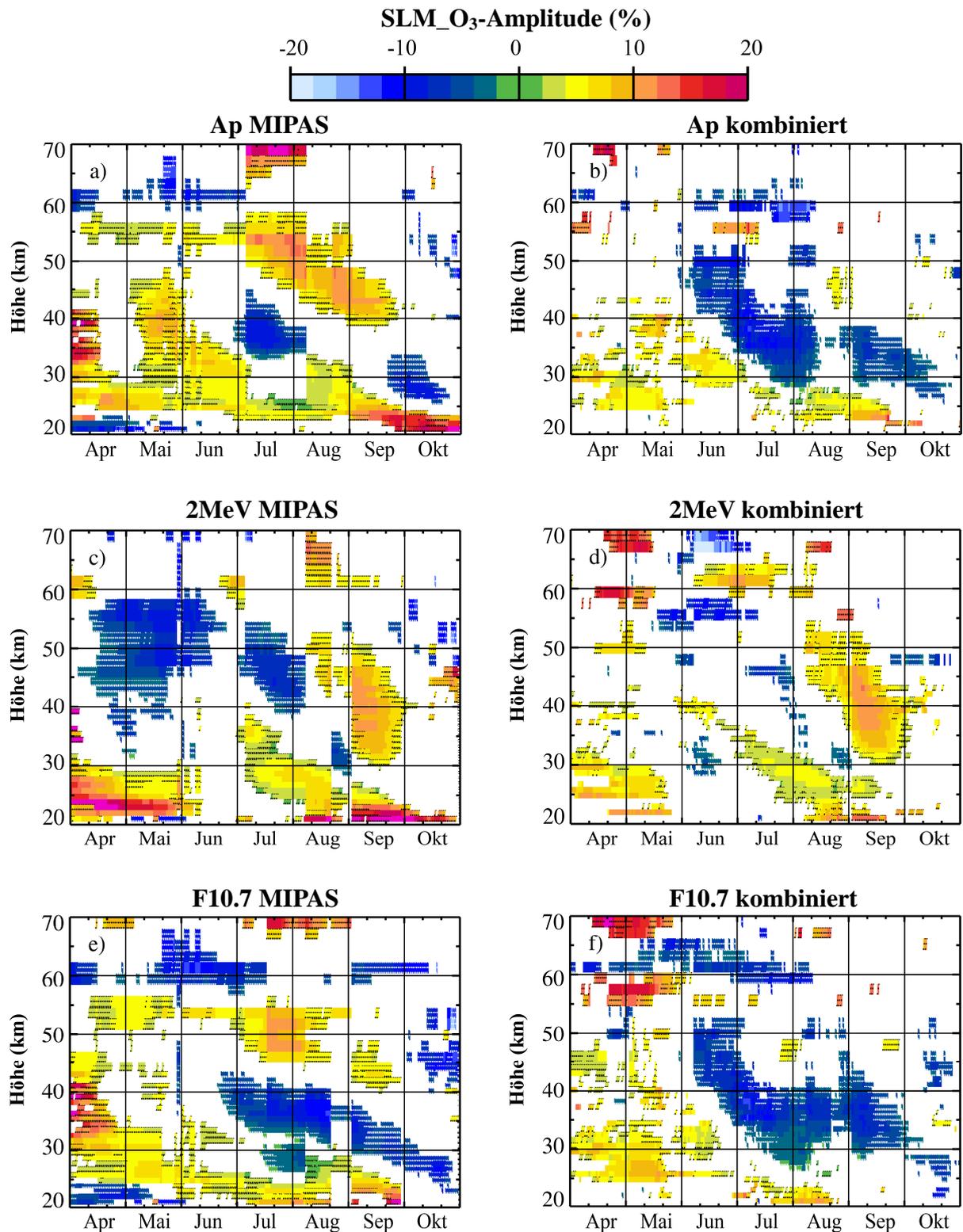
## 6. Stratosphärische Ozonverluste durch den indirekten Teilcheneffekt

den 1. Mai und 1. Juni wird hier verzichtet, da die beobachteten Strukturen entweder sehr ähnlich oder erheblich schwächer ausfallen. Eine Untersuchung für Indizes zu einem früheren Zeitpunkt war nicht vielversprechend, da sich der antarktische Polarwirbel erst im April bildet und vorher folglich kein großräumiges Absinken stattfinden kann. Des Weiteren werden nur die Ergebnisse der MIPAS-Messungen und des kombinierten Datensatzes (MIPAS+SABER+SMR) gezeigt, da die SABER- und SMR-Beobachtungen keine zusätzlichen belastbaren Informationen liefern.

Die MIPAS-O<sub>3</sub>-Amplituden bzgl. Ap (Abb. 6.2a) zeigen hohe Ozonverluste im frühen Winter in der Region >60 km von durchschnittlich 10%. Ähnliche Werte treten im Juli in 30-40 km und um den 1. Oktober in ca. 30 km auf, wodurch ein Abwärtstransport der Ozonabnahme zumindest erahnt werden kann. Ozonzunahmen sind vor allem zu Beginn des Winters in 25-55 km (10-20%) und oberhalb der angedeuteten absinkenden Ozonverluste zu sehen. Außerdem kommt es in Höhen <30 km den gesamten Winter hindurch zu erhöhten O<sub>3</sub>-Amplituden, wobei Werte von bis zu 20% im Oktober erreicht werden. Allerdings fallen die meisten dieser Strukturen unter das 95% Signifikanzniveau, sobald die drei Satellitendatensätze kombiniert werden (Abb. 6.2b). Im Gegenzug weisen die Ergebnisse des kombinierten Datensatzes auf ein ausgeprägtes Absinken von negativen O<sub>3</sub>-Amplituden auf Grund geomagnetischer Aktivität hin. Die entsprechende Struktur erstreckt sich vom Juni in ca. 50 km bis in den Oktober in 25 km und wird nur im August kurzzeitig unterbrochen. Des Weiteren sind auch die positiven O<sub>3</sub>-Amplituden unterhalb von 30 km noch deutlich zu sehen.

Ozonverluste von etwa 10% im Zusammenhang mit erhöhten 2MeV sind in MIPAS-Beobachtungen (Abb. 6.2c) zwischen 60 km im Juni und 30 km im späten August zu erkennen, was auf Abwärtstransport von Ozonabnahmen hinweist. Eine weitere Region ähnlich starker negativer Amplituden tritt im frühen Winter auf. Hohe positive Amplituden (>20%) wurden hingegen in Regionen <30 km für April-Mai und für September-Oktober beobachtet. Die starken Ozonzunahmen um den 1. Mai in Höhen >50 km resultieren aus den sehr verrauschten SMR-Messungen (s. Kap. 4.1.2). Hinzukommt eine Struktur erhöhter O<sub>3</sub>-Amplituden im September in 30-50 km (10%). Die Bereiche mit starken Ozonzunahmen bleiben auch im kombinierten Datensatz erhalten (Abb. 6.2d), wobei die Amplituden erheblich gedämpft werden. Dahingegen fallen die negativen Strukturen fast vollständig unter das 95% Signifikanzlevel. Somit ergeben sich deutliche Unterschiede im Ozonsignal in Verbindung mit Ap und 2MeV, welche sich nicht durch das fehlende Jahr 2010 im 2MeV Datensatz zu lassen.

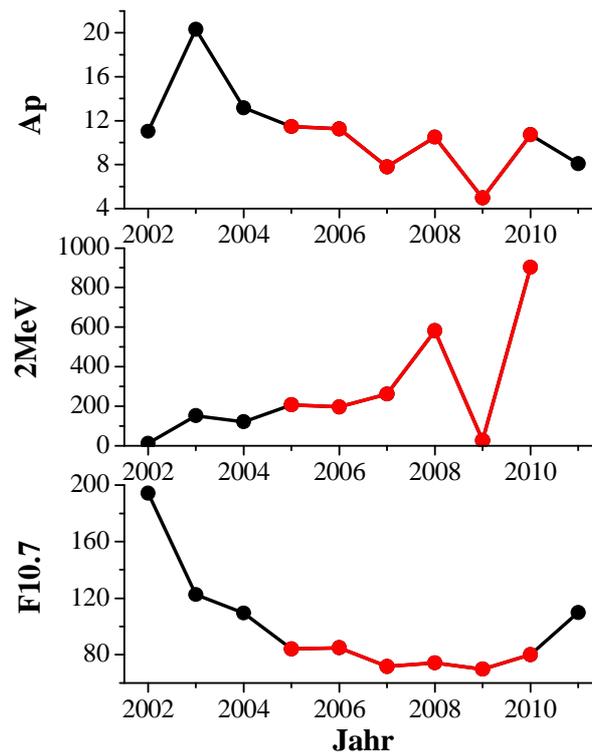
## 7. Beobachtung des 27-Tage-Signals in Spurengasen



**Abbildung 6.2.** Gemessene SLM\_O<sub>3</sub>-Amplituden in der RAND-Region bzgl. Ap (oben), 2MeV (Mitte) und F10.7 (unten) um den 1. April. Die Ergebnisse basieren auf MIPAS-Messungen (links) und auf kombinierten Daten von MIPAS, SABER und SMR (rechts) für 2002-2010 (2MeV) bzw. 2002-2011 (Ap, F10.7). Gezeigt sind nur Werte oberhalb des 95% Signifikanzniveaus. Schraffierte Bereiche stellen Amplituden zwischen 95% und 99% auf Basis eines studentischen t-tests dar [adaptiert von Fyterer et al., 2015a].

## 6. Stratosphärische Ozonverluste durch den indirekten Teilcheneffekt

Die Ozonmuster im Zusammenhang mit F10.7 (Abb. 6.2e-f) weisen eine hohe Ähnlichkeit zwischen den MIPAS-Messungen und dem kombinierten Datensatz auf. Markant sind dabei die ausgedehnten Ozonverluste von Juni in 45-50 km bis Oktober in 25 km, welche sowohl in MIPAS- als auch kombinierten Datensatz auftreten. Die sehr hohen Ozonzunahmen in der Region  $>55$  km in den kombinierten Daten gehen erneut auf die verrauschten SMR-Messungen zurück. Auffällig ist die hohe Übereinstimmung der Ozonmuster bzgl. Ap und F10.7. Ursache hier ist, dass beide Indizes im solaren Maximum (2002-2004) hohe Werte aufweisen (Abb. 6.3) und dadurch eine ähnliche Gruppierung der einzelnen Jahre vorliegt. Daher wurde der Einfluss der direkten solaren Strahlung (F10.7) minimiert, indem sich die folgenden Untersuchungen nur auf Jahre mit schwacher und annähernd konstanter Sonnenaktivität ( $F10.7 \approx 70-85 \cdot 10^{-22} \text{ W m}^{-2} \text{ Hz}^{-1}$ ) beziehen. Dies trifft auf den Zeitraum 2005-2010 zu (Abb. 6.3). Eine Vergleichbare Analyse zur Extrahierung des direkten solaren



**Abbildung 6.3.** Zeitreihen für a) Ap (2 nT), b) 2MeV (Elektronen  $\text{cm}^{-2} \text{ Tag}^{-1} \text{ sr}^{-1}$ ) und c) F10.7 ( $10^{-22} \text{ W m}^{-2} \text{ Hz}^{-1}$ ) von 2002 bis 2011. Die dargestellten Werte sind 26-Tage-Mittel um den 1. April eines Jahres, wobei für 2MeV 2011 keine Werte zur Verfügung standen. Der Zeitraum geringer solarer Aktivität (2005-2010) ist rot hervorgehoben [adaptiert von Fytterer et al., 2015a].

## 7. Beobachtung des 27-Tage-Signals in Spurengasen

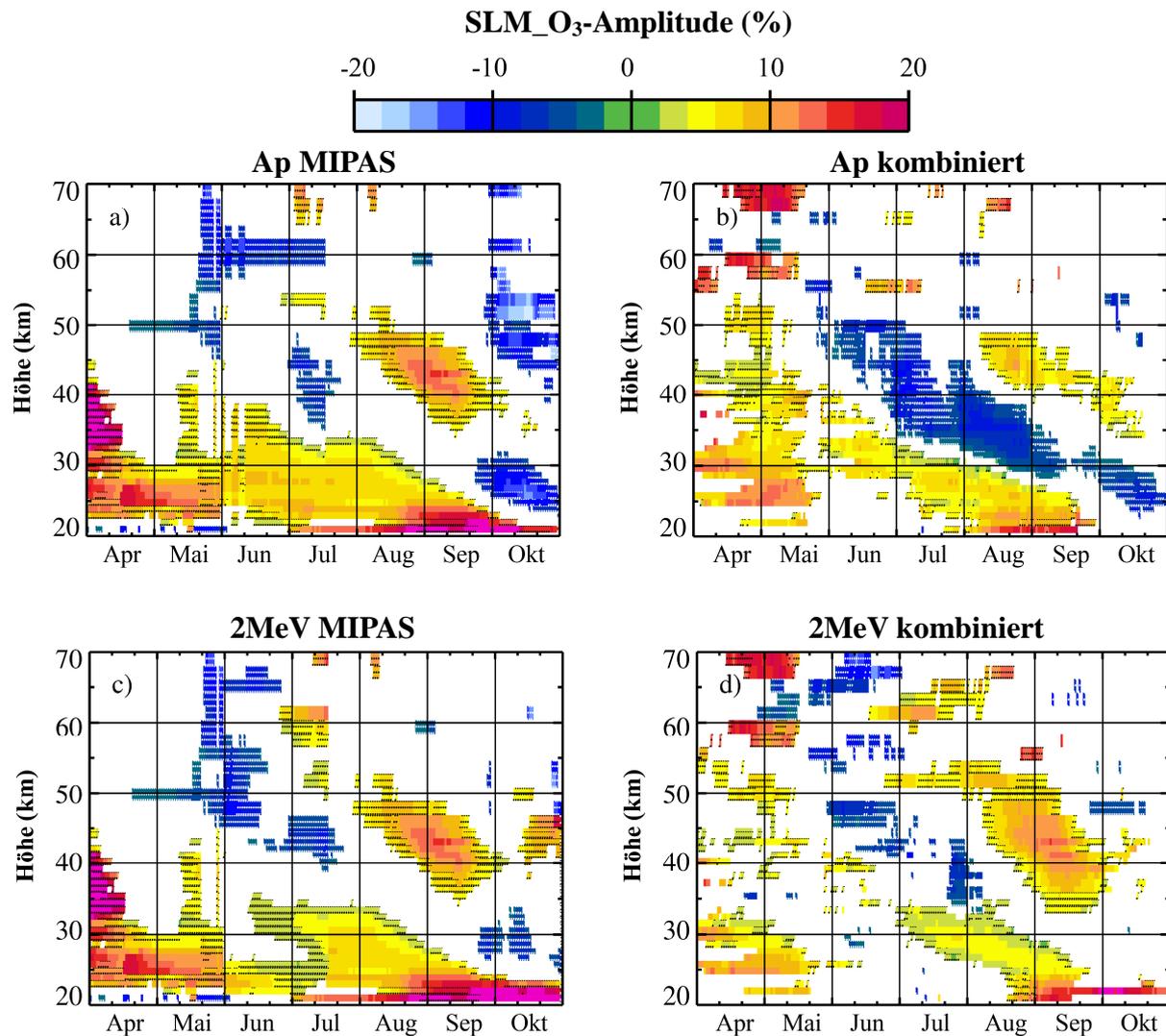
Signals war allerdings nicht möglich, da in den zugehörigen Jahren eines niedrigen Ap (2002, 2005, 2006, 2008, 2010; Abb. 6.3) nicht genügend Daten von MIPAS und SMR vorlagen. Dadurch konnte kein kombinierter Datensatz erstellt werden und die bisherigen Ergebnisse zeigen, dass das Messrauschen eines einzelnen Datensatzes zu groß für signifikante Aussagen bzgl.  $O_3$  ist.

### 6.1.2 Ozonschwankungen im solaren Minimum für 2005-2010

Abbildung 6.4 zeigt die  $O_3$ -Amplituden bzgl. Ap (oben) und 2MeV (unten) um den 1. April unter ruhigen solaren Bedingungen (2005-2010). Erneut sind nur Werte oberhalb des 95% Signifikanzniveaus dargestellt. Signifikante negative  $O_3$ -Amplituden in Verbindung mit Ap sind in MIPAS-Beobachtungen (Abb. 6.4a) im Mai (45-60 km), im Juli (35-45 km) und im Oktober (25-30 km) zu erkennen, was auf einen Abwärtstransport der Ozonverluste hinweist. Der Bereich unmittelbar um das angedeutete Absinken ist hingegen von hohen Ozonzunahmen gekennzeichnet. Diese sind im September unterhalb von 25 km mit Werten von über 30% besonders stark ausgeprägt. Die Ozonverluste in der Mesosphäre für Mai-Juli gehen eher auf  $HO_x$  als auf  $NO_x$  zurück, da die entsprechenden katalytischen  $HO_x$ - $O_3$ -Zyklen im Vergleich zu den  $NO_x$ - $O_3$ -Reaktionen hier deutlich effektiver ablaufen (s. Kap. 3.1.2). Allerdings weisen 1-d Modellsimulationen von Verronen und Lehmann [2015] auf einen indirekten Einfluss von  $NO_x$  auf den mesosphärischen Ozonabbau auf saisonalen Zeitskalen hin. Hierbei bewirkt  $NO_x$  eine Veränderung der Anteile der einzelnen  $HO_x$ -Komponenten untereinander, wodurch letztlich der Ozonverlust durch  $HO_x$  weiter verstärkt wird. Auswirkungen von  $NO_x$  auf mesosphärisches  $O_3$  können an dieser Stelle daher nicht ausgeschlossen werden.

Im kombinierten Datensatz (Abb. 6.4b) sind signifikante Ozonverluste von durchschnittlich 5-10% von Mitte Mai bis in den Oktober zu sehen, wobei das Ozonsignal von 55 km bis in 25 km absinkt. Diese Ergebnisse liefern daher einen starken Hinweis auf die Existenz des gesuchten indirekten Teilcheneffekts. Die Gebiete mit Ozonerhöhungen sind zwar im Vergleich zu den MIPAS-Messungen deutlich gedämpft, überschreiten aber weiterhin das Signifikanzlevel von 95%. Die  $O_3$ -Amplituden in der Mesosphäre sind zumeist relativ schwach ausgeprägt und lassen keine eindeutigen Aussagen über mögliche Ozonvariationen zu. Die markanten Werte im Frühwinter resultieren erneut aus den SMR-Messungen.

## 6. Stratosphärische Ozonverluste durch den indirekten Teilcheneffekt



**Abbildung 6.4.** Gemessene SLM\_O<sub>3</sub>-Amplituden in der RAND-Region bzgl. Ap (oben) und 2MeV (unten) um den 1. April auf Basis von MIPAS-Messungen (links) und kombinierten Daten von MIPAS, SABER und SMR (rechts) für 2005-2010. Gezeigt sind nur Werte oberhalb des 95% Signifikanzniveaus. Schraffierte Bereiche stellen Amplituden zwischen 95% und 99% auf Basis eines studentischen t-tests dar [adaptiert von Fytterer et al., 2015a].

Der Zusammenhang zwischen 2MeV und O<sub>3</sub> in MIPAS-Beobachtungen (Abb. 6.4c) weist eine sehr hohe Übereinstimmung zu den entsprechenden Ozonstrukturen bzgl. Ap auf. In den kombinierten Daten sind nur wenige signifikante Ozonvariationen in Verbindung mit 2MeV (Abb. 6.4d) zu erkennen. So treten hohe O<sub>3</sub>-Amplituden (10-15%) unterhalb von 30 km zu Beginn und am Ende des Winters auf. Ein weiterer Bereich markanter Ozonzunahmen ist im August und September in 30-50 km zu sehen. Ein Abwärtstransport von negativen O<sub>3</sub>-Amplituden kann hingegen lediglich vermutet werden. Zwar sind die generellen Ozonvariationen in Verbindung mit 2MeV im Vergleich zu Ap weniger stark ausgeprägt.

## 7. Beobachtung des 27-Tage-Signals in Spurengasen

Dennoch zeigt sich sowohl in den MIPAS-Messungen als auch im kombinierten Datensatz eine grundsätzliche Übereinstimmung in den zugehörigen Ozonmustern bzgl. beider Indizes. Dies lässt sich aber nicht auf einen gleichen zeitlichen Verlauf der Indizes zurückführen (vgl. Abb. 6.3). Die ähnlichen Ozonstrukturen gehen daher vermutlich auf Variationen im Sonnenwind zurück. Dieser verursacht durch Störungen im Erdmagnetfeld nicht nur Variationen in  $A_p$ , sondern auch magnetosphärische Elektronenflüsse (2MeV). Allerdings repräsentiert  $A_p$  im Vergleich zu 2MeV Teilchenpopulationen mit deutlich geringeren Energien und höheren Teilchenzahlen, was letztlich zu unterschiedlichen Signalen in  $O_3$  resultiert.

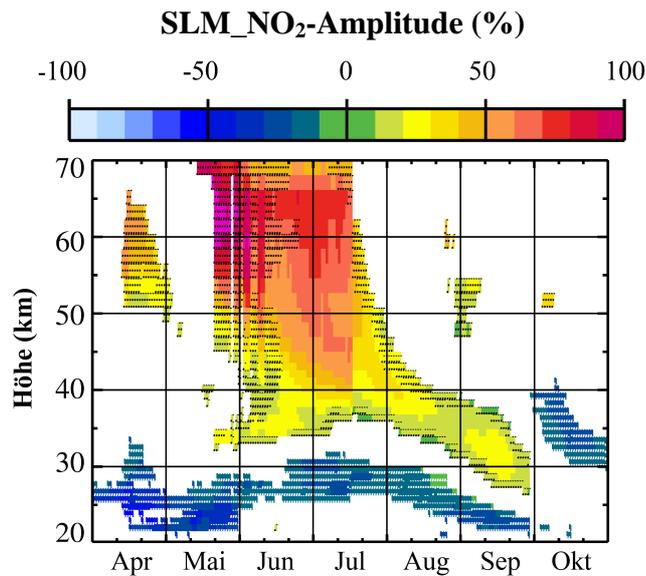
### 6.2 Chemische Ursachen der Ozonvariationen

Der stratosphärische Ozonabbau wird nicht direkt durch einfallende Teilchen verursacht, sondern geht auf erhöhte Mengen an  $NO_x$  zurück. Demnach sollten negative  $O_3$ -Amplituden mit erhöhten  $NO_x$ -Amplituden zusammenfallen, weshalb hier die Berechnung der  $NO_2$ -Amplitude für 2005-2010 aus MIPAS- $NO_2$ -Messungen bzgl. des  $A_p$  vom 1. April erfolgte. Dabei konnte  $NO_2$  als Proxy für  $NO_x$  verwendet werden, da  $NO$  in der Nacht in  $NO_2$  umgewandelt wird und letzteres folglich einen wesentlichen Anteil an  $NO_x$  innerhalb des Polarwirbels ausmacht. Die vorhandenen MIPAS- $NO$ -Messungen wurden hier nicht zur Charakterisierung von  $NO_x$  berücksichtigt, da die entsprechenden  $NO$ -Beobachtungen durch thermosphärisches  $NO$  relativ stark kontaminiert sind und sich daher nicht als Proxy für  $NO_x$  eignen [Friedrich, 2014a, Kap. 7.1].

Die berechneten  $NO_2$ -Amplituden (Abb. 6.5) weisen Erhöhungen von bis zu 100% auf. Diese überschneiden sich räumlich und zeitlich mit den entsprechenden Ozonverlusten, was einen chemischen Zusammenhang nahelegt. Der starke zeitliche Gradient Mitte Juli resultiert aus fehlenden  $NO_2$ -Daten, die ab diesem Zeitpunkt für das Jahr 2005 nicht mehr zur Verfügung standen. Dies hat jedoch keinen Einfluss auf die wesentlichen Merkmale der Strukturen in  $NO_2$ . Im Oktober fallen die  $NO_2$ -Amplituden in Höhen  $<30$  km unter das 95% Signifikanzniveau, während es dort zur einer Verstärkung der Ozonverluste kommt (vgl. Abb. 6.4b). Da letztere aber auf einen Akkumulierungseffekt von ozonarmer Luft zurückzuführen sind, stehen beide Ergebnisse nicht im Widerspruch zueinander.

Die Ozonzunahme zwischen 35 und 50 km für August-September lässt sich mit Hilfe der  $NO_2$ -Amplituden aber nicht erklären. Für eine genauere Analyse wäre ein Vergleich der

## 6. Stratosphärische Ozonverluste durch den indirekten Teilcheneffekt



**Abbildung 6.5.** Die SLM\_NO<sub>2</sub>-Amplitude bzgl. Ap um den 1. April in der RAND-Region aus MIPAS-Messungen von 2005 bis 2010. Gezeigt sind nur Werte oberhalb des 95% Signifikanzniveaus. Schraffierte Bereiche stellen Amplituden zwischen 95% und 99% auf Basis eines studentischen t-tests dar [adaptiert von Fytterer et al., 2015a].

O<sub>3</sub>- und NO<sub>2</sub>-Amplituden aus kombinierten Messungen notwendig, was aber auf Grund von fehlenden NO<sub>2</sub>-Beobachtungen von SABER und SMR nicht möglich war. Das gleichzeitige Auftreten von positiven O<sub>3</sub>- und NO<sub>2</sub>-Amplituden in dieser Region steht allerdings nicht im Widerspruch zu dem untersuchten indirekten Teilcheneffekt. Derartige Ozonvariationen können auch durch die Dynamik hervorgerufen werden (s. Kap. 3.3), worauf in Kap. 6.1.3 näher eingegangen wird. Ein weiteres auffälliges Merkmal sind die negativen NO<sub>2</sub>-Amplituden unterhalb von 30 km, welche den gesamten Winter über präsent sind und mit den zugehörigen Ozonzunahmen übereinstimmen.

Der Grund für den anhaltenden Rückgang des NO<sub>2</sub>-Abbaus in dieser Region lässt sich vermutlich auf dessen Reaktionen mit ClO, OH, NO<sub>3</sub> und BrO zurückführen, wodurch es zur Bildung der Reservoorgase ClONO<sub>2</sub>, HNO<sub>3</sub>, N<sub>2</sub>O<sub>5</sub> [López-Puertas et al., 2005, Reaktionen 1, 11 und 12] und BrONO<sub>2</sub> [Jackman et al., 2009] kommt. Bei Reservoorgasen handelt es sich um relativ langlebige Moleküle, welche das NO<sub>2</sub> speichern und erst durch die Einwirkungen solarer Strahlung wieder freisetzen (vgl. R. 27-28, Kap. 3.1.2). Demnach verursachen diese Reaktionen eine Senkung der NO<sub>2</sub>- bzw. NO<sub>x</sub>-Konzentration. Dieser Zusammenhang wurde für Modellsimulationen des Whole Atmosphere Community Climate Model [Jackman et al., 2009, Abb. 6 und 7] nach dem SPE im Juli 2000 auf die stratosphärisches

## 7. Beobachtung des 27-Tage-Signals in Spurengasen

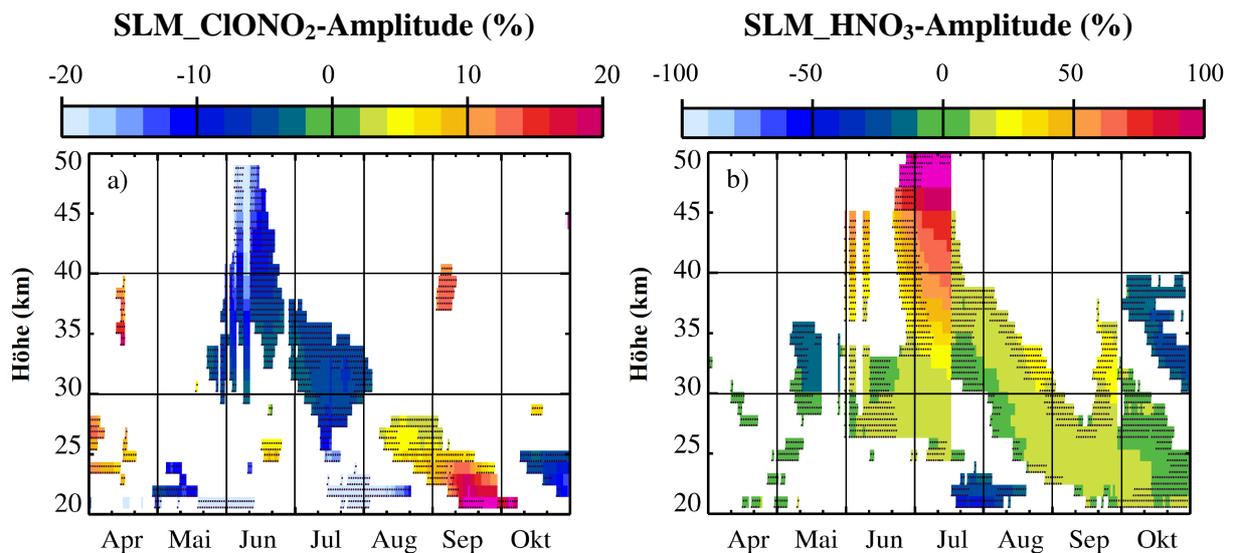
$\text{NO}_y$  (hier:  $=\text{NO}_x+\text{NO}_3+\text{N}_2\text{O}_5+\text{HNO}_3+\text{HO}_2\text{NO}_2+\text{ClONO}_2+\text{BrONO}_2$ ) in polaren Breiten näher untersucht. Die Ergebnisse zeigen in beiden Hemisphären einen Abwärtstransport von erhöhten  $\text{NO}_y$  im jeweiligen Winter bis in etwa 25 km Höhe, welcher sich zeitlich und räumlich mit stratosphärischen Ozonverlusten überlagert. Vor allem in der SH treten im Winter auch starke Ozonerhöhungen in Höhen  $<25$  km auf, obwohl weiterhin genügend  $\text{NO}_y$  vorhanden ist. Ursache hierfür ist im Modell die Bindung von  $\text{NO}_2$  in den  $\text{NO}_y$ -Komponenten  $\text{ClONO}_2$  und  $\text{BrONO}_2$ .

Zur genaueren Untersuchung einer möglichen Speicherung von  $\text{NO}_2$  in anderen  $\text{NO}_y$ -Komponenten wurden die MIPAS-Daten von  $\text{HNO}_3$  und  $\text{ClONO}_2$  analysiert. Die Beschränkung auf diese beiden Spezies liegt zum einen an nicht vorhandenen MIPAS- $\text{BrONO}_2$ -Messungen. Zum anderen zeigen MIPAS-Beobachtungen nach dem SPE im Oktober 2003, dass die damit einhergehende  $\text{N}_2\text{O}_5$ -Bildung vorrangig in größeren Höhen (35-45 km) stattfindet [López-Puertas et al., 2005, Abb. 5]. Die berechneten Spurengasamplituden von  $\text{ClONO}_2$  und  $\text{HNO}_3$  sind in Abb. 6.6 zu sehen, wobei eine Erhöhung ihrer Amplituden in Höhen  $<30$  km über einen längeren Zeitraum nicht zu erkennen ist. Dies wäre aber erforderlich, um die anhaltenden  $\text{NO}_2$ -Verluste durch die Speicherung in anderen  $\text{NO}_y$ -Komponenten zu erklären.

In  $\text{ClONO}_2$  (Abb. 6.6a) treten aber zumindest in August und September in Höhen  $<25$  km hohe Amplituden von 10-20% auf, welche sich mit starken  $\text{O}_3$ -Zunahmen überlagern. Dieses spätwinterliche  $\text{ClONO}_2$ -Maximum geht auf die Reaktion von  $\text{NO}_2$  mit  $\text{ClO}$  zurück. Somit werden sowohl eine  $\text{ClO}_x$ - als auch eine  $\text{NO}_x$ -Verbindung gebunden, was letztlich zur starken Abschwächung des katalytischen Ozonabbaus durch  $\text{ClO}_x$  und  $\text{NO}_x$  führt. Außerdem steht in diesem Raum-Zeit-Intervall bereits ausreichend solare Einstrahlung zur Verfügung, was die Produktion von  $\text{O}_3$  nach sich zieht (Chapmanreaktionen R. 14-17, Kap. 3.1.1).

In 30-50 km für Juni-Juli sind sowohl die Abnahme von  $\text{ClONO}_2$  (Abb. 6.6a) als auch die positiven  $\text{HNO}_3$ -Amplituden (Abb. 6.6b) deutlich zu erkennen. Die räumliche und zeitliche Überlagerung mit hohen  $\text{NO}_2$ -Zunahmen (vgl. Abb. 6.5) legen hier einen chemischen Zusammenhang nahe. Dabei kommt es verstärkt zur Bildung von  $\text{HNO}_3$ , da die Reaktion von  $\text{NO}_2$  mit  $\text{OH}$  schneller abläuft als mit  $\text{ClO}$  [Brasseur und Solomon, 2005, Anhang 4]. Im Gegenzug wird dadurch die Bildung von  $\text{ClONO}_2$  verlangsamt, was letztlich zu geringeren  $\text{ClONO}_2$ -Werten während hoher geomagnetischer Aktivität führt. Diese These kann aber mit den hier dargestellten Ergebnissen nicht validiert werden, wobei eine genauere Untersuchung außerhalb des Rahmens dieser Arbeit liegt. Anzumerken ist, dass die erhöhten

## 6. Stratosphärische Ozonverluste durch den indirekten Teilcheneffekt



**Abbildung 6.6.** Auf MIPAS-Messungen basierende a) SLM\_ClONO<sub>2</sub>-Amplitude und b) SLM\_HNO<sub>3</sub>-Amplitude bzgl. Ap um den 1. April in der RAND-Region für 2005-2010. Gezeigt sind nur Werte oberhalb des 95% Signifikanzniveaus. Schraffierte Bereiche stellen Amplituden zwischen 95% und 99% auf Basis eines studentschen t-tests dar. Zu beachten ist die unterschiedliche Skalierung der Amplituden.

HNO<sub>3</sub>-Amplituden keinen wesentlichen Beitrag zum beobachteten Ozonverlust leisten. Dieser resultiert in erster Linie durch die katalytischen Reaktionen von O<sub>3</sub> mit den NO<sub>x</sub>-Verbindungen, welche in dieser atmosphärischen Region deutlich effektiver ablaufen [z. B. Lary, 1997].

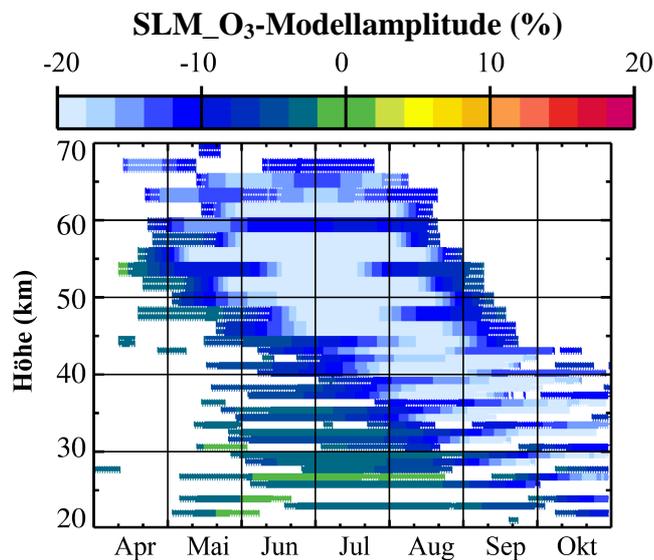
Zu den positiven O<sub>3</sub>-Amplituden unterhalb von 30 km könnte auch der Prozess der Selbstheilung eine Rolle spielen [Jackman und McPeters, 1985]. So lassen Höhenbereiche mit verringertem Ozongehalt mehr solare UV Strahlung in die darunter liegenden Schichten hindurch. Folglich kommt es in den Regionen direkt unterhalb dieser ozonärmeren Bereiche zur verstärkten Bildung von atomarem Sauerstoff, was letztlich die Bildung von O<sub>3</sub> fördert. Allerdings spielt dieser Effekt nur direkt unterhalb der Höhe verringerter Ozonkonzentration eine Rolle und kann nicht einen ganzen Höhenbereich beeinflussen. Außerdem sind die Ozonerhöhungen den gesamten Winter hindurch zu sehen, weshalb die Selbstheilung nur ein zusätzlicher Effekt sein kann und als Hauptursache ausscheidet. Eine weitere Möglichkeit ist, dass die Lebensdauer von O<sub>3</sub> im Polarwirbel unterhalb von 30 km wesentlich durch dynamische Prozesse bestimmt wird (s. Kap. 3.3). Zwar war der antarktische Polarwirbel von 2005-2010 äußerst stabil. Allerdings können dynamische Variationen der Hintergrundatmosphäre in den Beobachtungen nicht eliminiert werden. Daher kann ein

## 7. Beobachtung des 27-Tage-Signals in Spurengasen

Einfluss auf die positiven O<sub>3</sub>-Amplituden hier nicht ausgeschlossen werden und wird im folgenden Kap. 6.3 mit Hilfe von 3dCTM-Simulationen näher betrachtet.

### 6.3 Vergleiche mit Modellsimulationen für 2003-2009

Zum Vergleich mit den Ozonbeobachtungen aus Kap. 6.1.2 ist die O<sub>3</sub>-Modellamplitude (s. Gl. 4, Kap. 5.1.2) innerhalb der RAND-Region für 2003-2009 in Abb. 6.7 zu sehen. Die Betrachtung unterschiedlicher Zeiträume spielt hierbei keine wesentliche Rolle, da sowohl die Messungen (2005-2010) als auch die 3dCTM-Simulationen (2003-2009) während ähnlich schwacher solarer Aktivität stattfanden. Die Ergebnisse der O<sub>3</sub>-Modellamplitude suggerieren ein ausgeprägtes Absinken von Ozonverlusten von durchschnittlich 20% den gesamten Winter hindurch. Somit wird der stratosphärische Ozonabbau etwa um den Faktor 2 überschätzt. In der Mesosphäre fallen die Unterschiede zu den Beobachtungen deutlich stärker aus, wo für Juni und Juli O<sub>3</sub>-Amplituden von bis zu -40% auftreten.



**Abbildung 6.7.** Simulierte SLM\_O<sub>3</sub>-Modellamplitude durch präzipitierende Teilchen auf Basis der 3dCTM-Läufe SLM\_PT und SLM\_Base für 2003-2009 innerhalb der RAND-Region. Gezeigt sind nur Werte oberhalb des 95% Signifikanzniveaus. Schraffierte Bereiche stellen Amplituden zwischen 95% und 99% auf Basis eines studentischen t-tests dar [adaptiert von Fytterer et al., 2015a].

## 6. Stratosphärische Ozonverluste durch den indirekten Teilcheneffekt

Allerdings handelt es sich bei den durchgeführten 3dCTM-Simulationen um ein an/aus Experiment. In der Realität kommt es aber auch in Zeiten geringer geomagnetischer Aktivität zum Abwärtstransport von teilcheninduzierten  $\text{NO}_y$  [Funke et al., 2014]. Dies zieht ebenfalls einen schwachen Ozonabbau nach sich und dämpft letztlich die beobachtete  $\text{O}_3$ -Amplitude im Vergleich zu den Simulationen. Eine Skalierung der  $\text{O}_3$ -Amplitude in Abhängigkeit von  $A_p$  ist aber auf Grund des vermutlich nicht linearen Zusammenhanges beider Größen nicht ratsam. Zu den mesosphärischen Unterschieden trägt außerdem noch die Überschätzung von  $\text{HO}_x$  im 3dCTM bei, was letztlich ebenfalls zu einem höheren Ozonabbau führt (s. Kap. 3.1,2). Dahingegen spielt das absolut konstante solare Spektrum im 3dCTM für die Abweichungen zwischen Modell und den Messungen nur eine untergeordnete Rolle. Dies gilt zumindest in der Stratosphäre auch für die vorgeschriebene Modelldynamik, da die zugehörigen Windfelder des LIMA-Dynamikmodells im Wesentlichen noch an die ERA-40 Reanalysedaten gekoppelt sind und folglich grundsätzlich mit der Realität übereinstimmen (s. Kap. 4.2).

Größere Unterschiede zwischen 3dCTM und den Beobachtungen treten unterhalb von 30 km auf, wo die positiven  $\text{O}_3$ -Amplituden im Modell nicht zu sehen sind und stattdessen sogar schwache negative Werte aufweisen. Ursache hierfür ist, dass durch die Bildung der Differenz der Modellläufe SLM\_PT und SLM\_Base (s. Gl. 4) auch der dynamische Einfluss auf  $\text{O}_3$  eliminiert wurde. Daher zeigen die 3dCTM-Ergebnisse nur Ozonvariationen auf Grund präzipitierender Teilchen. Die wesentlichen Abweichungen zu den Beobachtungen weisen folglich auf einen starken Einfluss der Dynamik auf winterliches  $\text{O}_3$  in Höhen  $<30$  km hin, was mit den Resultaten von Garcia und Solomon [1985] übereinstimmt (s. Kap. 3.3). Somit ist die Ursache für die hohen Ozonzunahmen in diesem Bereich des Polarwirbels vermutlich sowohl auf dynamische Variabilität als auch auf die Speicherung von  $\text{NO}_2$  in anderen  $\text{NO}_y$ -Komponenten zurückzuführen. Dynamische Vorgänge sind vermutlich auch der Grund für das Fehlen der positiven  $\text{O}_3$ -Modellamplituden in August und September in 35-50 km.

Der im vorangegangenen Kap. 6.2 beschriebene Selbstheilungseffekt von  $\text{O}_3$  wurde mit Hilfe des 3dCTMs ebenfalls untersucht. Dafür erfolgte die Wiederholung der Analyse für die  $\text{O}(^1\text{D})$ , einem Indikator für die Fotolyserate von  $\text{O}_3$  durch solare UV Strahlung. Die erwartete positive  $\text{O}(^1\text{D})$ -Modellamplitude direkt unterhalb des Absinkens ist aber nur teilweise zu sehen und die Werte liegen außerdem unter dem 67% Signifikanzlevel (hier nicht gezeigt). Die prinzipielle qualitative Übereinstimmung zwischen 3dCTM und Satellitenmessungen in der Stratosphäre unterstützt die Annahme, dass das Absinken des  $A_p$ -Signals in  $\text{O}_3$  tatsächlich

## 7. Beobachtung des 27-Tage-Signals in Spurengasen

durch präzipitierende Teilchen verursacht wird.

## 7. Ergebnisse und Diskussionen II: Beobachtung des 27-Tage-Signals in Spurengasen

Mesosphärische Ozonverluste werden hauptsächlich durch  $\text{HO}_x$  verursacht, da die beteiligten katalytischen Zyklen wesentlich effektiver ablaufen als die entsprechenden Reaktionsschemata für  $\text{NO}_x$  (s. Kap. 3.1.2). Allerdings weist  $\text{HO}_x$  unterhalb von 80 km nur eine kurze Lebensdauer von weniger als einem Tag auf [Brasseur und Solomon, 2005, Abb. 5.27] und kann daher im Gegensatz zu  $\text{NO}_x$  nicht allzu weit von seiner Entstehungsregion weg transportiert werden. Da für die  $\text{HO}_x$ -Bildung Wasserdampf und Ionen benötigt werden, ist die  $\text{HO}_x$ -Produktion vor allem auf Höhen <80-85 km beschränkt (s. Kap. 2.3.1). In Satellitenbeobachtungen wird sowohl die Bildung von OH als auch den Abbau von  $\text{O}_3$  nach dem SPE im Januar 2005 in hohen Breiten ( $75^\circ$ - $82^\circ\text{N/S}$ ) ersichtlich [Damiani et al., 2008]. Weitere Untersuchungen von Aura/MLS-Satellitendaten in 70-78 km Höhe und  $55^\circ$ - $65^\circ$  geomagnetischer Breite zeigen in beiden Hemisphären eine messbare Erhöhung von OH durch präzipitierende Elektronen [Verronen et al., 2011], wobei deren Einfluss über einen längeren Zeitraum (2004-2009) in der NH stärker ausgeprägt ist [Andersson et al., 2012]. Außerdem konnte in ähnlichen Regionen mit drei unabhängigen Satelliteninstrumenten ein erheblicher Ozonverlust nach Teilchenereignissen gemessen werden [Andersson et al., 2014].

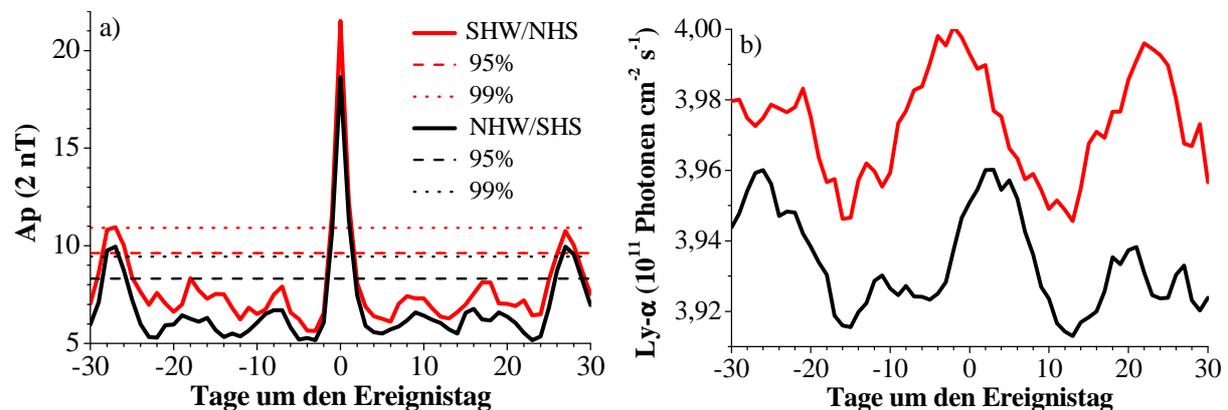
Ein 27-Tage-Signal wurde bereits in mesosphärischen OH in der Äquatorregion [Shapiro et al., 2012] und in stratosphärischem  $\text{O}_3$  in hohen Breiten während der Wintermonate beobachtet [Ruzmaikin et al., 2007]. Allerdings bezogen sich diese beiden Studien auf fotochemische Effekte und untersuchten einen Zusammenhang zum 27-Tage-Zyklus in solarer UV Strahlung. Im Gegenzug dazu erhielt das 27-Tage-Signal auf Grund geomagnetischer Aktivität bisher vergleichsweise wenig Aufmerksamkeit. Friederich et al. [2014b] beobachteten im Bereich der sommerlichen Stratopause eine markante 27-Tage-Signatur in nächtlichen  $\text{NO}_2$ -Satellitenmessungen, welche positiv mit Ap korreliert ist. Neuere Untersuchungen von Satellitenmessungen in der MLT von Hendrickx et al. [2015] und Sinnhuber et al. [2016] zeigen ein 27-Tage-Signal in polarem NO. Diese Signatur wurde ebenfalls auf den Einfluss präzipitierender Teilchen zurückgeführt und ist in beiden Hemisphäre sowohl im Sommer als auch im Winter deutlich zu erkennen.

## 8. Modellstudie des 27-Tage-Signals in Spurengasen

Daher erschien es vielversprechend in diesem Kapitel den Zusammenhang zwischen dem 27-Tage-Signal in geomagnetischer Aktivität ( $A_p$ ) und in  $O_3$  bzw. OH (=Proxy für  $HO_x$ ) zu untersuchen. Außerdem erfolgte hier eine genauere Analyse der Abhängigkeit von  $O_3$ - und OH-Variationen hinsichtlich der Stärke des geomagnetischen Ereignisses. Hierfür wurden Aura/MLS-Beobachtungen von  $O_3$  (OH) für August 2004-August 2014 (August 2004-Dezember 2009) in 60-75 km (60-81 km) Höhe verwendet. Die Untersuchungen beschränkten sich auf Nachtmessungen in  $55^\circ$ - $75^\circ$  geomagnetischer Breite und wurden individuell für beide Hemisphären im Sommer und im Winter durchgeführt. Bei den dargestellten MLT\_Spurengasamplituden wird zur Erhöhung der Lesbarkeit auf das Präfix „MLT“ verzichtet. Die in diesem Kapitel präsentierten Ergebnisse wurden bereits in Fytterer et al. [2015b] veröffentlicht.

### 7.1 Validierung des 27-Tage-Signals in geomagnetischer Aktivität

Das Ergebnis der SEA (s. Kap. 5.2.2) für  $A_p$  im Zeitraum der MLS- $O_3$ -Messungen von August 2004 bis 2014 ist in Abb. 7.1a zu sehen. Das 27-Tage-Signal ist dabei sowohl im SHW/NHS als auch im NHW/SHS deutlich zu erkennen. Die Signatur in  $A_p$  ist um den Tag 0 (=Ereignistag) zentriert, wo auch die größten Werte von  $21 \times 2$  nT im borealen Sommer bzw.  $19 \times 2$  nT im borealen Winter erreicht werden. Zwei weitere Maxima treten an den Tagen  $\pm 27$  auf, wobei diese im Vergleich zum Hauptmaximum nur etwa halb so hohe Werte aufweisen.



**Abbildung 7.1.** Überlagerte Epochenanalyse von August 2004 bis August 2014 für a) den  $A_p$ -Index ( $A_p$ ) und b) Lyman-Alpha-Strahlung ( $Ly-\alpha$ ). Für  $A_p$  sind die 95% und 99% Signifikanzniveaus als gestrichelte bzw. gepunktete Linie dargestellt. Zu beachten ist die Unterschiedliche Skalierung [adaptiert von Fytterer et al., 2015b].

## 7. Beobachtung des 27-Tage-Signals in Spurengasen

Grundsätzlich ist das Ap-Signal im SHW/SHS stärker als im NHW/SHS, was folglich auch für den Einfluss präzipitierender Teilchen auf die Spurengase zutrifft. Alle drei Maxima überschreiten das Signifikanzniveau von 99%. Einzige Ausnahme ist das Nebenmaximum am Tag +27 im SHW/SHS, welches aber zumindest noch deutlich oberhalb des 95% Signifikanzniveaus liegt.

An den Tagen der Maxima selbst ist die Variabilität des Signals am stärksten, weshalb der zugehörige Standardfehler der Mittelwerte ebenfalls höhere Werte annimmt. Somit hängt auch das Signifikanzniveau vom betrachteten Tag ab. Allerdings erschien es sinnvoller die Signifikanz des Signals bzgl. eines ruhigen geomagnetischen Hintergrundes zu berechnen, welcher sich ausgehend von Abb. 7.1a auf die Tage -20 bis -5 und +5 bis +20 bezieht. Auf Basis dieser Tage wurden daher zunächst ein ruhiger Hintergrund (Mittelwert aller SEA-Werte) und ein zugehöriger Fehler (Mittelwert aller Standardfehler der SEA-Werte) berechnet. Daraus konnte letztlich ein konstantes Signifikanzniveau für das gesamte Zeitintervall von  $\pm 30$  Tagen abgeschätzt werden. Diese Vorgehensweise wurde nicht nur für Ap, sondern auch für die AIMOS-Ionisationsraten und die Spurengasamplituden angewendet.

Das Auftreten des Hauptmaximums in Ap ist auf die Definition des Schlüsselereignisses (s. Gl. 6, Kap. 5.2.2) und somit die angewandte Methode (SEA) zurückzuführen. Dahingegen weisen die Nebenmaxima auf die Existenz eines wiederkehrenden Signals mit einer Periodendauer von ungefähr 27 Tagen hin. Dabei liegen die drei Maxima der Signatur deutlich oberhalb des Signifikanzniveaus von 95%, weshalb es sich bei dem 27-Tage-Signal in Ap sehr wahrscheinlich um ein reales Phänomen und nicht um eine Überlagerung zufälliger Signale handelt. Die Ursache für die höheren Ap-Werte des Hauptmaximums im Vergleich zu den Nebenmaxima lässt sich mit dem Auftreten von quasi-periodischen und sporadischen Ereignissen begründen, wobei letztere nur zum Hauptmaximum beitragen (s. Kap. 2.1.2). Des Weiteren sind alle drei Maxima nicht auf einen einzelnen Tag beschränkt, da auch aufeinanderfolgende Tage als Ereignisse definiert werden können. Außerdem handelt es sich hierbei nur um ein quasi-periodisches Signal, weshalb die Periodendauer nicht exakt 27 Tage beträgt.

Die hier präsentierten Merkmale des 27-Tage-Signals in Ap gelten grundsätzlich auch für den Zeitraum der MLS-OH-Beobachtungen von August 2004 bis Dezember 2009. Auf Grund des abweichenden Zeitintervalls sind aber andere Signalstärken zu erwarten, wobei die Unterschiede im Hauptmaximum mit  $21 \times 2$  nT im NHS/SHW und mit  $18 \times 2$  nT im SHS/NHW relativ gering ausfallen. Die hier erneut auftretenden saisonalen Unterschiede sind nicht auf

## 8. Modellstudie des 27-Tage-Signals in Spurengasen

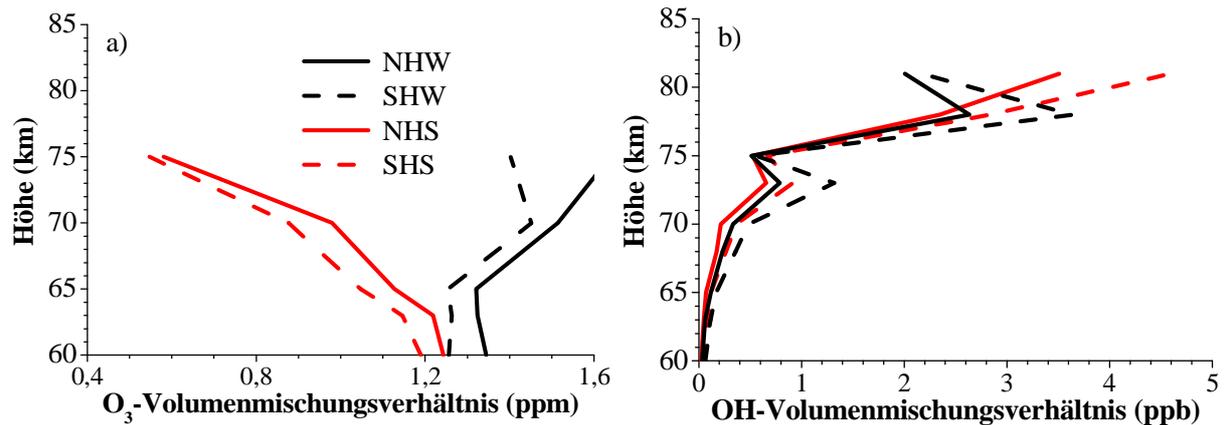
ein besonders starkes Einzelereignis zurückzuführen. Zwar basiert Ap vorrangig auf Messungen in der NH (s. Kap. 4.3), wodurch sich eine saisonale Abhängigkeit vermuten lässt. Allerdings verschwindet diese im 27-Tage-Signal bei der Betrachtung des gesamten Zeitraums der Ap-Messungen für 1932-2014 (hier nicht gezeigt). Somit ist die in Abb. 7.1a zu sehende Saisonalität dem Untersuchungszeitraum geschuldet.

Im nächsten Schritt wurde ein möglicher Zusammenhang zwischen dem 27-Tage-Signal in Ap und in der solaren UV Strahlung untersucht. Dazu sind die Ergebnisse der SEA für Ly- $\alpha$  (=Proxy für solare UV Strahlung, s. Kap. 4.3) in Abb. 7.1b zu sehen. Die Untersuchung bezog sich ebenfalls auf den Zeitraum von August 2004 bis August 2014, wobei die Resultate auch repräsentativ für die MLS-OH Periode gelten. In Ly- $\alpha$  ist in beiden Hemisphären ein deutliches 27-Tage-Signal zu erkennen. Die Maxima sind aber im Vergleich zur Signatur in Ap erheblich breiter und weisen eine variierende Phasenverschiebung im borealen und australen Sommer auf. Diese deutlichen Unterschiede ermöglichen folglich eine Zuordnung der Muster in den Spurengasen zum Signal in Ap.

### 7.2 Das 27-Tage-Signal in mesosphärischen Spurengasen

Um die Stärke der in diesem Abschnitt gezeigten Spurengasamplituden einschätzen zu können, sind in Abb. 7.2 zunächst die Klimatologien der Vertikalprofile von O<sub>3</sub> vmr und OH vmr dargestellt. In O<sub>3</sub> (Abb. 7.2a) sind nur geringe hemisphärische Differenzen zu erkennen, wohingegen die Werte im Winter grundsätzlich höher sind als im Sommer. Die saisonalen Unterschiede werden aber erst oberhalb von 65 km ersichtlich. Dabei sinkt das O<sub>3</sub> vmr im Sommer von ursprünglich etwa 1,2 ppm in 60 km auf ca. 0,5 ppm in 75 km ab, während im Winter im selben Höhenbereich eine leichte Zunahme von 1,2-1,3 ppm auf 1,5 ppm ersichtlich ist. Das OH vmr (Abb. 7.2b) weist unterhalb von 70 km nur sehr geringe Werte (<0,5 ppb) auf. In Höhen >75 km ist eine starke Zunahme zu erkennen, sodass die Werte in 80 km um mehr als eine Größenordnung über dem OH vmr in 60 km liegen. Im Gegensatz zu O<sub>3</sub> sind für das gesamte Höhenprofil in OH weder starke saisonale Schwankungen noch große hemisphärische Unterschiede zu erkennen. Das OH vmr ist in der SH durchgehend etwas größer als in der NH, was vermutlich auf die generell höhere Temperatur und den Wasserdampfgehalt in der SH zurückgeht [Andersson et al., 2012]. Das saisonale Verhalten von OH ist weiterhin konsistent mit dem von O<sub>3</sub> und weist eine Antikorrelation auf.

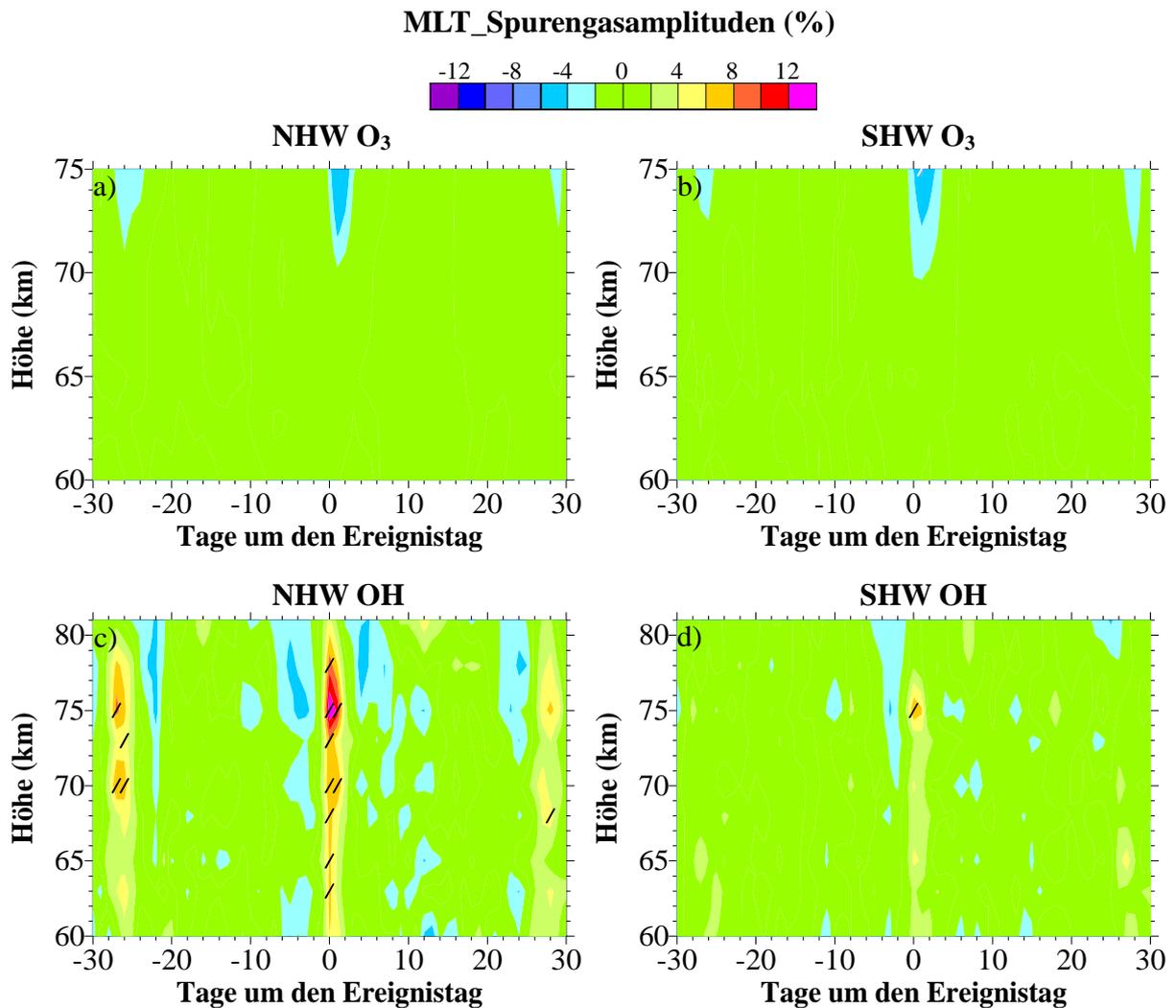
## 7. Beobachtung des 27-Tage-Signals in Spurengasen



**Abbildung 7.2.** Vertikalprofile von a)  $O_3$  und b) OH in  $55^\circ$ - $75^\circ$  geomagnetischer Breite auf der Basis von Aura/MLS-Nachmessungen von August 2004 bis August 2014 ( $O_3$ ) und von August 2004 bis Dezember 2009 (OH) [adaptiert von Fytterer et al., 2015b].

Die  $O_3$ -Amplituden aus MLS-Messungen für den Winter sind in Abb. 7.3a-b zu sehen und zeigen keine markanten hemisphärischen Abweichungen. So treten die Ozonverluste generell erst oberhalb von 70 km auf, wobei das deutlich erkennbare 27-Tage-Signal um +1 einen Tag bzgl. Ap verschoben ist. Die Ozonabnahme ist bereits an Tag 0 zu sehen und bleibt in Abhängigkeit von der Höhe für weitere 3-4 Tage bestehen. Der stärkste Ozonabbau tritt in 75 km auf und erreicht im Hauptmaximum Werte von 6% (NHW) und 7% (SHW), was konsistent mit dem saisonalen Verhalten des Ap-Signals ist. Die Nebenmaxima sind mit Werten von -2 bis -3% wesentlich schwächer ausgeprägt. Anzumerken ist, dass nur die Amplitude des Hauptmaximums im SHW das Signifikanzniveau von 95% überschreitet. Da aber alle drei Maxima in beiden Hemisphären deutlich über dem Präzisionsfehler von 0,5% liegen, kann das erhaltene 27-Tage-Signal nicht allein auf Messungenauigkeiten zurückgeführt werden.

Die Ergebnisse der  $O_3$ -Amplituden stimmen hinsichtlich Zeit und Höhe qualitativ mit den Beobachtungen von Andersson et al. [2014] überein, welche nächtlicher Ozonvariationen Aura/MLS-Daten für 2004-2012 in  $55^\circ$ - $65^\circ$  geomagnetischer Breite untersuchten. Allerdings beobachteten sie höhere Ozonverluste von 8% (NHW) und 11% (SHW), da ihre Ergebnisse auf den 60 stärksten Teilchenereignissen innerhalb des Untersuchungszeitraumes beruhen. In dieser Arbeit basiert das SEA-Signal hingegen auf mehr als 200 Ereignissen (s. Tab. 5.2). Die unterschiedlichen Breitengrad-Zeit-Intervalle spielen dahingehend nur eine untergeordnete Rolle.



**Abbildung 7.3.** Nächtliche MLT\_Spurengasamplituden in  $55^{\circ}$ - $75^{\circ}$  geomagnetischer Breite für a) NHW O<sub>3</sub>, b) SHW O<sub>3</sub>, c) NHW OH und d) SHW OH aus Aura/MLS-Beobachtungen für August 2004-August 2014 (O<sub>3</sub>) und für August 20004-Dezember 2009 (OH). Schraffierte Flächen zeigen Amplituden oberhalb des 95% Signifikanzniveaus auf Basis eines studentschen t-tests [adaptiert von Fytterer et al., 2015b].

Die winterlichen OH-Amplituden aus MLS-Beobachtungen in 60-81 km sind in Abb. 7.3c-d dargestellt. Im NHW (Abb. 7.3c) ist das 27-Tage-Signal über den gesamten Höhenbereich zu sehen und liegt in Phase mit dem Ap-Signal. Die höchsten Amplituden werden in ca. 75 km Höhe erreicht (+14%) und bleiben für 1-2 Tage bestehen. Die Amplituden des Hauptmaximums überschreiten, mit Ausnahme des obersten und untersten Höhenlevels, das 95% Signifikanzniveau. Dies gilt auch für die Nebenmaxima in 70-75 km (Tag -27) und 68 km (Tag +27). Außerdem liegen die drei Maxima in nahezu allen Höhenbereichen deutlich über dem Präzisionsfehler des MLS-Instruments von  $\approx 2\%$ , wodurch Messfehler als alleinige

## 7. Beobachtung des 27-Tage-Signals in Spurengasen

Quelle des 27-Tage-Signals erneut ausgeschlossen werden können. Das Auftreten von OH-Verlusten einige Tage vor und nach dem Hauptmaximum hat keine physikalische oder chemische Ursache. Vielmehr gehen diese Strukturen auf die Berechnung der Amplituden zurück (s. Gl. 5). So ist das gleitende 27-Tage-Mittel in der Nähe des Hauptmaximums vergleichsweise hoch, weil es auch das Hauptmaximum selbst enthält. Da OH einige Tage vor und nach dem Ereignistag im Bezug zum Hauptmaximum aber nur geringe Werte aufweist, können sich hier bei der Subtraktion des 27-Tage-Mittels vom Eintagesmittel negative Differenzen und folglich auch negative Amplituden ergeben.

Im Vergleich zum NHW sind die OH-Amplituden im SHW (Abb. 7.3d) im Durchschnitt um den Faktor 2 schwächer. Außerdem ist die gesamte Struktur wesentlich verrauschter. Daher ist das 27-Tage-Signal auch nur schwach in etwa 65 km und 75 km zu erkennen. Zumindest die Amplitude des Hauptmaximums am Tag 0 überschreitet aber in 75 km mit +8% sowohl das 95% Signifikanzniveau als auch den Präzisionsfehler ( $\approx 1\%$ ). Allerdings ist das hemisphärische Verhalten der OH-Amplituden nicht konsistent mit dem Ap-Signal, welches im SHW höhere Werte zeigt (vgl. Abb. 7.1a).

Die hier präsentierten Ergebnisse der OH-Amplituden stimmen mit Messungen von Andersson et al. [2012] überein, welche denselben OH-Datensatz unter leicht abweichenden Filterkriterien im Bezug auf Elektronenraten untersuchten. Sie fanden die höchsten Korrelationskoeffizienten zwischen OH und Elektronenraten in 70-78 km Höhe, wobei die OH-Strukturen im NHW ebenfalls wesentlich stärker ausgeprägt waren als im SHW. Ein Teil der in Abb. 7.3c-d gezeigten hemisphärischen Differenz geht auf den höheren OH-Hintergrund im SHW zurück (vgl. Abb. 7.2b), welcher im Hauptmaximum in 75 km mehr als die Hälfte der Amplitudendifferenz erklärt. Außerdem zeigen Beobachtungen von Verronen et al. [2011], dass die OH-Zunahme in der SH erst für größere Elektronenzahlraten stattfindet. Diese Thematik wird im folgenden Kap. 7.3 näher betrachtet. Des Weiteren könnte auch die unterschiedliche Temperatur in der SH und der NH eine Rolle spielen. Der entsprechende Einfluss ist aber schwer zu identifizieren, da sich die Temperatur auf die gesamte Chemie auswirkt. Im Vergleich zu den anderen Faktoren (Spurengashintergrund, Teilcheneinfluss, Dynamik der Atmosphäre) sind die verursachten Änderungen durch die Temperatur aber vermutlich gering. Daher wurde dieser Punkt hier nicht weiter untersucht.

Die zeitliche und räumliche Überlagerung der OH- und  $O_3$ -Amplituden legen einen direkten chemischen Zusammenhang nahe. Dieser stimmt mit den theoretischen Vorbetrachtungen in Kap. 3.1.2 überein und zeigt, dass OH bzw.  $HO_x$  einen wesentlichen Beitrag zum

## 8. Modellstudie des 27-Tage-Signals in Spurengasen

mesosphärischen Ozonverlust auf Zeitskalen von wenigen Tagen leistet. Das Ausbleiben von Ozonabnahmen unterhalb von 70 km hängt mit dem niedrigen OH-Hintergrund zusammen (vgl. Abb. 7.2b), welcher im Winter dort deutlich unterhalb von 0,5 ppb liegt. Daher sind die zugehörigen absoluten Änderungen ebenfalls zu gering, um sichtbare Ozonverluste zu verursachen. Beim quantitativen Vergleich der OH- und O<sub>3</sub>-Amplituden muss berücksichtigt werden, dass die Stärke des Ozonabbaus nicht von der relativen Zunahme von OH, sondern von den absoluten Änderungen in OH und O<sub>3</sub> abhängt. Auf den Zusammenhang zwischen OH und O<sub>3</sub> wird in Kap. 7.3 genauer eingegangen.

Die analogen Untersuchungen für nächtliche Messungen im Sommer (hier nicht gezeigt) sind erheblich verrauschter, was auf die geringere Datendichte zurückzuführen ist. In OH ist in der NH am Ereignistag oberhalb von 70 km eine Erhöhung zu sehen, welche das 95% Signifikanzniveau überschreitet. Ein Signifikantes 27-Tage-Signal tritt aber nur in 75 km auf. Erneut sind die Strukturen in der SH deutlich schwächer ausgeprägt, wobei dies nun konsistent mit Ap ist. In O<sub>3</sub> ist hingegen in beiden Hemisphären kein Teilcheneinfluss ersichtlich. Diese Ergebnisse gelten auch für Beobachtungen auf der Basis von Tagmessungen.

Die Ursache für die schwächeren bzw. ausbleibenden Spurengasvariationen durch präzipitierende Teilchen im Sommer lässt sich mit dem verstärkten Einfluss solarer UV Strahlung begründen. So entsteht mesosphärisches OH im Wesentlichen aus der Fotolyse von H<sub>2</sub>O (s. Kap. 2.3.1), welche geomagnetische Effekte im Sommer überlagert. Allerdings führen sowohl die Fotolyse von H<sub>2</sub>O als auch die präzipitierenden Teilchen zur Bildung von OH, weshalb der Teilcheneinfluss auf OH zumindest noch schwach zu erkennen ist. Dahingegen wird durch die Fotolyse von O<sub>2</sub> und die damit verbundene Ozonproduktion (s. R.14, Kap. 3.1.1) der teilcheninduzierte Ozonabbau sehr schnell kompensiert. Dies geht aus Untersuchungen von Damiani et al. [2006] hervor, wobei Ozonverluste nach dem SPE im Januar 2005 in der SH nur für bis zu 12 h nach dem Ereignis zu erkennen waren. Dieser SPE fiel mit einem Ap von etwa 84×2 nT zusammen und war daher erheblich stärker als das hier betrachtete 27-Tage-Signal (18-21×2 nT, vgl. Abb. 7.1a). Demnach sind die sommerlichen Ozonvariationen in dieser Arbeit vermutlich von kürzerer Dauer und folglich in Tagesmitteln nicht zu erkennen.

## 7. Beobachtung des 27-Tage-Signals in Spurengasen

### 7.3 Spurengasvariationen in Abhängigkeit der Stärke geomagnetischer Ereignisse

Um den Zusammenhang zwischen  $A_p$ , OH und  $O_3$  genauer zu analysieren wurden alle SEA-Ereignisse des gemeinsamen Zeitintervalls von August 2004 bis Dezember 2009 zunächst nach ihrer Stärke ( $\Delta A_p$ ) sortiert, was für den Tag  $d$  mit Hilfe von Gl. 7 erfolgte:

$$\Delta A_p(d) = [A_p(d) - 27\text{-Tage-}A_p\text{-Mittel}(d)] \quad (\text{Gl. 7}).$$

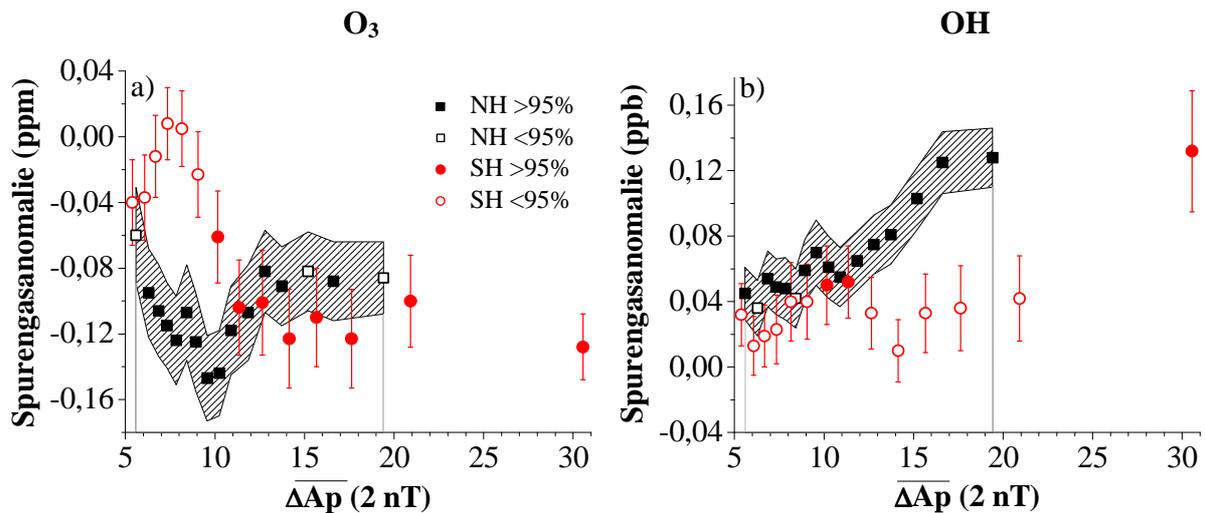
Anschließend wurden alle Ereignisse in 16 überlappende Gruppen eingeteilt, welche jeweils eine Größe von 0,25 Perzentilen aufweisen und um 0,05 Perzentile zueinander verschoben sind. Somit umfassen die einzelne Gruppen die gleiche Anzahl an Ereignissen (NHW:  $\approx 35$ , SHW  $\approx 30$ ). Dabei treten die schwächeren (stärkeren) Ereignisse vorzugsweise im Minimum (Maximum) des 11-jährigen solaren Zyklus' auf, wobei ein wesentlicher Einfluss durch die solare UV Strahlung ausgeschlossen werden kann (vgl. Abb. 7.1b, Kap. 7.1). In dieser Analyse wurden im Gegensatz zu den bisherigen Untersuchungen allerdings keine relativen, sondern absolute Spurengasänderungen zum Hintergrund als Funktion von Tag  $d$  und Höhe  $z$  betrachtet:

$$\text{MLT\_Spurengasanomalie}(d, z) = \text{Spurengas}(d, z) - 27\text{-Tage-Spurengasmittel}(d, z) \quad (\text{Gl. 8}).$$

Diese werden hier zur eindeutigen Abgrenzung zu den relativen Spurengasänderungen (Amplituden) als Anomalien bezeichnet. Dadurch lassen sich die Spurengasvariationen eines Höhenlevels für beide Hemisphären direkt miteinander vergleichen, da der Ozonabbau von der absoluten Menge an gebildeten OH und nicht von dessen Abweichung zur Hintergrundkonzentration abhängt.

Die Ergebnisse für winterliches  $O_3$  und OH sind in Abb. 7.4 als Funktion der Ereignisstärke ( $\overline{\Delta A_p}$ ) dargestellt, wobei  $\overline{\Delta A_p}$  das arithmetische Mittel aller Ereignisse in dieser Gruppe ist. Die Anomalien wurden dem Hauptmaximum in 75 km Höhe entnommen, welches für OH am Tag 0 und für  $O_3$  am Tag +1 auftrat. Die  $O_3$ -Anomalien sind in der NH (Abb. 7.4a) fast ausschließlich oberhalb des 95% Signifikanzniveaus. Hierbei ist bereits für schwache geomagnetische Ereignisse ( $\overline{\Delta A_p} < 10 \times 2$  nT) eine signifikante Zunahme der Ozonverluste zu erkennen. Nach Erreichen des maximalen Ozonabbaus von ca. 0,15 ppm wird die Anomalie für stärkere Ereignisse allerdings auf -0,09 ppm gedämpft. Im Vergleich zur NH setzt der Ozonverlust in der SH bzgl.  $\overline{\Delta A_p}$  leicht verzögert ein. Die  $O_3$ -Anomalie erreicht dann für  $\overline{\Delta A_p} \approx 10\text{-}15 \times 2$  nT Werte von etwa -0,11 ppm und zeigt für stärkere Ereignisse keine signifikanten Änderungen. In beiden Hemisphären ist somit ab einer bestimmten Stärke der

## 8. Modellstudie des 27-Tage-Signals in Spurengasen



**Abbildung 7.4.** Die MLT\_Spurengasanomalien des Hauptmaximums in 75 km Höhe als Funktion der mittleren Ereignisstärke  $\overline{\Delta A_p}$  für a) O<sub>3</sub> und b) OH in 55°-75° geomagnetischer Breite. Gefüllte Symbole zeigen Anomalien oberhalb des 95% Signifikanzniveaus auf Basis eines studentischen t-tests. Der 1 $\sigma$  Fehler der Anomalien ist als schraffierte Fläche (NH) und als Fehlerbalken (SH) dargestellt. Zu beachten ist die unterschiedliche Skalierung [adaptiert von Fytterer et al., 2015b].

geomagnetischen Ereignisse zunächst keine weitere Zunahme der Ozonverluste zu erkennen. Vor dem Eintreten dieses scheinbaren Sättigungszustands ist außerdem ein Schwellwert angedeutet, welcher zur Initialisierung des Ozonabbaus überschritten werden muss. Allerdings scheint dies in der NH bereits für sehr schwache geomagnetische Ereignisse der Fall zu sein, wodurch eine Angabe des Grenzwerts nicht möglich ist.

Wie bei O<sub>3</sub> liegen auch die OH-Anomalien (Abb. 7.4b) in der NH nahezu vollständig über dem 95% Signifikanzniveau. Dabei ist für  $\overline{\Delta A_p} < 10 \times 2$  nT kein Teilcheneinfluss zu sehen, während für stärkere geomagnetische Ereignisse eine signifikante Verdopplung der Anomalien auf etwa 0,13 ppb ersichtlich wird. Diese schwächt sich aber für  $\overline{\Delta A_p} > 15 \times 2$  nT wieder ab. In der SH sind die OH-Anomalien zumeist unterhalb des 95% Signifikanzniveaus und zeigen erst für  $\overline{\Delta A_p} \approx 30 \times 2$  nT eine wesentliche Zunahme. In beiden Hemisphären liegt zwischen  $\overline{\Delta A_p}$  und OH für schwächere Ereignisse nur eine geringe Korrelation vor, sodass die entsprechenden OH-Variationen auf andere Effekte zurückzuführen sind (z. B. dynamisch verursachte Schwankungen der Hintergrundatmosphäre). Des Weiteren deuten die Ergebnisse darauf hin, dass teilcheninduzierte OH-Bildung erst ab einer bestimmten Stärke der

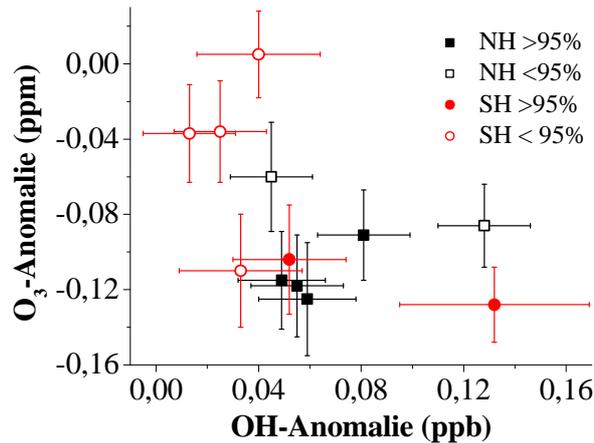
## 7. Beobachtung des 27-Tage-Signals in Spurengasen

geomagnetischen Aktivität einsetzt. Allerdings kann dieses Verhalten in der SH nur erahnt werden, da die beobachtete Zunahme von OH auf nur einem Datenpunkt basiert. Außerdem ist dieser Schwellwert in der SH etwas höher als in der NH, was eine weitere wesentliche Ursache für die schwächeren OH-Amplituden im SHW im Vergleich zum NHW sind (vgl. Abb. 7.3).

Die Existenz von Schwellwerten unterschiedlicher Höhe in beiden Hemisphären stimmt mit den Beobachtungen für OH-Anomalien von Verronen et al. [2011] überein. Das Auftreten eines Schwellwertes lässt sich damit begründen, dass für OH-Zunahmen zunächst eine bestimmte Menge an Teilchen die entsprechende Höhe erreichen muss. Auch wenn Ap selbst keine Informationen über die tatsächlichen Teilchenflüsse und Teilchenenergie liefert, ist doch anzunehmen, dass zumindest einer der beiden Faktoren positiv mit Ap korreliert (s. Kap. 2.4). Dies sollte demnach auch für  $\Delta Ap$  gelten, wodurch ab einer bestimmten Stärke der geomagnetischen Störung genügend Teilchen in der entsprechenden Höhe (hier 75 km) zur OH-Bildung vorhanden sind. Die hemisphärischen Differenzen hinsichtlich der Höhe des Schwellwerts könnten mit dem Erdmagnetfeld zusammenhängen. Dieses weicht in der SH deutlich von der Form des angenommenen Dipolfeldes ab, wodurch die berechneten geomagnetischen Breiten des Auroraovals in der SH weniger gut mit der Realität übereinstimmen als in der NH. Eine endgültige Erklärung kann an dieser Stelle aber nicht gegeben werden und eine genauere Untersuchung liegt außerhalb des Rahmens dieser Arbeit.

Zur weiteren Untersuchung des Zusammenhangs zwischen  $O_3$  und OH sind in Abb. 7.5 die  $O_3$ -Anomalien als Funktion der OH-Anomalien zu sehen, wobei es sich lediglich um eine andere Visualisierung der Ergebnisse aus Abb. 7.4 handelt. Zur Erhöhung der Lesbarkeit ist aber nur jedes 3. Anomalienpaar dargestellt. Hierbei werden die Anomalien beider Hemisphären als ein zusammenhängender Datensatz betrachtet, da der zu Grunde liegende OH- $O_3$ -Zyklus im Wesentlichen von den absoluten Änderungen beider Spurengase abhängt. Außerdem kann mit der gemeinsamen Betrachtung ein größeres Spektrum an Spurengasanomalien abgedeckt werden. Die Ergebnisse zeigen, dass bereits geringe OH-Erhöhungen ( $<0,06$  ppb) zu relativ hohen Ozonverlusten führen. Dies lässt sich mit dem sehr effektiven katalytischen Ozonabbau begründen. Nachdem  $O_3$ -Anomalien von etwa  $-0,1$  bis  $-0,15$  ppm erreicht sind, bewirkt aber selbst eine Verdopplung der OH-Anomalien keine weitere Ozonabnahme. Dadurch wird ein nicht linearer Zusammenhang zwischen OH und  $O_3$  angedeutet. Die hier präsentierten Ergebnisse konnten auch in 70 km beobachtet werden (hier nicht gezeigt), weshalb es vermutlich kein zufällig auftretendes Muster ist.

## 8. Modellstudie des 27-Tage-Signals in Spurengasen



**Abbildung 7.5:** Die MLT\_O<sub>3</sub>-Anomalien als Funktion der MLT\_OH-Anomalien des Hauptmaximums in 75 km Höhe. Zur Erhöhung der Lesbarkeit ist aber nur jedes 3. Anomalienpaar dargestellt. Die 1 $\sigma$  Fehler sind durch horizontale und vertikale Fehlerbalken dargestellt. Gefüllte Symbole zeigen Anomalienpaare oberhalb des 95% Signifikanzniveaus auf Basis eines studentischen t-tests [adaptiert von Fytterer et al., 2015b].

Das Ausbleiben von stärkeren Ozonverlusten trotz steigender OH-Anomalien könnte auf ein chemisches Gleichgewicht zwischen OH bzw. HO<sub>x</sub> und O<sub>3</sub> zurückgehen. Die Ursache hierfür ist, dass der Ozonabbau nicht nur von der Menge an OH bzw. HO<sub>x</sub>, sondern auch von O<sub>3</sub> selbst abhängt. Die durch die HO<sub>x</sub>-Verbindungen initiierten Ozonabnahmen führen daher auch zu einer Senkung der Geschwindigkeit der einzelnen Reaktionen des HO<sub>x</sub>-O<sub>3</sub>-Zyklus. Für schwache geomagnetische Ereignisse und die damit verbundenen geringen OH-Erhöhungen kann es folglich durchaus zu einer Art Sättigung beim Ozonabbau kommen, da sich das HO<sub>x</sub>-O<sub>3</sub>-System vorübergehend im chemischen Gleichgewicht befindet. Dies gilt aber nur für relativ schwache geomagnetische Aktivität, da durch SPEs Ozonverluste von bis zu -70% beobachtet wurden [Jackman et al., 2001]. Eine weitere Möglichkeit für die Erklärung des nicht linearen Zusammenhangs basiert darauf, dass O<sub>3</sub> in der Mesosphäre in erster Linie durch H und nicht durch OH abgebaut wird [Brosseur und Solomon, 2005, Anhang 3]. Bei einer Änderung der Anteile der HO<sub>x</sub>-Komponenten untereinander könnte OH möglicherweise nicht mehr als Proxy für HO<sub>x</sub> geeignet sein. Die Untersuchung dieser These setzt aber sehr genaue Modellstudien voraus, die außerhalb des Rahmens dieser Arbeit liegen. Als 3. Möglichkeit kommt eineventueller Einfluss von NO<sub>x</sub> in Frage, was in Kap. 9.1.3 näher analysiert wird. Auch wenn sich der Zusammenhang zwischen von O<sub>3</sub> und OH hier nicht mit letzter Gewissheit erklären lässt, hat dies keine Auswirkungen auf die gefundenen Ergebnisse von OH und O<sub>3</sub> bzgl.  $\overline{\Delta\text{Ap}}$ .

## **8. Ergebnisse und Diskussionen III: Modellstudie des 27-Tage-Signals in Spurengasen**

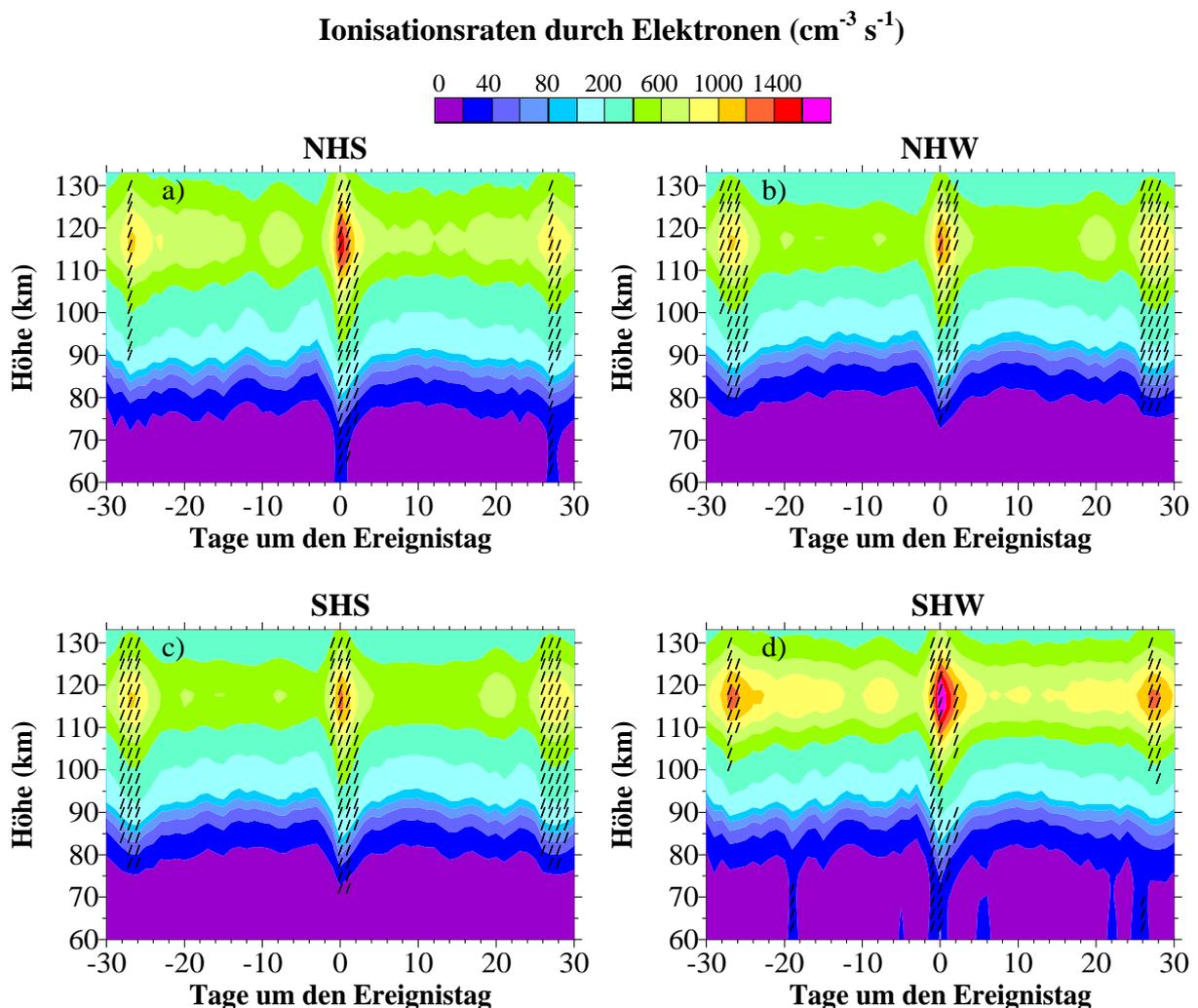
Die Ergebnisse aus dem vorangegangenen Kap. 7 zeigen ein klares 27-Tage-Signal in  $O_3$  und OH in der winterlichen Mesosphäre auf Grund geomagnetischer Aktivität. In diesem Kap. 8 soll nun überprüft werden, ob diese beobachteten Muster mit dem 3dCTM reproduzierbar sind. In diesem Zusammenhang werden auch die AIMOS-Ionisationsraten validiert, welche den Einfluss präzipitierender Teilchen im 3dCTM repräsentieren. Daher wurden hier die Untersuchungen aus Kap. 7 auf Spurengase ( $O_3$ ,  $O(^1D)$ , NO,  $NO_2$ ,  $H_2O$ , H, OH,  $HO_2$ ) und deren Familien ( $O_x$ ,  $NO_x$ ,  $HO_x$ ) ausgeweitet, welche für den Ozonabbau in der MLT relevant sein können. Hierfür erfolgte eine Analyse der 3dCTM\_MLT-Läufe (s. Tab. 4.2, Kap. 4.2) für Januar 2002-August 2008 in  $55^\circ$ - $75^\circ$  geomagnetischer Breite zwischen 60 und 133 km Höhe. Im weiteren Verlauf wurde das 27-Tage-Signal auch hinsichtlich einer Beeinflussung durch Fotoionisation, den 11-jährigen solaren Zyklus und der atmosphärischen Dynamik untersucht. Letztlich werden die Modellresultate mit den Aura/MLS-Beobachtungen aus dem vorangegangenen Kap. 7 verglichen [Fytterer et al., 2015b] und mit weiteren Messergebnissen aus der Fachliteratur [Andersson et al., 2014; Hendrickx et al., 2015; Sinnhuber et al., 2016] validiert. Bei den dargestellten Spurengasvariationen in diesem Kapitel handelt es sich um die MLT\_Spurengasamplituden (Gl. 5, Kap. 5.2.1). Ähnlich wie in Kap. 7 wird aber auch hier zur Gewährleistung der Lesbarkeit auf das Präfix „MLT“ im Text verzichtet. Die Ergebnisse in diesem Kap. 8 sind in Fytterer et al. [2016, unter Begutachtung] nachzulesen.

### **8.1 Das 27-Tage-Signal in Ionisationsraten**

Das 27-Tage-Signal in Ap weist für den Modellzeitraum von Januar 2002 bis August 2008 eine grundsätzliche Übereinstimmung mit den Ergebnissen in Abb. 7.1a auf (hier nicht gezeigt). So ist die Signatur ebenfalls um den Ereignistag zentriert, wobei alle drei Maxima das 95% Signifikanzniveau überschreiten. Einziger wesentlicher Unterschied sind die deutlich höheren Werte des Hauptmaximums von  $39 \times 2$  nT im SHW/NHS und  $28 \times 2$  nT im NHW/SHS. Im 3dCTM wird der Einfluss präzipitierender Teilchen aber nicht durch den Ap, sondern mit Hilfe der AIMOS-Ionisationsraten abgeschätzt. Die zugehörigen SEA-Ergebnisse für die AIMOS-Ionisationsraten auf Grund von Elektronen sind in Abb. 8.1 zu sehen. Diese weisen

## 8. Modellstudie des 27-Tage-Signals in Spurengasen

keine Unterschiede hinsichtlich ihrer grundsätzlichen Struktur im Vergleich zu den Ionisationsraten von Protonen und Alpha-Teilchen auf. Allerdings verursachen Elektronen um 2-3 Größenordnungen höhere Ionisationsraten als die Protonen und Alpha-Teilchen (hier nicht gezeigt), was zum Teil durch die Filterung der SPEs bedingt ist. Die SEA-Ergebnisse der Ionisationsraten für Elektronen (hier im weiteren Verlauf nur als Ionisationsraten bezeichnet) zeigen in beiden Hemisphären und Jahreszeiten ein ausgeprägtes 27-Tage-Signal. Dieses ist in Phase mit der Ap-Signatur und erreicht in ca. 115 km Höhe die höchsten Werte, welche am Ereignistag in Abhängigkeit von Hemisphäre und Jahreszeit zwischen  $1300$  und  $1900 \text{ cm}^{-3} \text{ s}^{-1}$



**Abbildung 8.1.** Überlagerte Epochenanalyse für die AIMOS-Ionisationsraten auf Grund von Elektronen für Januar 2002-August 2008 in  $55^{\circ}$ - $75^{\circ}$  geomagnetischer Breite im a) NHS, b) NHW, c) SHS und d) SHW. Schraffierte Regionen zeigen Werte oberhalb des 99% Signifikanzniveaus auf Basis eines studentschen t-tests. Zu beachten ist die nicht lineare Skalierung [adaptiert von Fyterer et al., 2016, unter Begutachtung].

## 8. Modellstudie des 27-Tage-Signals in Spurengasen

liegen. Weiterhin beschränken sich die direkten Auswirkungen der Elektronen (Ionisationsraten  $>100 \text{ cm}^{-3} \text{ s}^{-1}$ ) im Wesentlichen auf den Höhenbereich oberhalb von 90 km, was in etwa mit der unteren Grenze des Kernbereichs der Auroraregion übereinstimmt (s. Kap. 2.2.2). Allerdings dringen die Elektronen vor allem an Tag 0 vereinzelt auch bis in 60 km vor. Oberhalb von 80-85 km überschreiten sowohl das Hauptmaximum als auch die Nebenmaxima das 99% Signifikanzniveau. Die Ionisationsraten weisen im SHW/NHS höhere Werte auf als im NHW/SHS und sind daher konsistent mit dem Signal in Ap. Da Phase und Tendenz des 27-Tage-Signals in Ap mit der entsprechenden Signatur in den AIMOS-Ionisationsraten übereinstimmt, ist auch das 3dCTM zur Analyse der 27-Tage-Signatur in atmosphärischen Spurengasen geeignet. Eine Skalierung der Maxima der AIMOS-Ionisationsraten mit den zugehörigen Maxima in Ap ist aber nicht ratsam, weil ein linearer Zusammenhang nicht vorausgesetzt werden kann.

### 8.2 Isolierter Teilcheneinfluss auf atmosphärische Spurengase

Die Spurengasamplituden wurden individuell für die Simulationen mit präzipitierenden Teilchen (MLT\_PT-Lauf) und dem zugehörigen Referenzlauf (MLT\_Base-Lauf) berechnet. Anschließend erfolgte die Subtraktion der Amplituden des MLT\_Base-Laufs von den zugehörigen Amplituden des MLT\_PT-Laufs. Die erhaltene Differenz repräsentiert somit den isolierten Teilcheneinfluss auf die Spurengase, welcher in diesem Kap. 8.2 untersucht wird. Auf Grund der Bildung der Differenz zwischen den beiden 3dCTM-Simulationen wurde aber auch die Variabilität des Spurengashintergrundes herausgerechnet. Dieser ist aber für die Abschätzung der Signifikanz notwendig (s. Kap. 5.3), weshalb in diesem Kapitel kein Signifikanzniveau angegeben ist. Bei den Strukturen, die der Signatur in Ap bzw. den AIMOS-Ionisationsraten hinsichtlich Form und Phase stark ähneln, ist ein Zusammenhang zu präzipitierenden Teilchen allerdings sehr wahrscheinlich.

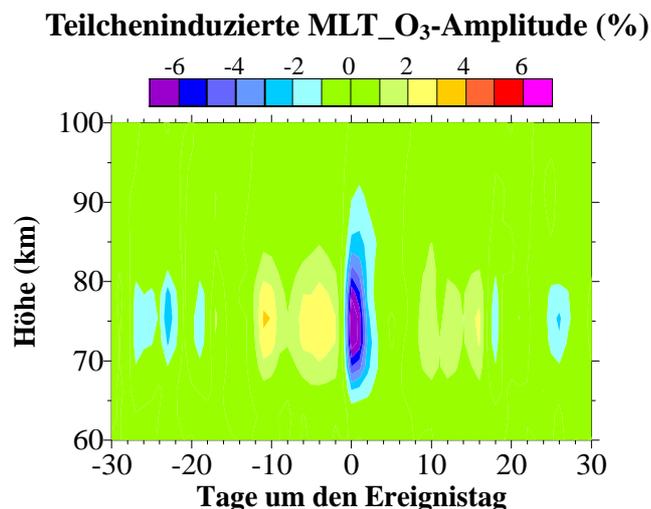
#### 8.2.1 Sauerstoffverbindungen

Abbildung 8.2 zeigt die simulierten nächtlichen  $\text{O}_3$ -Amplituden auf Grund geomagnetischer Aktivität im SHW, wobei das erkennbare 27-Tage-Signal in 70-80 km in Phase mit den Ionisationsraten ist. Allerdings weisen die Amplituden am Tag 0 und +1 meist ähnlich Werte auf. Ursache hierfür ist, dass der Ozonabbau nicht direkt durch die einfallenden Teilchen, sondern vorrangig durch  $\text{HO}_x$ -Verbindungen erfolgt. Diese haben chemische Lebensdauern

## 8. Modellstudie des 27-Tage-Signals in Spurengasen

von einigen Stunden bis zu einem Tag, wodurch der Ozonverlust zeitlich verzögert einsetzt. Die höchsten  $O_3$ -Amplituden treten in 70-75 km Höhe auf. Im Vergleich zu den Ionisationsraten in dieser Höhe ist der Teilcheneinfluss in  $O_3$  noch bis zu 3 Tage nach dem Maximum zu sehen, was auf die Lebensdauer von  $O_3$  von einigen Tagen zurückgeht.

Hervorzuheben ist, dass die Muster in  $O_3$  in beiden Hemisphären und Jahreszeiten grundsätzlich ähnliche Strukturen aufweisen. In Übereinstimmung mit den Ionisationsraten sind diese im SHW/NHS stärker ausgeprägt als im NHW/SHS. Für die Stärke der teilcheninduzierten  $O_3$ -Amplitude spielt aber auch die Verfügbarkeit an solarer UV Strahlung eine Rolle. So kommt es im Sommer zur erhöhten Fotolyse von  $O_2$ , was dem teilcheninduzierten Ozonabbau entgegen wirkt. Folglich weisen die  $O_3$ -Amplituden im SHW die höchsten und im SHS die niedrigsten Werte auf. Dahingegen kommt es in der NH zu einer teilweisen Kompensierung dieser Effekte, weshalb die saisonalen Unterschiede im Vergleich zur SH geringer ausfallen. Anzumerken ist, dass  $O_3$  die höchsten Verluste im NHW erst am Tag +1 erreicht und diese auch in größeren Höhen (80-85 km) auftreten. Die hier präsentierten Strukturen in  $O_3$  gelten grundsätzlich auch für  $O(^1D)$  und  $O_x$ , weshalb auf eine Darstellung verzichtet wurde. Für alle Sauerstoffverbindungen ( $O_3$ ,  $O(^1D)$ ,  $O_x$ ) liegt der Abbau im SHS bei etwa 1% und schwankt in der NH zwischen 2% und 5%. Im SHW werden dagegen Amplituden mit Werten von -9% ( $O_3$ ), -8% ( $O(^1D)$ ) und -7% ( $O_x$ ) erreicht.

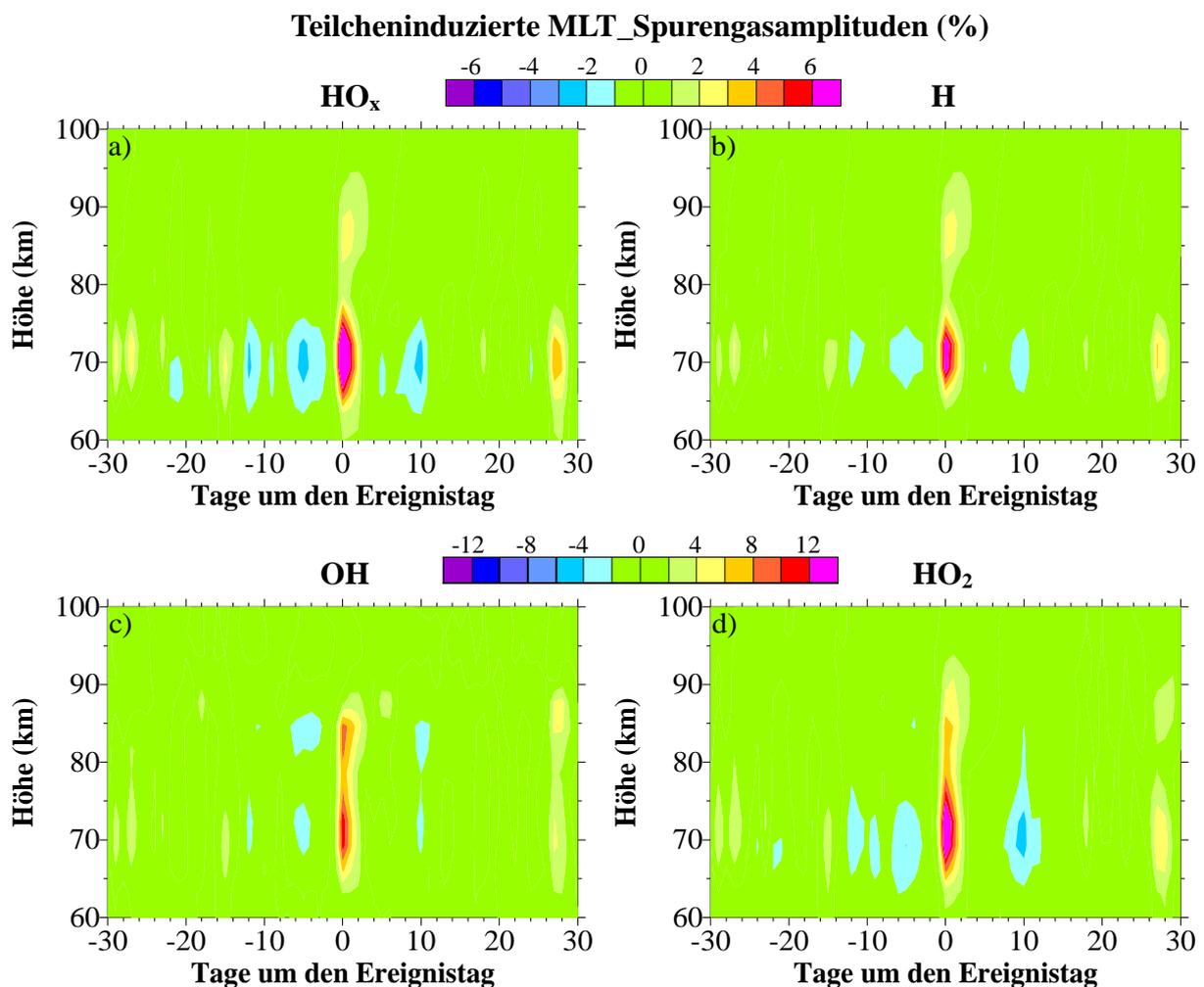


**Abbildung 8.2.** Teilcheninduzierte MLT\_ $O_3$ -Amplitude im SHW auf Basis der 3dCTM-Simulationen von Januar 2002 bis August 2008 in  $55^\circ$ - $75^\circ$  geomagnetischer Breite. Die Amplituden basieren auf der Differenz der Ergebnisse einer überlagerten Epochenanalyse des MLT\_PT-Laufs und des zugehörigen MLT\_Base-Laufs [adaptiert von Fytterer et al., 2016, unter Begutachtung].

## 8. Modellstudie des 27-Tage-Signals in Spurengasen

### 8.2.2 Wasserstoffverbindungen

Wie bei  $O_3$  sind auch die wesentlichen teilcheninduzierten Muster in  $HO_x$ , H, OH,  $HO_2$ ,  $H_2O$  und  $H_2$  unabhängig von Hemisphäre und Jahreszeit. Daher sind in Abb. 8.3 nur die nächtlichen Amplituden im SHW dargestellt, wo erneut die höchsten Werte auftreten. Präzipitierende Teilchen führen in Übereinstimmung mit der Theorie (s. Kap. 2.3.1) zur Bildung von  $HO_x$  (Abb. 8.3a-d). Die entsprechende 27-Tage-Signatur ist in den  $HO_x$ -Verbindungen zwischen 65 und 75 km zu sehen und phasengleich zum Signal in den



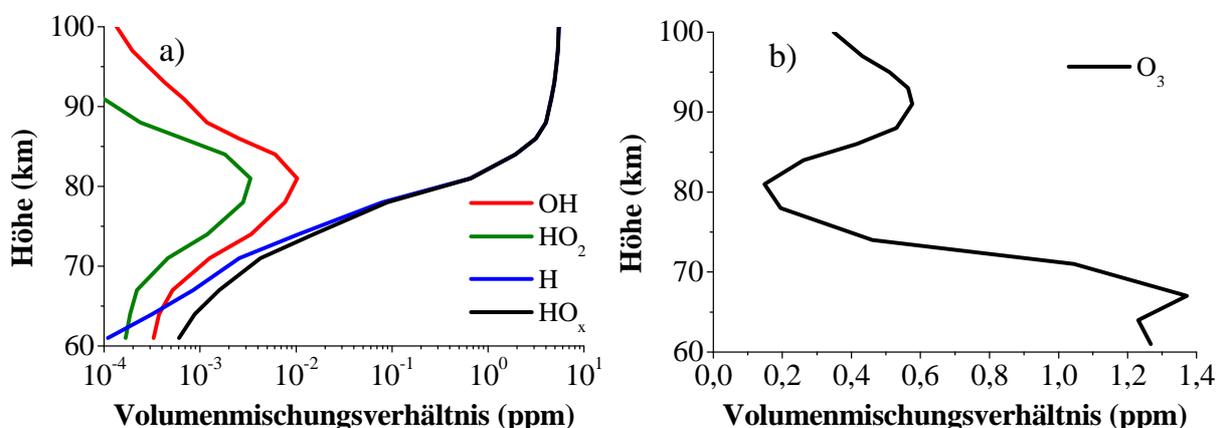
**Abbildung 8.3.** Teilcheninduzierte MLT\_Spurgasamplituden im SHW auf Basis der 3dCTM-Simulationen von Januar 2002 bis August 2008 in  $55^\circ$ - $75^\circ$  geomagnetischer Breite für a)  $HO_x$ , b) H, c) OH und d)  $HO_2$ . Die Amplituden basieren auf der Differenz der Ergebnisse einer überlagerten Epochenanalyse des MLT\_PT-Laufs und des zugehörigen MLT\_Base-Laufs. Zu beachten ist die unterschiedliche Skalierung der Amplitudenintervalle [adaptiert von Fyterer et al., 2016, unter Begutachtung].

## 8. Modellstudie des 27-Tage-Signals in Spurengasen

Ionisationsraten. Die Amplituden erreichen in 70-75 km am Ereignistag Werte von etwa 12% ( $\text{HO}_x$ ), 9% (H), 14% (OH) und 19% ( $\text{HO}_2$ ). Zwar weisen alle  $\text{HO}_x$ -Verbindungen am Ereignistag ein zweites Maximum in ca. 85 km auf. Allerdings ist dort nur in OH und  $\text{HO}_2$  ein schwaches 27-Tage-Signal angedeutet. Die Strukturen in  $\text{HO}_x$  und H sind sehr ähnlich, da H in Höhen  $>65$  km der dominierende Bestandteil von  $\text{HO}_x$  ist (vgl. Abb. 8.4a). Die Übereinstimmung in den Mustern von OH und  $\text{HO}_2$  liegt indes daran, dass beide Spurengase an ähnlichen Reaktionen beteiligt sind, welche schnell zu einem chemischen Gleichgewicht zwischen OH und  $\text{HO}_2$  führen.

In Analogie zu  $\text{O}_3$  sind die Amplituden der  $\text{HO}_x$ -Verbindungen im SHS vernachlässigbar gering ( $\approx 1\%$ ), was mit einer hohen saisonalen Variabilität einhergeht. Die Schwankungen in der NH sind ebenfalls wesentlich schwächer ausgeprägt, wobei die Amplituden zwischen 1% und 3% ( $\text{HO}_x$ , H) sowie von 2% bis 5% (OH,  $\text{HO}_2$ ) variieren. Die maximale  $\text{HO}_x$ -Erhöhung in 70-75 km um den Ereignistag fällt zeitlich und räumlich mit dem höchsten Ozonabbau zusammen, was einen direkten chemischen Zusammenhang nahelegt. Allerdings sind die stärksten  $\text{HO}_x$ -Amplituden im Gegensatz zu  $\text{O}_3$  auf den Ereignistag beschränkt, was eine leichte Verzögerung des katalytisch induzierten Ozonabbaus durch  $\text{HO}_x$  im 3dCTM impliziert. Das Hauptmaximum in 85 km ist in Abhängigkeit von Jahreszeit, Hemisphäre und  $\text{HO}_x$ -Komponente um den Faktor 2-5 schwächer als in 70-75 km. Dennoch überlagern sich auch hier die Zunahmen der  $\text{HO}_x$ -Verbindungen mit Ozonverlusten.

Die Abschwächung der teilcheninduzierten  $\text{HO}_x$ - und  $\text{O}_3$ -Amplituden lässt sich mit den erheblich höheren Hintergrundkonzentrationen in 85 km begründen (Abb. 8.4). So zeigen die

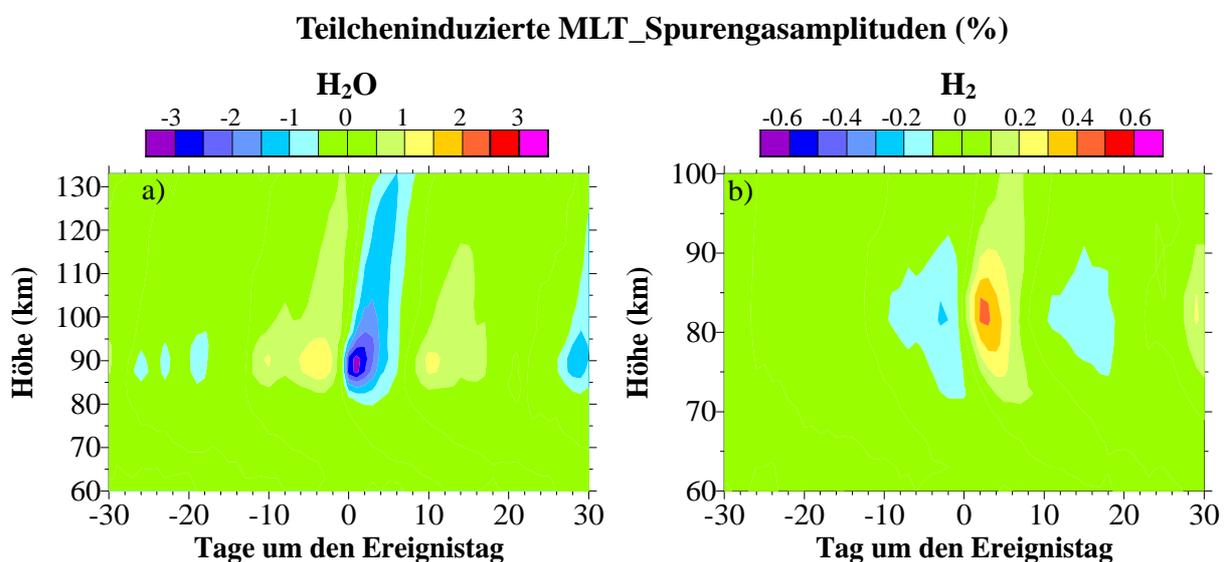


**Abbildung 8.4.** Vertikalprofile der Volumenmischungsverhältnisse im SHW für a)  $\text{HO}_x$ -Verbindungen und b)  $\text{O}_3$  des 3dCTM-MLT\_PT-Laufs für Januar 2002-August 2008.

## 8. Modellstudie des 27-Tage-Signals in Spurengasen

zugehörigen Vertikalprofile der HO<sub>x</sub>-Verbindungen und O<sub>3</sub> des 3dCTM-MLT\_PT-Laufs im SHW, dass bei der Betrachtung absoluter Spurengasänderungen (Spurengas – 27-Tage-Spurengasmittel) das obere Maximum sowohl in den HO<sub>x</sub>-Komponenten als auch in O<sub>3</sub> dominiert. Des Weiteren relativieren die Hintergrundprofile auch die höheren OH- und HO<sub>2</sub>-Amplituden im Vergleich zu den H- und HO<sub>x</sub>-Amplituden.

Die teilcheninduzierten Strukturen in H<sub>2</sub>O durch präzipitierende Teilchen im SHW sind in Abb. 8.5a dargestellt. Die maximale H<sub>2</sub>O-Amplitude von -3% tritt in 85-95 km auf, wo sie bzgl. der Ionisationsraten um einen Tag verzögert ist. Das 27-Tage-Signal ist hier aber nur schwach zu erkennen ist. In Höhen >90 km verschiebt sich das Maximum auf die Tage 2-8. Im nächtlichen H<sub>2</sub> sind teilcheninduzierte Variationen ebenfalls im SHW erkennbar (Abb. 8.5b), wobei die zugehörigen Amplituden mit Werten von <0,5% sehr schwach ausfallen. Das 27-Tage-Signal kann in 75-90 km nur erahnt werden und ist bzgl. des Signals in den Ionisationsraten um +2 bis +3 Tage verschoben. Im Vergleich zu H<sub>2</sub>O ist in H<sub>2</sub> sowohl oberhalb als auch unterhalb des Hauptmaximums in 80-85 km eine zeitliche Verspätung der H<sub>2</sub>-Zunahme ersichtlich.

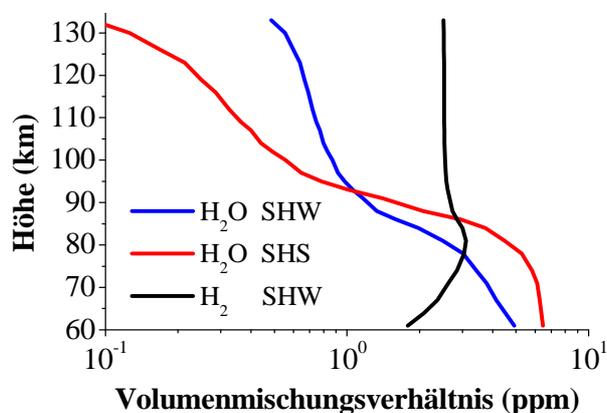


**Abbildung 8.5.** Teilcheninduzierte MLT\_Spurengasamplitude im SHW auf Basis der 3dCTM-Simulationen von Januar 2002 bis August 2008 in 55°-75° geomagnetischer Breite für a) H<sub>2</sub>O und b) H<sub>2</sub>. Die Amplituden basieren auf der Differenz der Ergebnisse einer überlagerten Epochenanalyse des MLT\_PT-Laufs und des zugehörigen MLT\_Base-Laufs. Zu beachten ist die unterschiedliche Skalierung der Amplitudenintervalle und der y-Achsen [adaptiert von Fyterer et al., 2016, unter Begutachtung].

## 8. Modellstudie des 27-Tage-Signals in Spurengasen

Die wesentlichen Strukturen in  $\text{H}_2\text{O}$  und  $\text{H}_2$  sind konsistent mit den Ionisationsraten und zeigen folglich die größten Amplituden im SHW. Außerdem steht das Verhalten im SHW repräsentativ für beide Hemisphären und Jahreszeiten. Ausgehend von den theoretischen Betrachtungen in Kap. 2.3.1 dienen sowohl  $\text{H}_2\text{O}$  als auch  $\text{H}_2$  als Reservoirgas für  $\text{HO}_x$ . Dennoch verursacht der Einfluss präzipitierender Teilchen nur in  $\text{H}_2\text{O}$  einen Abbau, während es in  $\text{H}_2$  zu einer Erhöhung kommt. Dies lässt sich damit erklären, dass  $\text{H}_2\text{O}$  in Ionen gebunden und später als  $\text{HO}_x$  wieder freigesetzt wird (R. 3-6b, Kap. 2.3.1). Als Nebenprodukt dieser Reaktion kann sich auch  $\text{H}_2$  bilden, indem das neu entstandene H z. B. mit sich selbst oder mit  $\text{HO}_2$  reagiert. Daher führt der Nettoeffekt präzipitierender Teilchen zu einer Anreicherung von  $\text{H}_2$ .

Die zeitliche Verspätung der  $\text{H}_2\text{O}$ -Amplituden oberhalb des Maximums in ca. 90 km ist in beiden Hemisphären und Jahreszeiten zu sehen und geht vermutlich auf Transportvorgänge zurück. Allerdings unterstützt die Hintergrundzirkulation in der unteren Thermosphäre nur im polaren Winter eine aufwärtsgerichtete Luftbewegung, wohingegen im polaren Sommer ein abwärts gerichteter Hintergrundwind vorherrscht (s. Kap. 3.2). Hierbei muss aber berücksichtigt werden, dass der Spurengastransport in diesen Höhen bereits zu einem wesentlich Anteil auf Diffusion zurückgeht. Zur genaueren Analyse ist dafür in Abb. 8.6 das  $\text{H}_2\text{O}$  vmr in der SH dargestellt, was repräsentativ für beide Hemisphären steht. Zwar werden Richtung und Geschwindigkeit der Diffusion über die absolute Menge an  $\text{H}_2\text{O}$  (=Konzentration) bestimmt. Da die Konzentration aber  $\sim \text{vmr} \cdot \text{Luftdruck}$  ist, wird aus Abb. 8.6 dennoch ersichtlich, dass die Diffusion eine aufwärtsgerichtete Bewegung das gesamte Jahr hindurch induzieren kann. Dieser Aufwärtstransport ist aber nur in Kombination mit der chemische Lebensdauer von einigen Tagen zu erkennen. Außerdem muss das vmr mit



**Abbildung 8.6.** Vertikalprofile der Volumenmischungsverhältnisse für  $\text{H}_2\text{O}$  und  $\text{H}_2$  auf Basis des 3dCTM-MLT\_PT-Laufs von Januar 2002 bis August 2008.

## 8. Modellstudie des 27-Tage-Signals in Spurengasen

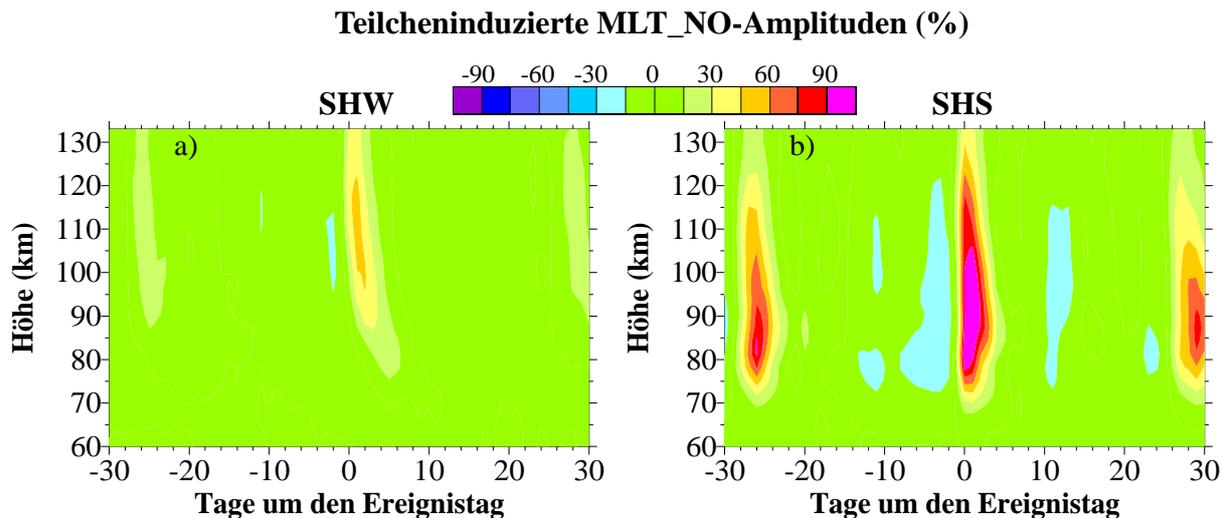
der Höhe abnehmen, weil die hier betrachteten Amplituden relative Abweichungen vom Hintergrund darstellen (s. Gl. 5, Kap. 5.2.1). Folglich verschwindet die Amplitude sobald sie sich in Regionen mit erheblich höheren Hintergrundkonzentrationen ausbreitet, wodurch auch keine Abwärtsbewegung der  $\text{H}_2\text{O}$ -Amplitude in die Mesosphäre im polaren Winter sichtbar ist. Im Prinzip könnte es sich bei der nach oben wandernden Struktur auch um zwei separate Maxima handeln, die fließend ineinander übergehen. Dagegen spricht allerdings, dass die  $\text{H}_2\text{O}$ -Amplitude nach oben schwächer wird. Da das Maximum der Ionisationsraten in 115 km liegt (vgl. Abb. 8.1) und der  $\text{H}_2\text{O}$ -Hintergrund mit steigender Höhe abnimmt (Abb. 8.6), müssten die entsprechenden  $\text{H}_2\text{O}$ -Amplituden in diesem Fall mit der Höhe zunehmen. Im Vergleich zu  $\text{H}_2\text{O}$  ist für  $\text{H}_2$  im SHW sowohl eine aufwärts als auch eine abwärts gerichtete Transport zu sehen, was ebenfalls auf das Hintergrundprofil zurückzuführen ist (Abb. 8.6).

Die generell schwachen Auswirkungen präzipitierender Teilchen auf die  $\text{H}_2\text{O}$  und  $\text{H}_2$  im Sommer lassen sich wie bei  $\text{O}_3$  und den  $\text{HO}_x$ -Verbindungen erneut mit dem starken Einfluss der solaren UV Strahlung begründen. Dadurch kommt es zur erhöhten Fotolyse von  $\text{H}_2\text{O}$ , welche die teilcheninduzierten Variationen im Sommer überlagert. In allen Wasserstoffverbindungen erweist sich die Stärke der Amplituden als konsistent, sodass ein höherer  $\text{H}_2\text{O}$ -Verlust mit größeren Amplituden in  $\text{H}_2$  und den  $\text{HO}_x$ -Komponenten einhergeht. Allerdings stimmen  $\text{H}_2\text{O}$ -Abbau und  $\text{HO}_x$ -Bildung räumlich und zeitlich nur in 85 km überein, was nur dort einen direkten Zusammenhang unterstützt. Dahingegen ist der erforderliche  $\text{H}_2\text{O}$ -Verlust in 70-75 km vermutlich deshalb nicht ersichtlich, da der  $\text{H}_2\text{O}$ -Hintergrund hier um 2-3 Größenordnungen über dem der  $\text{HO}_x$ -Komponenten liegt (vgl. Abb. 8.4 und 8.6). Demnach reichen bereits kleinere, nicht zu erkennende, Änderungen im  $\text{H}_2\text{O}$ -Hintergrund aus, um eine sichtbare  $\text{HO}_x$ -Erhöhung herbeizuführen.

### 8.2.3 Stickstoffverbindungen

In Abb. 8.7 sind die teilcheninduzierten Amplituden für  $\text{NO}$  in der SH zu sehen, deren wesentliche Muster mit denen in der NH übereinstimmen (hier nicht gezeigt). In nächtlichen  $\text{NO}$  ist im SHW (Abb. 8.7a) in Höhen  $>90$  km eine deutliche 27-Tage-Signatur ersichtlich. Diese liegt oberhalb von 110-120 km in Phase mit dem zugehörigen Signal in den Ionisationsraten. In tieferen Höhen verzögert sich die maximale  $\text{NO}$ -Erhöhung aber um mehrere Tage, wodurch es letztlich zur Ausbildung einer gebogenen Struktur in 80-95 km kommt. Die größten Amplituden ( $\approx 50\%$ ) sind knapp unterhalb von 110 km zu finden und stimmen somit räumlich ungefähr mit den höchsten Ionisationsraten überein. Das Auftreten

## 8. Modellstudie des 27-Tage-Signals in Spurengasen



**Abbildung 8.7.** Teilcheninduzierte MLT\_NO-Amplitude im a) SHW und b) SHS auf Basis der 3dCTM-Simulationen von Januar 2002 bis August 2008 in  $55^{\circ}$ - $75^{\circ}$  geomagnetischer Breite. Die Amplituden basieren auf der Differenz der Ergebnisse einer überlagerten Epochenanalyse des MLT\_PT-Laufs und des zugehörigen MLT\_Base-Laufs [adaptiert von Fytterer et al., 2016, unter Begutachtung].

der stärksten NO-Zunahme einen Tag nach dem Ereignistag ist auf einen Akkumulierungseffekt zurückzuführen.

Die NO-Amplituden im SHS (Abb. 8.7b) weisen ebenfalls ein ausgeprägtes 27-Tage-Signal zwischen 70 und 130 km auf. Die Signatur ist oberhalb von 105 km in Phase mit den Ionisationsraten. In tieferen atmosphärischen Schichten verzögert sich das Hauptmaximum um einen Tag, obwohl die chemische Lebensdauer von NO in der sommerlichen MLT bei unter einem Tag liegt. Zu beachten ist, dass das 3dCTM nur einen Schnappschuss der Atmosphäre um 0 UTC und damit kein echtes Tagesmittel bereitstellt. Demnach kann es im Modell zu einem Akkumulierungseffekt und folglich höheren Werten am Tag +1 kommen. Das Hauptmaximum tritt in ca. 95 km ( $\approx 120\%$ ) auf und bleibt für 3-4 Tage bestehen bevor es wieder im Hintergrund verschwindet.

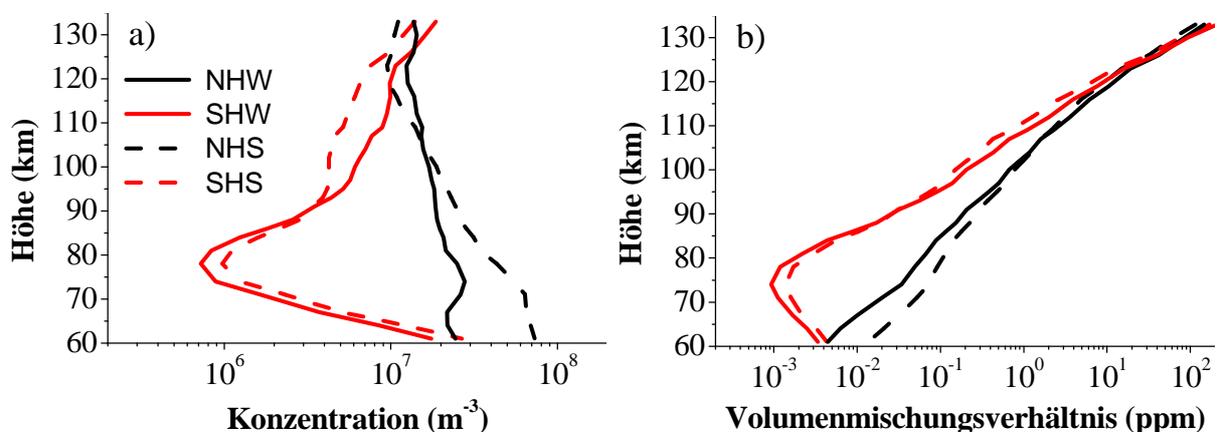
Da NO im 3dCTM in Übereinstimmung mit Brasseur und Solomon [2005, Anhang 6] bei weitem den größten Anteil an  $\text{NO}_x$  oberhalb von 70 km ausmacht, liegt eine hohe qualitative Ähnlichkeit zu den Ergebnissen von  $\text{NO}_x$  in beiden Hemisphäre und Jahreszeiten vor (hier nicht gezeigt). In den  $\text{NO}_2$ -Amplituden ist im Sommer ebenfalls ein 27-Tage-Signal in 80-100 km zu erkennen, wobei das Maximum in 90 km mit Amplituden von etwa 125% (NH) und 90% (SH) ähnlich stark wie in NO ausfällt. Der Teilcheneinfluss auf  $\text{NO}_2$  wird aber hier

## 8. Modellstudie des 27-Tage-Signals in Spurengasen

nicht weiter untersucht, da der  $\text{NO}_2$ -Hintergrund oberhalb von 70 km deutlich weniger als 10% vom  $\text{NO}_x$ -Hintergrund beiträgt. Die damit verbundenen Auswirkungen auf die Chemie sind daher im Vergleich zu  $\text{NO}$  zu gering. Weiterhin ist die  $\text{NO}_2$ -Amplitude dahingehend kritisch zu betrachten, dass bei der Berechnung der Amplitude durch den sehr geringen  $\text{NO}_2$ -Hintergrund dividiert wurde (s. Gl. 5, Kap. 5.2.1). Somit kann ein wesentlicher Anteil der Amplitude auch durch Hintergrundrauschen zustande kommen.

Die Ausbildung der gebogenen Struktur von  $\text{NO}$  im SHW in der MLT geht hauptsächlich auf die nach unten gerichtete Hintergrundzirkulation zurück (s. Kap. 3.2). In der unteren Thermosphäre spielt allerdings auch Diffusion eine Rolle, was aus den Vertikalprofilen der  $\text{NO}$ -Konzentration hervor geht (Abb. 8.8a). Eine mögliche Aufwärtsbewegung der  $\text{NO}$ -Amplituden ist das gesamte Jahr hindurch in beiden Hemisphären nicht zu sehen. Ursache hierfür ist der exponentiell mit der Höhe zunehmende  $\text{NO}$ -Hintergrund (Abb. 8.8b), wodurch eine aufwärts wandernde Amplitude im Hintergrund verschwindet. Die gebogene Struktur könnte zwar im Prinzip auch aus einem verzögerten Teilcheneinfluss resultieren. Dies ist aber auf Grund ihrer Beschränkung auf die Winterhemisphäre nicht sehr wahrscheinlich.

Die maximalen Amplituden treten im Winter im Vergleich zum Sommer in deutlich größeren Höhenbereichen auf, was hauptsächlich an den unterschiedlichen Vertikalprofilen des  $\text{NO}$  vmr in beiden Jahreszeiten liegt (Abb. 8.8b). So ist der  $\text{NO}$ -Hintergrund unterhalb von 120 km im Winter deutlich höher als im Sommer, was mit einer Dämpfung der winterlichen Amplituden einhergeht. Im Zusammenhang mit dem abwärts gerichteten Transport von  $\text{NO}$ ,



**Abbildung 8.8.** Vertikalprofile der a)  $\text{NO}$ -Konzentration und des b)  $\text{NO}$ -Volumenmischungsverhältnisses auf Basis des 3dCTM-MLT\_PT-Laufs von Januar 2002 bis August 2008.

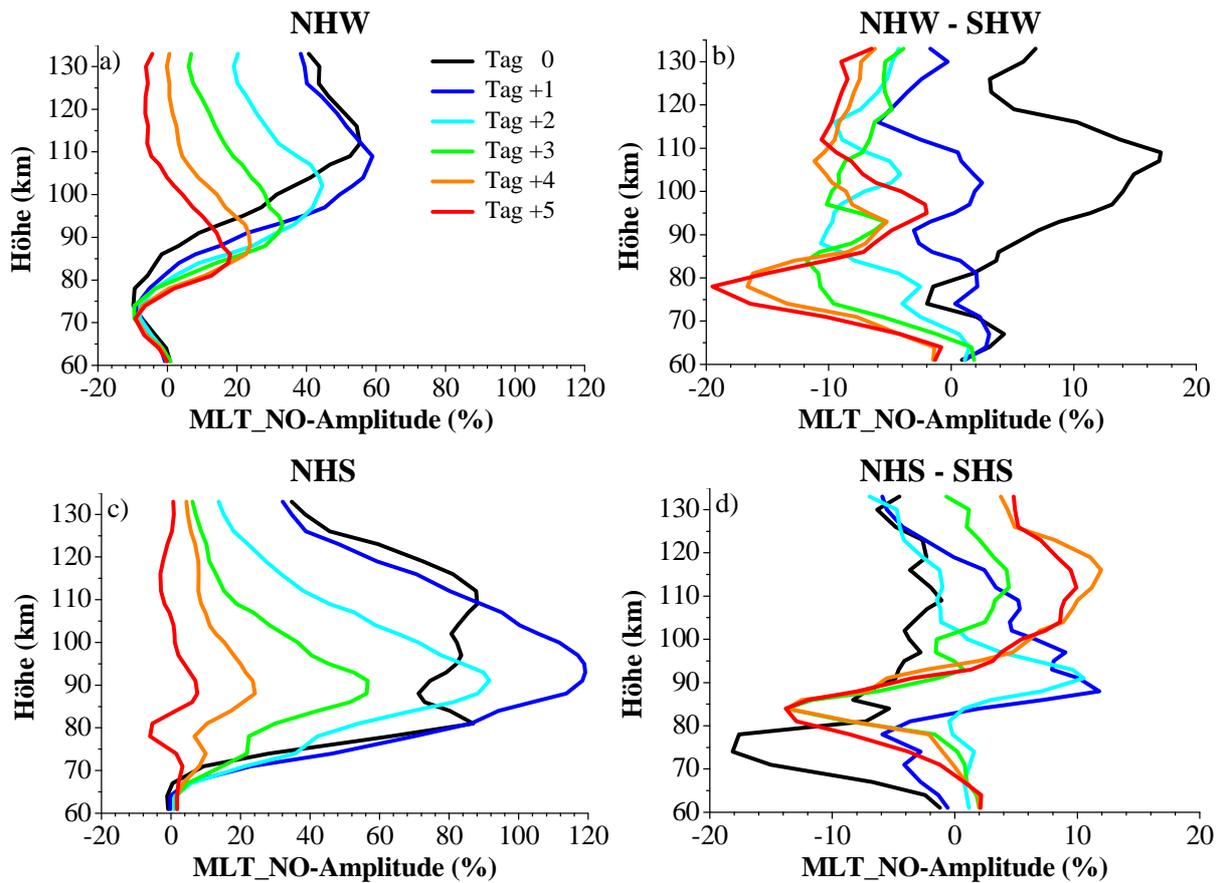
## 8. Modellstudie des 27-Tage-Signals in Spurengasen

kommt der teilcheninduzierten NO-Bildung im Winter eine erheblich größere Bedeutung zu. Diese führt, wie in Kap. 6 ausführlich beschrieben, letztlich zum indirekten Teilcheneffekt. Neben den saisonalen Unterschieden existieren auch hemisphärische Abweichungen. Allerdings zeigen sich diese nur im Winter, wenn die Amplituden auf der NH um ca. 5% höhere Werte aufweisen als in der SH. Der nicht vorhandene Unterschied im Sommer und die höheren Amplituden im NHW sind allerdings nicht konsistent mit der Stärke der Ionisationsraten. Die zu erwartenden größeren NO-Amplituden im SHW/NHS im Vergleich zum NHW/SHS lassen sich zudem nicht auf den NO-Hintergrund zurückführen. Demnach muss mindestens ein weiterer Parameter für die NO-Bildung eine Rolle spielen, worauf in den nächsten beiden Abschnitten näher eingegangen wird.

Um die zeitliche Entwicklung der teilcheninduzierten NO-Erhöhung genauer zu analysieren, sind die Höhenprofile der NO-Amplituden der Tage 0 bis +5 für die NH und deren Differenz zur SH in Abb. 8.9 dargestellt. Im NHW (Abb. 8.9a) führen präzipitierende Teilchen vorrangig in Höhen >90 km ohne zeitlich Verzögerung zur Bildung von NO. Die höchsten Auswirkungen treten in ca. 110 km an Tag +1 auf. Diese grundsätzliche Profilform mit einem markanten Maximum bleibt bis Tag +5 erhalten, wobei sich das Maximum auf unter 20% abschwächt und auf Grund der Dynamik bis in 85 km herunter wandert. Relevante hemisphärische Unterschiede treten am Ereignistag in ca. 110 km und an den Tagen +4 und +5 in 70-80 km auf (Abb. 8.9b). So sind die NO-Amplituden im NHW am Ereignistag und am Tag +1 von ähnlicher Stärke, während im SHW für diesen Zeitraum eine wesentliche Zunahme zu sehen ist.

Außerdem sind die Amplituden im NHW generell etwas größer als im SHW, obwohl die Ergebnisse von den Ionisationsraten ein umgekehrtes Verhalten implizieren. Im 3dCTM basiert die eigentliche NO-Bildung aber auf der zugehörigen NO-Parametrisierung von Nieder et al. [2014], welche auch den vorherrschenden Zustand des atmosphärischen Hintergrunds berücksichtigt. Insbesondere die im NHW deutliche höhere Konzentration an  $O(^3P)$  führt hier zur Kompensation des schwächeren geomagnetischen Einflusses im Vergleich zum SHW. Die markanten Abweichungen zwischen NHW und SHW in 70-80 km am Tag +4 und +5 resultieren aus dem schnelleren Absinken des Hauptmaximums in niedrigere Höhen im SHW. Dies deutet auf einen stärkeren Abwärtstransport im antarktischen als im arktischen Polarwirbel hin. Allerdings beläuft sich der Höhenunterschied auf nur eine Modellhöhe und sollte daher nicht überbewertet werden.

## 8. Modellstudie des 27-Tage-Signals in Spurengasen



**Abbildung 8.9.** Höhenprofile der teilcheninduzierten MLT\_NO-Amplituden für Januar 2002-August 2008 in 55°-75° geomagnetischer Breite von Tag 0 bis Tag +5 im a) NHW und c) NHS. Die rechte Spalte zeigt die zugehörigen Differenzen zur SH. Die Amplituden basieren auf der Differenz der Ergebnisse einer überlagerten Epochenanalyse des MLT\_PT-Laufs und des zugehörigen MLT\_Base-Laufs des 3dCTMs [adaptiert von Fytterer et al., 2016, unter Begutachtung].

Im NHS (Abb. 8.9c) ist die Bildung von NO auf die Region >70 km beschränkt und der vertikale Verlauf der NO-Amplitude zeigt zwei Maxima ähnlicher Stärke (80-90%) in 95-110 km und 80-85 km. Am Folgetag verbinden sich diese beiden Maxima und erreichen in ca. 95 km etwa 120%. Das am Tag +1 zu sehende Vertikalprofil zeigt im weiteren zeitlichen Verlauf (Tage +2 bis +4) kaum Änderungen bzgl. seiner generellen Form, wobei die Amplituden kontinuierlich kleiner werden und am Tag +5 vollständig im Hintergrund verschwinden. Im Zeitraum von Tag +1 bis Tag +4 ist außerdem eine langsame Abwärtsbewegung des Hauptmaximums auf ca. 90 km zu erkennen. Im Gegensatz zum Winter liegt hier aber kein dynamisch bedingter Abwärtstransport von NO vor. Das Verhalten beruht vielmehr auf der längeren Lebensdauer von NO in niedrigeren Höhen. Die

## 8. Modellstudie des 27-Tage-Signals in Spurengasen

Unterschiede zum SHS (Abb. 8.9d) sind generell gering und schwanken zumeist zwischen -10% und +10%. Eine Ausnahme hiervon bildet die Region zwischen 70 und 80 km am Tag 0. Allerdings liegt hier durch die Zunahme der Amplitude von über 50% ein sehr scharfer vertikaler Gradient vor, weshalb die hemisphärischen Unterschiede nicht überinterpretiert werden sollten.

### 8.3 Einfluss der Fotoionisation und des 11-jährigen solaren Zyklus'

Die im vorangegangenen Kap. 8.2 dargestellten Ergebnisse zeigen, dass der isolierte Einfluss präzipitierender Teilchen in allen untersuchten Spurengasen zu erkennen ist. Allerdings sind die quantitativen Auswirkungen und das 27-Tage-Signal zum Teil nur sehr schwach ersichtlich. Weitere Vergleiche zwischen den 3dCTM-Simulationen mit (MLT\_PT+PI-Lauf) und ohne Fotoionisation (MLT\_PT-Lauf) zeigen vernachlässigbare Unterschiede auf das teilcheninduzierte 27-Tage-Signal in allen untersuchten Spurengasen. Diese Erkenntnisse gelten auch für die Läufe mit einem variablen solaren Sonnenspektrum (MLT\_PT+F, MLT\_PT+PI+F). Unterstützt werden diese Ergebnisse für die NO<sub>x</sub>-Verbindungen von Modelluntersuchungen von Nieder [2015, Abb. 4.4], wobei der Einfluss der Fotoionisation auf die NO<sub>x</sub>-Bildung in polaren Breiten der MLT sehr gering ist. Zwar kommt es auf Grund der Fotoionisation zur Entstehung zusätzlicher Ionen und damit auch zu einer Veränderung des Spurengashintergrunds (z. B. Erhöhung von NO). Allerdings können durch Fotodissoziation ebenfalls neutrale Komponenten entstehen, welche dem ursprünglichen Einfluss der Fotoionisation entgegenwirken. So trägt z. B. die Reaktion  $N(^4S) + NO \rightarrow N_2 + O$  substantiell zum Abbau von NO bei.

Zur Analyse der Auswirkungen des 11-jährigen solaren Zyklus' wurden die isolierten Spurengasamplituden auch auf Basis der Modellläufe mit einem variablen solaren Spektrum berechnet (MLT\_PT+F, MLT\_Base+F). Ein Vergleich der erhaltenen Spurengasamplituden mit den bisherigen Ergebnissen aus Kap. 8.2 offenbart einen solaren Einfluss auf die Amplitudenstärke, wohingegen die generellen Strukturen in den Spurengasen auf Grund präzipitierender Teilchen erhalten bleiben. Im Detail führt der 11-jährige solare Zyklus in NO im Sommer zu einer Erhöhung der Amplituden um etwa 5-8%, was einem Faktor von ungefähr 1,05 entspricht. Dahingegen werden die zugehörigen NO<sub>x</sub>-Amplituden um etwa denselben Faktor gedämpft. Somit nimmt das Verhältnis NO/NO<sub>x</sub> um etwa 0,5% ab, wobei die damit verbundenen eventuellen Auswirkungen auf die Chemie der MLT außerhalb des Rahmens dieser Arbeit liegen. Im Winter sind in NO und NO<sub>x</sub> hingegen keine relevanten

## 8. Modellstudie des 27-Tage-Signals in Spurengasen

Einflüsse des variablen Sonnenspektrums zu erkennen.

Die H<sub>2</sub>O-Amplituden werden in beiden Hemisphären und Jahreszeiten auf Grund der solaren Variabilität leicht abgeschwächt. In H<sub>2</sub> sind dagegen keine relevanten Änderungen zu sehen. Der Einfluss des 11-jährigen solaren Zyklus' verstärkt die Amplituden in HO<sub>x</sub> und dessen einzelnen Komponenten um etwa den Faktor 1,1. Die Unterschiede sind aber nur im Winter von Bedeutung, da die teilcheninduzierte HO<sub>x</sub>-Bildung im Sommer generell zu schwach ausgeprägt ist. Durch die Berücksichtigung des variablen solaren Spektrums nimmt auch der Anteil von OH und HO<sub>2</sub> an HO<sub>x</sub> um jeweils 1-2% zu, während das Verhältnis H/HO<sub>x</sub> im Gegenzug etwas geringer wird. In Übereinstimmung mit den Resultaten für HO<sub>x</sub>, zeigen auch die Sauerstoffverbindungen eine Amplitudenverstärkung im Winter um den Faktor 1,05. Die hier beschriebenen Amplitudenmodulationen der Spurengasse beruhen auf der Variation des zugehörigen Spurengashintergrunds. Die erhaltenen Modellergebnisse zeigen folglich einen nicht vernachlässigbaren Einfluss auf das geomagnetisch induzierte Signal in atmosphärischen Spurengasen, auch wenn das untersuchte Zeitintervall von Januar 2002 bis August 2008 keinen vollständigen 11-jährigen solaren Zyklus abdeckt.

### 8.4 Vergleich mit Beobachtungen und die Rolle der Dynamik

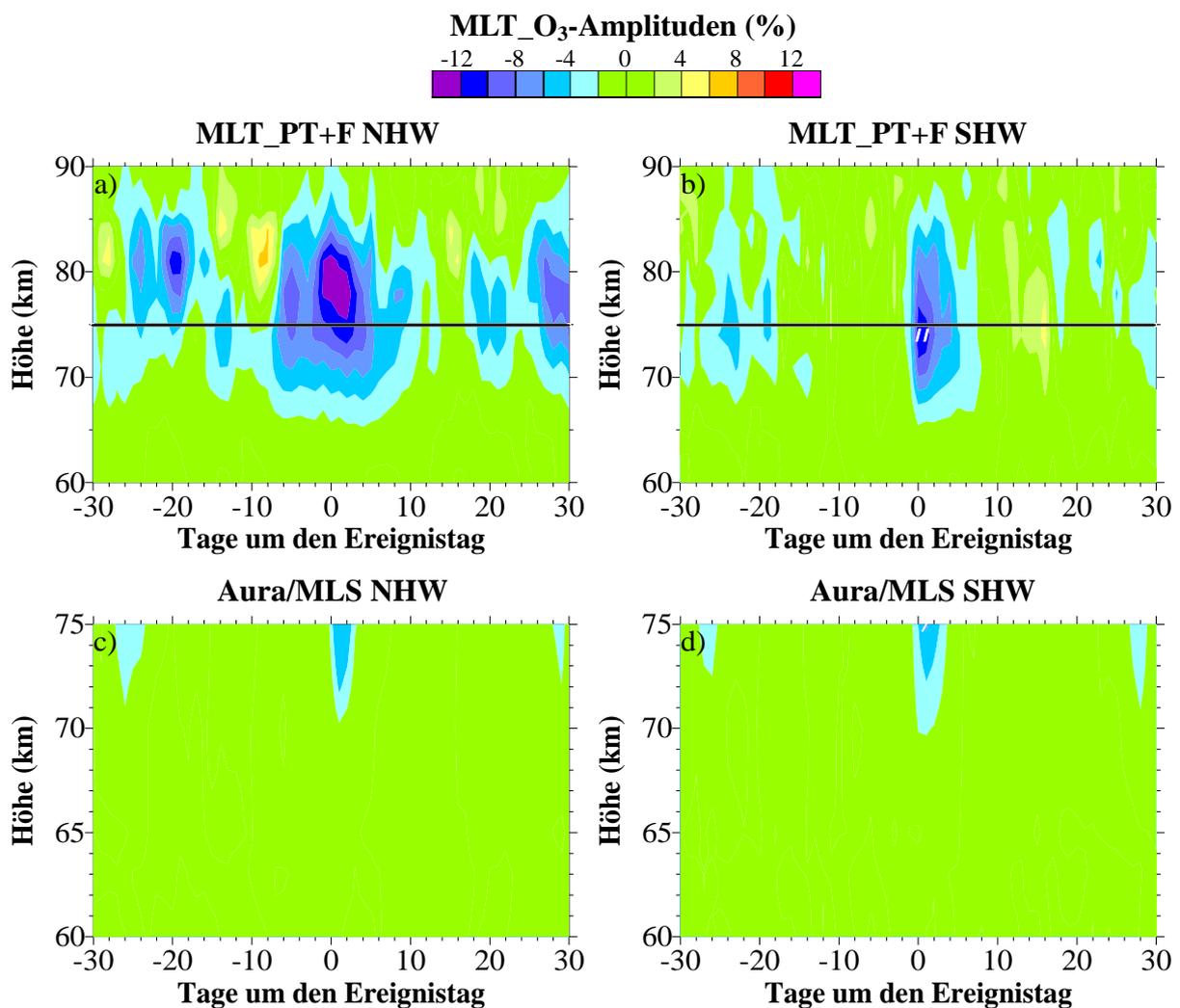
In diesem Kap. 8.4 werden die Spurengasamplituden des 3dCTM-MLT\_PT+F-Laufs für den direkten Vergleich mit den Beobachtungen verwendet. Im Gegensatz zu Kap. 8.2 wurden aber nicht die zugehörigen Amplituden des MLT\_Base+F-Laufs subtrahiert. Daher berücksichtigen die hier dargestellten Amplituden nicht nur die teilcheninduzierten Schwankungen, sondern auch Einflüsse auf Grund von Variationen der Hintergrundatmosphäre. Letzteres bezieht sich aber nicht direkt auf den Spurengashintergrund, sondern umfasst Veränderungen der Atmosphäre im Zusammenhang mit kleinskaligen dynamischen Vorgängen. Des Weiteren berücksichtigen die untersuchten Amplituden hier im Unterschied zu Kap. 8.2 zusätzlich noch den Einfluss des 11-jährigen solaren Zyklus' (s. Kap.8.3).

#### 8.4.1 Ozon (O<sub>3</sub>)

Die simulierten Amplituden für nächtliches O<sub>3</sub> im NHW und SHW sind in Abb. 8.10a-b zu sehen. Für einen leichteren Vergleich mit den MLS-O<sub>3</sub>-Amplituden aus Kap. 7, sind die zugehörigen Ergebnisse in Abb. 8.10c-d erneut dargestellt. Die Modellresultate im NHW

## 8. Modellstudie des 27-Tage-Signals in Spurengasen

(Abb. 8.10a) weisen die höchsten Ozonverluste von 14% in 75-80 km auf, wobei die 27-Tage-Signatur nicht ersichtlich ist. Im SHW (Abb. 8.10b) ist das 27-Tage-Signal hingegen deutlich zu sehen und die Amplituden überschreiten in 75 km mit -12% das 95% Signifikanzniveau. Weitere hemisphärische Unterschiede zeigen sich in Bezug auf die Phase, welche in der NH (SH) um den Tag +2 (0 bis +1) zentriert ist. Außerdem ist das Hauptmaximum im NHW von erheblich längerer Dauer und beginnt bereits vor dem



**Abbildung 8.10.** Nächtliche MLT\_O<sub>3</sub>-Amplituden in 55°-75° geomagnetischer Breite auf Basis des 3dCTM-MLT\_PT+F-Laufs für Januar 2002-August 2008 (oben) [adaptiert von Fytterer et al., 2016, unter Begutachtung] und für August 2004-August 2014 aus Aura/MLS-Beobachtungen (unten) [adaptiert von Fytterer et al., 2015b]. Schraffierte Flächen zeigen Amplituden oberhalb des 95% Signifikanzniveaus auf Basis eines studentschen t-tests. Die horizontale schwarze Linie in den Simulationen markiert die obere Grenze der Messungen.

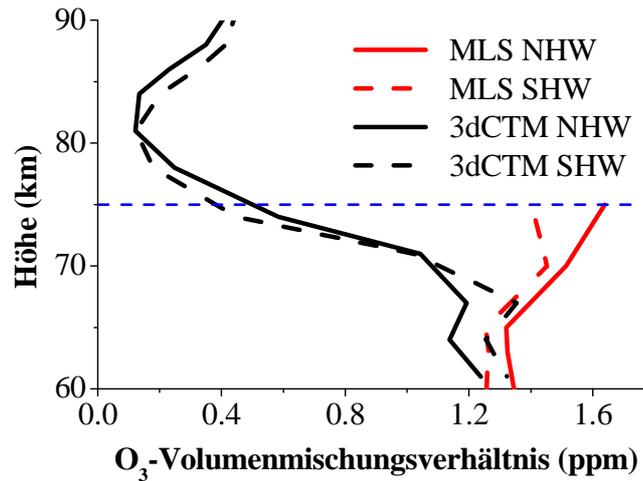
## 8. Modellstudie des 27-Tage-Signals in Spurengasen

Ereignistag. Hinweise auf einen Teilcheneffekt gibt es hier nur in 75-85 km, wo es nach Tag 0 zu einer nochmaligen Verstärkung der Ozonverluste kommt. Im Sommer (hier nicht gezeigt) sind in den Simulationen des 3dCTMs keine Muster in  $O_3$  im Zusammenhang mit präzipitierenden Teilchen zu erkennen, was mit MLS-Messungen übereinstimmt.

Der Vergleich der simulierten und gemessenen  $O_3$ -Amplituden im NHW zeigt deutliche Unterschiede im Bezug auf das 27-Tage-Signal, während die grundsätzlichen beobachteten Strukturen im SHW vom 3dCTM wiedergegeben werden. Dies liegt aber nicht an den Ionisationsraten oder der implementierten Ozonchemie, da das isolierte Teilchensignal in  $O_3$  in beiden Hemisphären sehr ähnliche Strukturen aufweist (vgl. Abb. 8.2, Kap. 8.2.1). Die Ursache ist daher vermutlich im verstärkten Auftreten atmosphärischer Wellen im NHW im Vergleich zum SHW zu finden, wodurch die Atmosphäre im NHW deutlich turbulenter ist (s. Kap. 3.2). In diesem Zusammenhang kommt es im NHW auch häufiger zum Auftreten einer plötzlichen Stratosphärenwärmung (engl. sudden stratospheric warming, SSW). Um einen möglichen Einfluss näher zu untersuchen, wurde zunächst ein großes SSW über die Umkehr des zonal gemittelten Windes in  $50^\circ$ - $80^\circ$ N (<http://www.cpc.ncep.noaa.gov/products/stratosphere/strat-trop/>, letzter Zugriff 30.04.2016) in 10 hPa definiert [Andrews et al., 1987, Kap. 6.1]. Zur Minimierung der Auswirkungen der SSWs auf das laufende 27-Tage-Mittel, und damit auch auf die berechnete Spurengasamplitude, wurde der Zeitraum 40 Tage vor Beginn und 40 Tage nach dem Ende des SSWs aus den Zeitreihen entfernt. Die Bestimmung dieses Zeitintervalls erfolgte empirisch und berücksichtigte die zeitlich von oben nach unten wandernde Windumkehr [z. B. Manney et al., 2009]. Allerdings führte das Herausfiltern der großen SSWs in Übereinstimmung mit den Ergebnissen von Hendrickx et al. [2015] nur zu einer Modulierung der Amplitudenstärke, wobei die grundsätzlichen Strukturen erhalten blieben. Daher lässt sich die generell geringere Übereinstimmung zwischen Messungen und 3dTCM im NHW nicht auf einzelne dynamische Ereignisse zurückführen. Vielmehr werden die dynamischen Gegebenheiten vom LIMA-Modell und damit auch vom 3dCTM im NHW scheinbar schlechter reproduziert als im SHW.

Im SHW werden die beobachteten Strukturen der  $O_3$ -Amplitude hinsichtlich Zeitpunkt und Dauer ihres Auftritts qualitativ vom Modell wiedergegeben. Auch die Größenordnung der Amplitude und dessen Höhenprofil bis in 75 km werden grundsätzlich vom 3dCTM erfasst. Die Überschätzung der Amplitude durch das Modell um den Faktor 2 relativiert sich unter Berücksichtigung des zugehörigen  $O_3$ -Hintergrundes (Abb. 8.11). Dieser weist in 75 km im Modell nur etwa  $1/3$  des  $O_3$ -Hintergrundes im Vergleich zu den MLS-Messungen auf.

## 8. Modellstudie des 27-Tage-Signals in Spurengasen



**Abbildung 8.11.** Vertikalprofil des Volumenmischungsverhältnisses von O<sub>3</sub> in 55°-75° geomagnetischer Breite auf Basis des 3dCTM-MLT\_PT+F-Laufs von Januar 2002 bis August 2008 [adaptiert von Fytterer et al., 2016, unter Begutachtung] und für Aura/MLS-Beobachtungen von 2004 bis 2014 [adaptiert von Fytterer et al., 2015b]. Die horizontale blaue Linie markiert die beschriebene Höhe im Text (75 km).

Vergleiche mit weiteren Ozonprofilen unterstützen jedoch eher den Verlauf im 3dCTM und deuten darauf hin, dass O<sub>3</sub> im Winter in 70-75 km durch MLS überschätzt wird [Smith et al., 2013]. Bei einer Anpassung der Spurengashintergründe auf die MLS-Beobachtungen wird die 3dCTM-O<sub>3</sub>-Amplitude im SHW auf ungefähr -4% gedämpft. Der verbleibende Unterschied lässt sich mit den abweichenden Untersuchungszeiträumen sowie Mess- und Modellfehlern begründen. Zwar können dadurch auch die Differenzen zwischen 3dCTM und MLS hinsichtlich der O<sub>3</sub>-Amplituden im NHW erklärt werden. Jedoch liefert der unterschiedliche Hintergrund keine Argumente für die verschiedenen generellen Strukturen.

Weitere Abweichungen treten bzgl. der Phase des 27-Tage-Signals auf, welches im Modell um ca. -1/2 Tag zu den MLS-Messungen verschoben ist. In diesem Zusammenhang spielen globalskalige Wellen eine Rolle, welche mit dem Lauf der Sonne Richtung Westen wandern. Diese sogenannten migrierenden solaren Gezeiten haben Periodendauern von einem Tag bzw. deren Oberschwingungen (24 h, 12 h, 8 h, ...), und nehmen starken dynamischen Einfluss auf den atmosphärischen Hintergrund [z. B. Andrews et al., 1987, Kap. 4.3]. Ihre Auswirkungen heben sich aber bei der Betrachtung von zonalen Tagesmitteln in den MLS-Beobachtungen auf, da sich der Aura-Satellit in einem sonnensynchronen Orbit befindet. Dahingegen basiert das Tagesmittel im 3dCTM nur auf einen Schnappschuss der Atmosphäre um 0 UTC. Demnach wird bei der Analyse von zonalen Tag- oder Nachtmessungen im Modell nicht über

## 8. Modellstudie des 27-Tage-Signals in Spurengasen

alle Längengrade gemittelt und die Einflüsse der migrierenden solaren Gezeiten können nicht vernachlässigt werden.

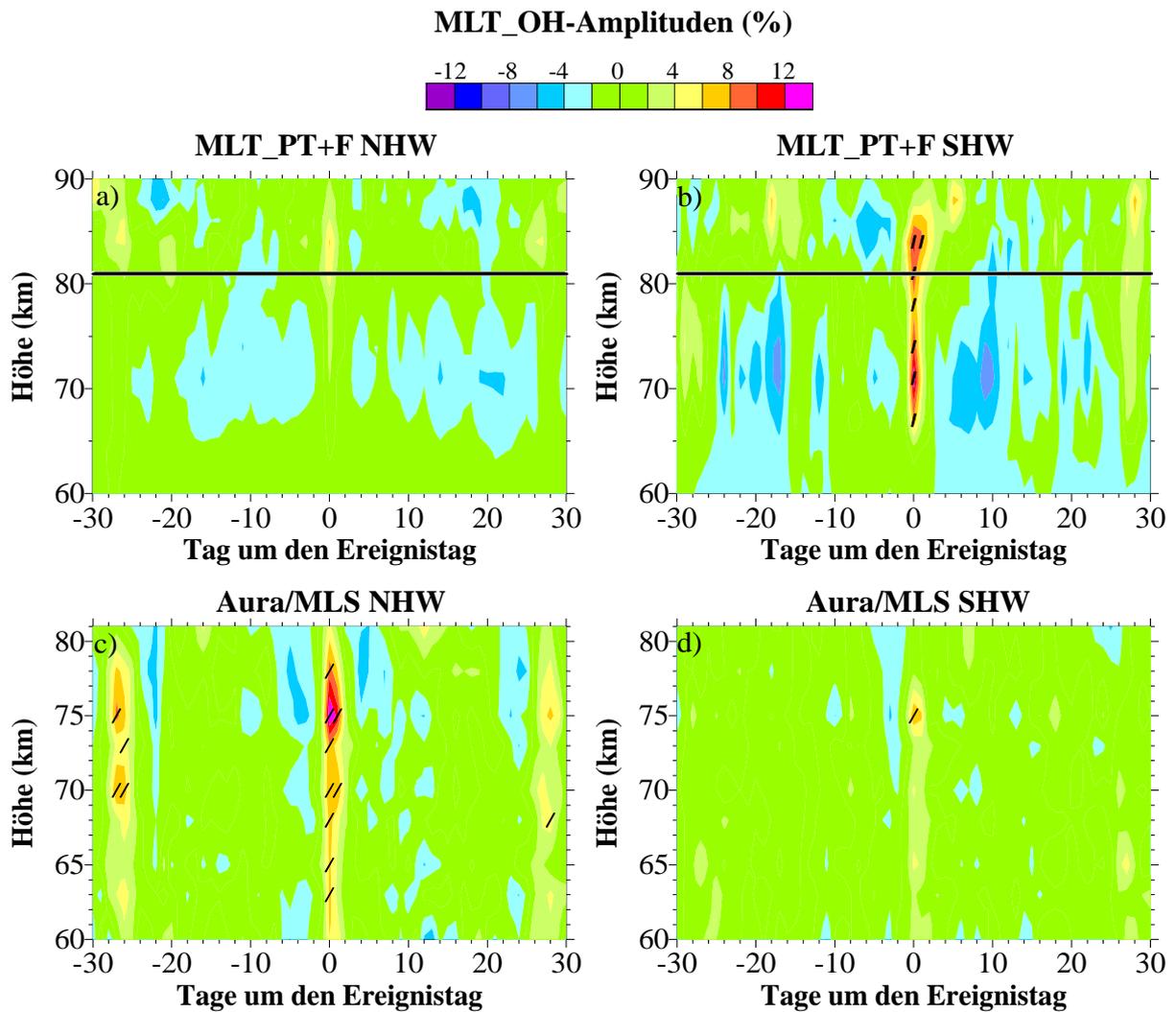
### 8.4.2 Hydroxyl-Radikal (OH)

Die simulierte OH-Amplitude weist in beiden Winterhemisphären ein 27-Tage-Signal auf (Abb. 8.12a-b). Die 27-Tage-Signatur ist in Phase mit dem Ap-Signal und tritt im NHW (SHW) vor allem in 80-90 km (70-80 km) Höhe auf. Die höchste Zunahme von OH ist im NHW in ca. 85 km zu sehen (6%), während im SHW zwei ausgeprägte Maxima in 85 km (10%) und in 70 km (14%) ersichtlich sind. Das Hauptmaximum im SHW ist in 65-85 km durchgehend zu erkennen und liegt oberhalb des 95% Signifikanzniveaus. Die höheren Amplituden im SHW im Vergleich zum NHW sind konsistent mit dem SEA-Signal in den Ionisationsraten (vgl. Abb. 8.1). Die hier dargestellten Strukturen stimmen im Wesentlichen mit den teilcheninduzierten Mustern überein (vgl. Abb. 8.3c, Kap. 8.2.2). Daher geht die OH-Erhöhung und das angedeutete 27-Tage-Signal im 3dCTM sehr wahrscheinlich auf einen Teilcheneinfluss zurück, auch wenn die OH-Amplituden nicht immer oberhalb des 95% Signifikanzniveaus liegen.

Die gemessenen MLS-OH-Amplituden (Abb. 8.12c-d) wurden bereits in Kap. 7 präsentiert und dienen hier lediglich zur leichteren Validierung der Modellergebnisse. Im NHW und SHW werden die beobachteten Amplituden hinsichtlich Zeit und Größenordnung qualitativ vom 3dCTM wiedergegeben. Im NHW wird die gemessene OH-Amplitude vom 3dCTM allerdings deutlich unterschätzt. Des Weiteren ist auch das ausgeprägte Maximum in 75 km im Modell nur schwach zu sehen. Dahingegen sind die OH-Strukturen im SHW im 3dCTM wesentlich markanter als in den MLS-Messungen. Bei den Vergleichen muss aber erneut der OH-Hintergrund berücksichtigt werden, welcher im Modell in 75 km Höhe um den Faktor 5-10 höher ausfällt als in den Beobachtungen (Abb. 8.13). Nach einer Anpassung des Modellhintergrunds an die gemessenen Werte ergeben sich in beiden Hemisphären deutlich stärkere Amplituden im 3dCTM im Vergleich zu MLS-Beobachtungen, was zumindest konsistent mit dem zugehörigen Signalen in Ap am Ereignistag ist (MLS NHW:  $18 \times 2$  nT, 3dCTM NHW:  $28 \times 2$  nT, MLS SHW:  $21 \times 2$  nT, 3dCTM SHW:  $39 \times 2$  nT).

Neben der geomagnetischen Stärke der Ereignisse und dem Spurengashintergrund spielen aber auch dynamisch bedingte Variationen der Hintergrundatmosphäre eine Rolle. Dies kommt beim Vergleich zwischen den isolierten Spurengasamplituden aus Kap. 8.2 und den in

## 8. Modellstudie des 27-Tage-Signals in Spurengasen

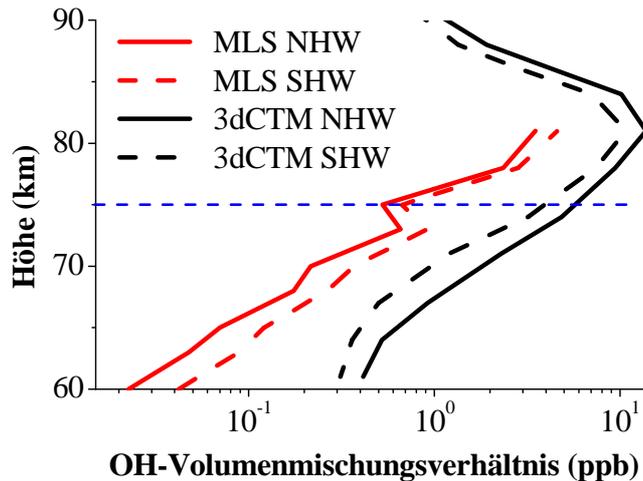


**Abbildung 8.12.** Nächtliche MLT\_OH-Amplituden in  $55^{\circ}$ – $75^{\circ}$  geomagnetischer Breite für Januar 2002–August 2008 (3dCTM-Simulationen, oben) [adaptiert von Fytterer et al., 2016, unter Begutachtung] und August 2004–Dezember 2009 (Aura/MLS-Beobachtungen, unten) [adaptiert von Fytterer et al., 2015b]. Schraffierte Flächen zeigen Amplituden oberhalb des 95% Signifikanzniveaus auf Basis eines studentischen t-tests. Die horizontale schwarze Linie in den Simulationen markiert die obere Grenze der Messungen.

diesem Kapitel präsentierten Amplituden deutlich zur Geltung. Eine grundsätzliche Änderung der Spurengasmuster auf Grund dynamischer Einflüsse ist aber nur in  $O_3$  zu erkennen, was auf dessen längere chemische Lebensdauer im Vergleich zu OH zurückzuführen ist. Auf die dynamischen Auswirkungen wird in Kap. 9 genauer eingegangen.

Generell treten die gemessenen OH-Amplituden in beiden Hemisphären in niedrigeren Höhen ( $<65$ – $70$  km) auf als im 3dCTM, was auf die fehlende Betrachtung der Ionisation durch Elektronen mit einer Energie  $>300$  keV im AIMOS-Modell zurückzuführen ist. Kleinere

## 8. Modellstudie des 27-Tage-Signals in Spurengasen



**Abbildung 8.13.** Vertikalprofil des Volumenmischungsverhältnisses von OH in  $55^{\circ}$ - $75^{\circ}$  geomagnetischer Breite auf Basis des 3dCTM-MLT\_PT+F-Laufs von Januar 2002 bis August 2008 [adaptiert von Fytterer et al., 2016, unter Begutachtung] und für Aura/MLS-Beobachtungen von August 2004 bis Dezember 2009 [adaptiert von Fytterer et al., 2015b]. Die horizontale blaue Linie markiert die beschriebene Höhe im Text (75 km).

Unterschiede hinsichtlich der Höhe des Maximums lassen sich mit der größeren Höhenauslösung des MLS-Instruments (5 km) im Vergleich zum 3dCTM (2-3 km) erklären. Im Sommer ist in den OH-Strukturen sowohl im 3dCTM als auch in den Beobachtungen nur im NHS ein schwacher Zusammenhang zur geomagnetischen Aktivität zu erkennen (hier nicht gezeigt). Ein genauere Vergleich erscheint wenig sinnvoll, da die Spurengasamplituden grundsätzlich sehr klein sind und somit zu einem großen Teil aus Mess- bzw. Modellfehlern resultieren können.

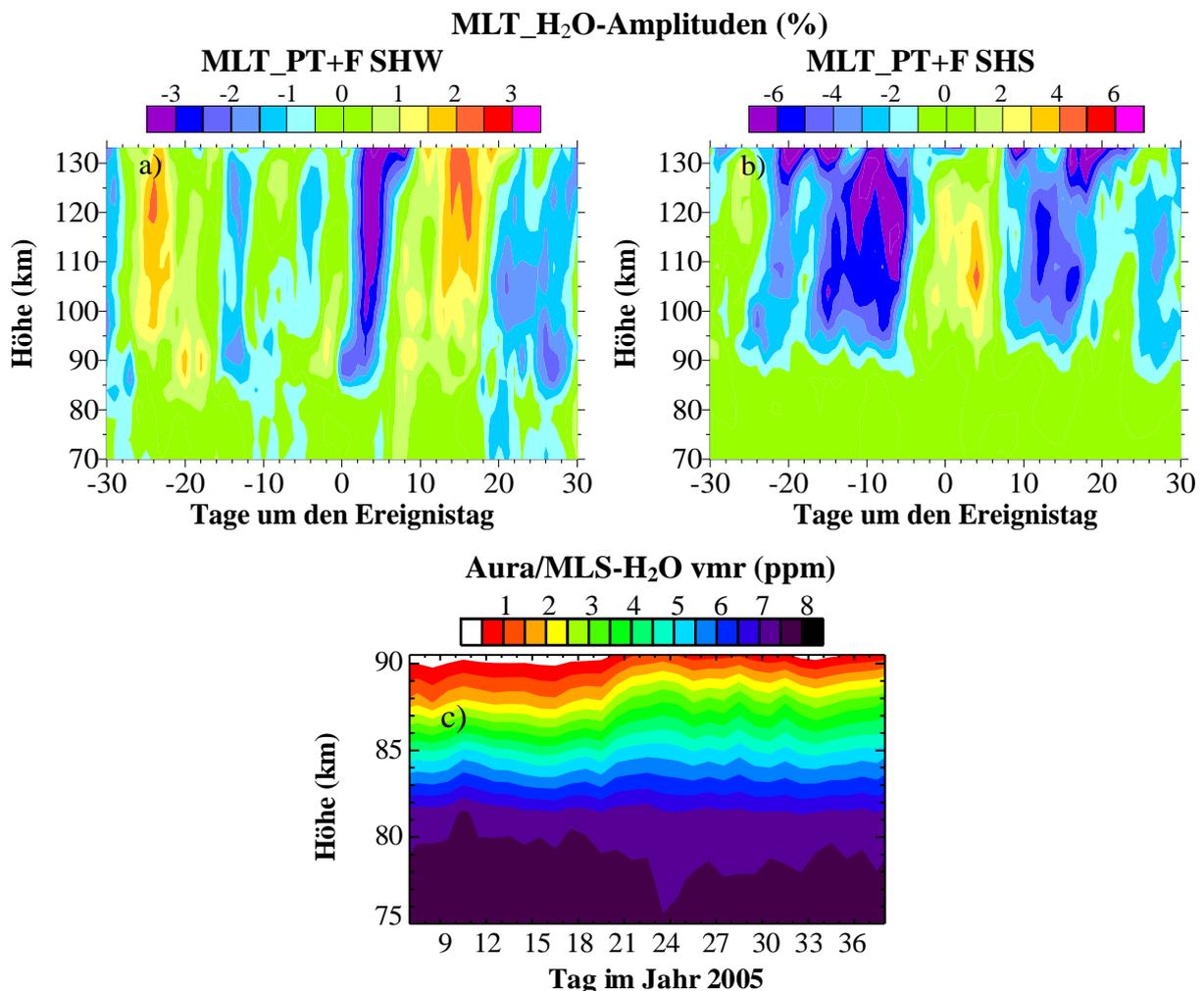
### 8.4.3 Wasserdampf ( $H_2O$ )

Die  $H_2O$ -Amplituden in der SH sind in Abb. 8.14 dargestellt. Im SHW (Abb. 8.14a) ist in etwa 90 km ein schwaches 27-Tage-Signal zu erkennen, welches bzgl. der Ionisationsraten um einen Tag verzögert auftritt. Das Hauptmaximum weist  $H_2O$ -Verluste von 2-3% auf, wobei die Amplitude selbst hier das 95% Signifikanzniveau nicht überschreitet. In der Region oberhalb des Hauptmaximums ist an den Tagen 2-8 eine Aufwärtsbewegung von negativen  $H_2O$ -Amplituden zu sehen, welche sich in größeren Höhen verstärken. Die Unterschiede zum NHW sind gering (hier nicht gezeigt), wobei die Strukturen im SHW stärker ausgeprägt sind. Im Vergleich zum isolierten Teilcheneinfluss auf  $H_2O$  im SHW (vgl. Abb. 8.5a) zeigt sich eine

## 8. Modellstudie des 27-Tage-Signals in Spurengasen

hohe grundsätzliche Übereinstimmung. Allerdings ist durch die dynamische Variation der Hintergrundatmosphäre eine erheblich stärkere Variabilität der H<sub>2</sub>O-Amplitude zu sehen.

Im Gegensatz zum Winter ist für H<sub>2</sub>O im SHS (Abb. 8.14b) einige Tage nach dem Ereignistag eine Zunahme von ca. 4% in Höhen >85 km zu sehen. Diese Verhalten stimmt tendenziell mit den Messungen von Winkler et al. [2012] überein (Abb. 8.14c), welche das H<sub>2</sub>O vmr aus MLS-Daten in 70°-80°S nach dem SPE am 16. und 17. Januar 2005 untersuchten. In den Beobachtungen resultiert die H<sub>2</sub>O-Zunahme aus einer Temperaturerhöhung und dem damit verbundenen schmelzen von Eis. Diese Ursache scheidet für die Simulationen



**Abbildung 8.14.** Variationen der MLT\_H<sub>2</sub>O-Amplitude in 55°-75° geomagnetischer Breite für Januar 2002–August 2008 auf Basis des MLT\_PT+F-Laufs im a) SHW und b) SHS. Zu beachten ist die unterschiedliche Skalierung [adaptiert von Fytterer et al., 2016, unter Begutachtung]. Das untere Bild zeigt das H<sub>2</sub>O vmr nach dem SPE im Januar 2005, wobei die im Vergleich zu a) und b) die Farbskala umgekehrt ist [adaptiert von Winkler et al., 2012].

## 8. Modellstudie des 27-Tage-Signals in Spurengasen

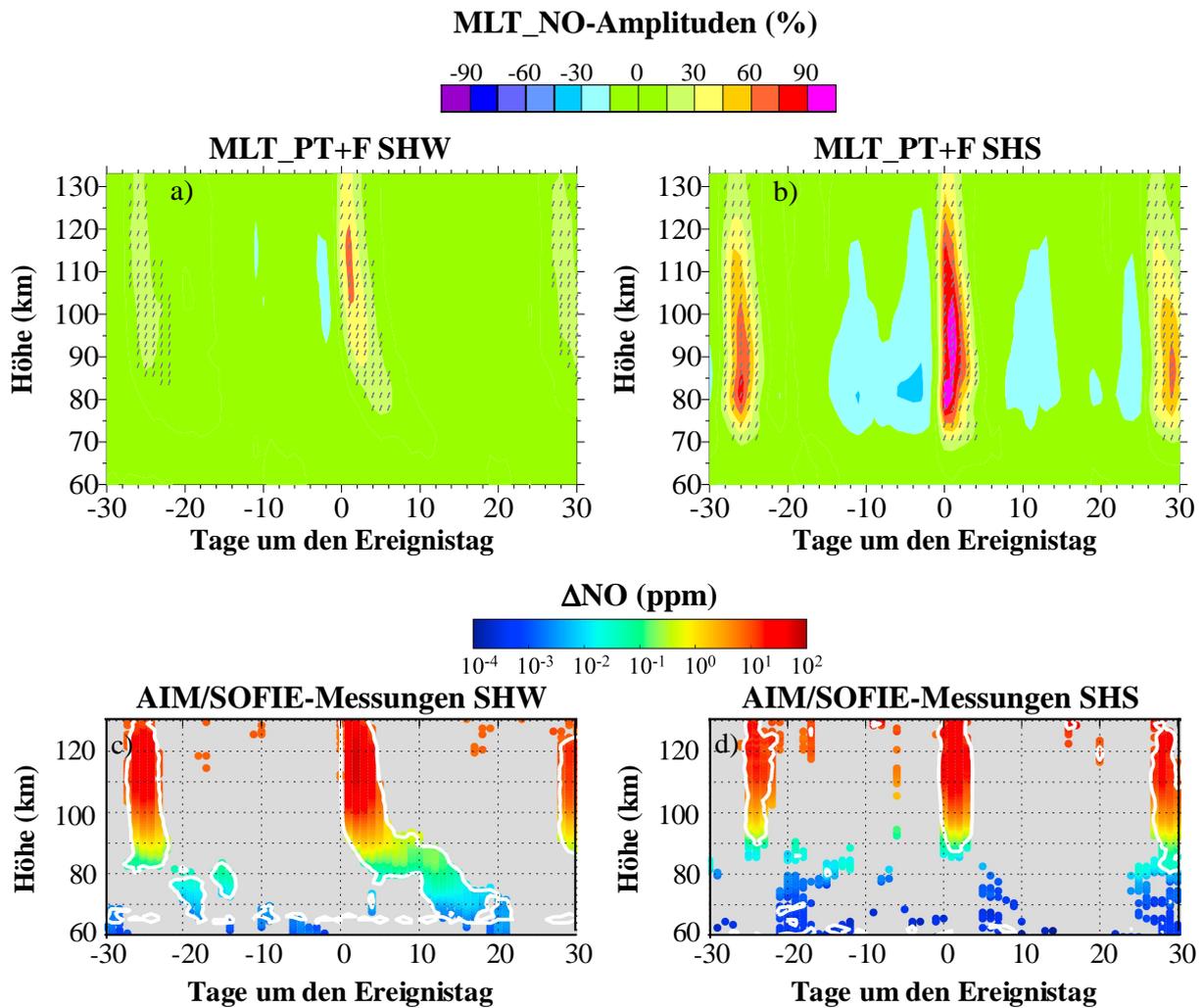
allerdings aus, weil die verwendeten 3dCTM-Läufe in der MLT keine Eisbildung berücksichtigen. Da der isolierte Teilcheneinfluss aber zu einem H<sub>2</sub>O-Verlust führt (s. Kap. 8.2.2) sind im Modell daher dynamische Effekte für die H<sub>2</sub>O-Erhöhung verantwortlich.

### 8.4.4 Stickstoffmonoxid (NO)

In der MLT macht NO bei weitem den größten Anteil an NO<sub>x</sub>-Verbindungen aus und steht daher stellvertretend für die gesamte NO<sub>x</sub>-Familie. Die Amplituden für NO in der SH sind in Abb. 8.15a-b zu sehen und stimmen im Wesentlichen mit den Mustern in der NH überein (hier nicht gezeigt). Das 27-Tage-Signal ist in Höhen >70 km durchgehend in beiden Jahreszeiten zu erkennen. Im SHW (Abb. 8.15a) ist die 27-Tage-Signatur in Höhen oberhalb von 100 km in Phase mit den Ionisationsraten, was einen direkten Teilcheneinfluss nahelegt. In den darunter liegenden Schichten wird NO mit der Hintergrundzirkulation in Kombination mit abwärtsgerichteter turbulenter Diffusion in niedrigere Höhen transportiert (s. Kap. 3.2). Dadurch ist das NO-Maximum um mehrere Tage bzgl. der Ionisationsraten verschoben und es kommt zur Ausbildung einer gebogenen Struktur. Die höchste NO-Zunahme ist mit 50% in ca. 110 km zu finden. Im SHS (Abb. 8.15b) ist das 27-Tage-Signal oberhalb von 110 km ebenfalls um den Ereignistag zentriert und verzögert sich in niedrigeren Bereichen um etwa einen Tag. Die höchste NO-Zunahme tritt in 95 km am Tag +1 auf, wobei es zu mehr als einer Verdoppelung von NO kommt. Die hier dargestellte 27-Tage-Signatur überschreitet in beiden Hemisphären und Jahreszeiten deutlich das 95% Signifikanzniveau in Höhen >70 km und weist zudem eine sehr hohe Ähnlichkeit mit dem isolierten Teilchensignal in NO (vgl. Abb. 8.7) auf. Folglich sind präzipitierende Teilchen die nahezu einzige Quelle dieses Signals im 3dCTM.

Hendrickx et al. [2015] führten eine ähnliche SEA für  $\Delta\text{NO}$  (=NO – 27-Tage-NO-Mittel) auf Basis des Ae-Index durch, deren Ergebnisse in der SH in Abb. 8.15c-d dargestellt sind. Die Untersuchungen stammen von Messungen des Satelliteninstruments „aeronomy of ice in the mesosphere/solar occultation for ice experiment“ (AIM/SOFIE) für 2007-2012 in 65°-85° geografischer Breite. Die Beobachtungen erfolgten in beiden Hemisphären für November-Februar und für Mai-August, was äquivalent zu NHW/SHS bzw. NHS/SHW ist. Sowohl im Südwinter (Abb. 8.15c) als auch im Südsommer (Abb. 8.15d) zeigen die Messungen eine ausgeprägte 27-Tage-Signatur, welche bzgl. Form und Zeit eine starke Ähnlichkeit mit den Ergebnissen des 3dCTMs aufweist. Allerdings breiten sich die

## 8. Modellstudie des 27-Tage-Signals in Spurengasen



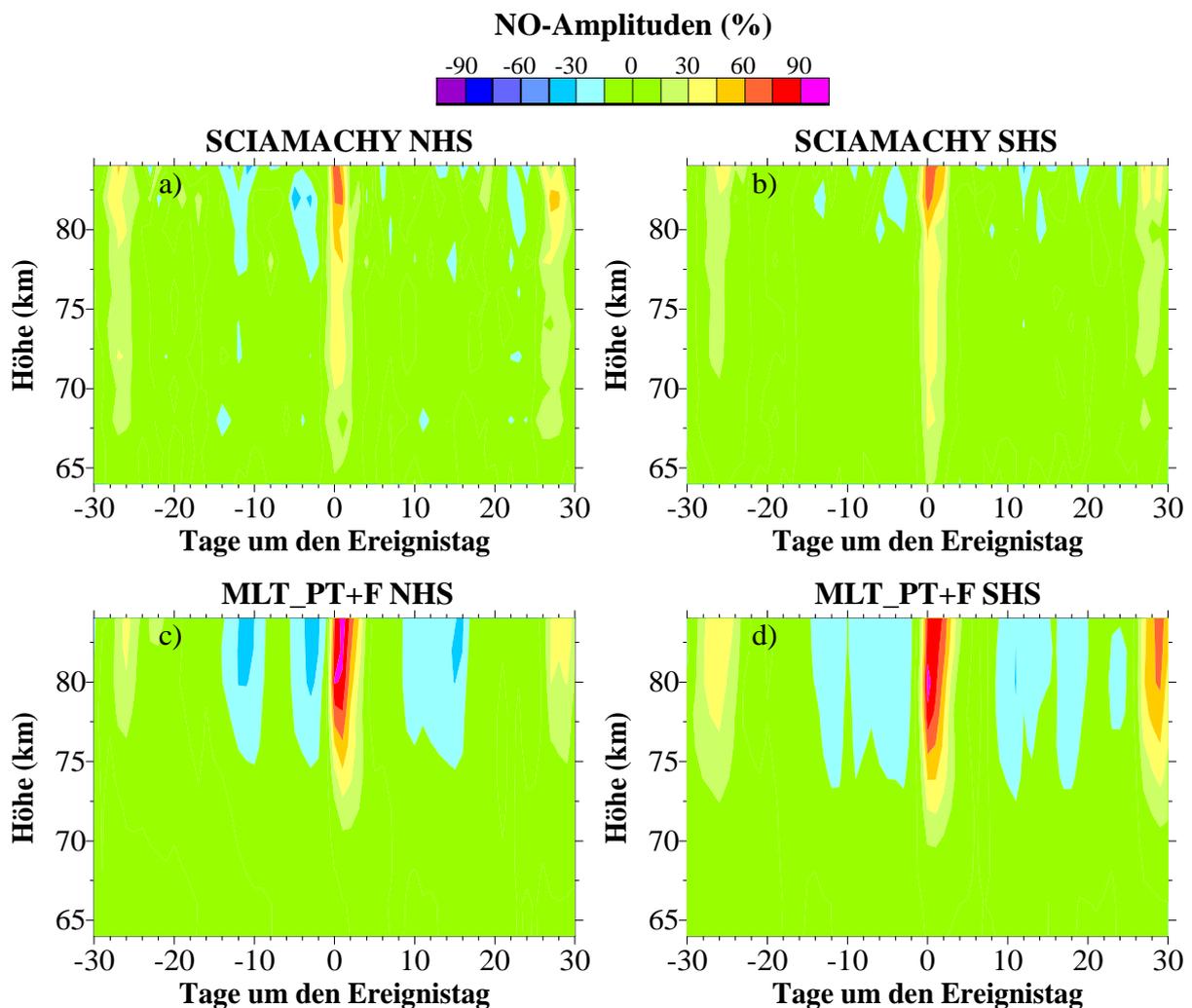
**Abbildung 8.15.** Simulierte MLT\_NO-Amplituden im a) SHW und b) SHS auf Basis des 3dCTM-MLT\_PT+F-Laufs in  $55^{\circ}$ - $75^{\circ}$  geomagnetischer Breite für Januar 2002-August 2008. Schraffierte Bereiche kennzeichnen Amplituden oberhalb des 95% Signifikanzniveaus auf Basis eines studentischen t-tests [adaptiert von Fytterer et al., 2016, unter Begutachtung]. Die untere Reihe zeigt beobachtetes  $\Delta\text{NO}$  ( $=\text{NO} - 27\text{-Tage-NO-Mittel}$ ) bzgl. dem Ae-Index. Die weißen Konturlinien stellen das  $1\sigma$ -Level dar, während graue Flächen Variationen unterhalb der Farbskala zeigen [adaptiert von Hendrickx et al., 2015].

beobachteten Strukturen im Südwinter in deutlich tiefere atmosphärische Schichten aus, was vor allem auf die unterschiedlichen präsentierten Größen (relative gegen absolute NO-Änderungen) und die verschiedene Skalierung zurückzuführen ist. Des Weiteren treten alle beschriebenen Strukturen in den Messungen etwa um einen Tag später auf als in den Modellläufen. Die Ursache hierfür ist in den Charakteristika des Ae-Index zu finden. Letzterer weist an den Tagen 0 und +1 ähnlich hohe Werte auf Hendrickx et al. [2015, Abb. 4], während

## 8. Modellstudie des 27-Tage-Signals in Spurengasen

in dieser Studie das Ap-Signal am Ereignistag deutlich über den benachbarten Werten liegt.

Die NO-Amplituden im Sommer aus Messungen der Anzahldichte des „scanning imaging absorption spectrometer for atmospheric chartography“ (SCIAMACHY) Instruments an Bord des ENVISAT-Satelliten für 2002-2012 sind in Abb. 8.16 zu sehen und basieren auf Untersuchungen von Sinnhuber et al. [2016]. Die Beobachtungen von SCIAMACHY erfolgten auf der Basis der durch Fotoabsorption angeregten NO  $\gamma$ -Banden ( $\approx 235$ -260 nm), wodurch die Analyse auf die Sommermonate beschränkt war. Für einen direkten Vergleich zwischen den SCIAMACHY-Messungen (Abb. 8.16a-b) und den 3dCTM-Simulationen (Abb. 8.16c-d) wurden die 3dCTM-MLT\_NO-Amplituden ebenfalls auf Basis von



**Abbildung 8.16.** Tägliche NO-Amplituden basierend auf der Anzahldichte aus ENVISAT/SCIAMACHY-Messungen für 2002-2012 im a) NHS und b) SHS. [adaptiert von Sinnhuber et al., 2016]. Die untere Reihe zeigt die zugehörigen Ergebnisse des 3dCTM-MLT\_PT+F-Laufs für Januar 2002-August 2008.

## 8. Modellstudie des 27-Tage-Signals in Spurengasen

Anzahldichten berechnet. Die SCIAMACHY-Ergebnisse zeigen in beiden Hemisphären ein deutliches 27-Tage-Signal, welches hinsichtlich der Phasenlage, der Größenordnung der Amplitude und der geringen hemisphärischen Unterschiede des Hauptmaximums vom 3dCTM qualitativ wiedergegeben werden. Die Amplituden aus SCIAMACHY-Messungen erreichen im Hauptmaximum in 84 km Werte von 75% (NHS) und 70% (SHS) und werden vom 3dCTM im NHS (100%) und im SHS (80%) überschätzt, was aber auf die stärkere geomagnetische Aktivität während des Modellzeitraums zurückzuführen ist.

Größere Unterschiede sind hingegen im Bezug auf das Höhenprofil der drei Maxima ersichtlich. Letztere reichen in den Messungen bis in etwa 5 km tiefere atmosphärische Bereiche. Dies lässt sich mit den AIMOS-Ionisationsraten begründen, welche keine Elektronen mit einer Energie  $>300$  keV berücksichtigen. Somit ist das Eindringen der Elektronen in die Erdatmosphäre auf Höhen oberhalb von ca. 70 km beschränkt. In den darunter liegenden Regionen findet im Modell zwar noch vereinzelt Ionisation statt (vgl. Abb. 8.1), was aber auf Grund der geringen Elektronenanzahl nur zu einer geringen NO-Bildung führt.

## **9. Ergebnisse und Diskussionen IV: Auswirkungen von Chemie und Dynamik auf mesosphärisches Ozon**

Die Untersuchungen aus Kap. 8 zeigen einen Zusammenhang zwischen Ozonverlusten und dem Auftreten erhöhter geomagnetischer Aktivität bzw. der Bildung von HO<sub>x</sub>- und NO<sub>x</sub>-Verbindungen. Für O<sub>3</sub> stimmen die Ergebnisse allerdings nur im SHW qualitativ mit den entsprechenden Beobachtungen überein, während im NHW erhebliche Abweichungen ersichtlich sind. Zur genaueren Analyse der hemisphärischen Unterschiede erfolgt in diesem Kapitel eine Untersuchung der Abhängigkeit von O<sub>3</sub> von chemischen (NO<sub>x</sub>, HO<sub>x</sub>) und physikalischen (Dynamik) Faktoren. Dafür werden zunächst die Ergebnisse der 3dCTM-Läufe MLT\_PT+F und MLT\_Base+F mit den Aura/MLS-Messungen aus Kap. 7.3 verglichen. Letztere werden zur Erleichterung der Vergleichbarkeit hier erneut dargestellt. Eine weitere Validierung des 3dCTMs erfolgte mit Hilfe der Beobachtungen von Andersson et al. [2014], wobei Ozonvariationen nach einzelnen Teilchenereignissen betrachtet werden. In diesem Zusammenhang wird auch die interne chemische Konsistenz des 3dCTMs hinsichtlich NO<sub>x</sub>, HO<sub>x</sub> und O<sub>3</sub> untersucht. Außerdem erfolgt eine Abschätzung der Qualität der Ionisationsraten des AIMOS-Modells. Die hier präsentierten Ergebnisse des 3dCTMs und der Aura/MLS-Beobachtungen basieren auf den Resultaten von Fytterer et al. [2016, unter Begutachtung] und Fytterer et al. [2015b].

### **9.1 Ursachen der Variation in simulierten Ozonanomalien**

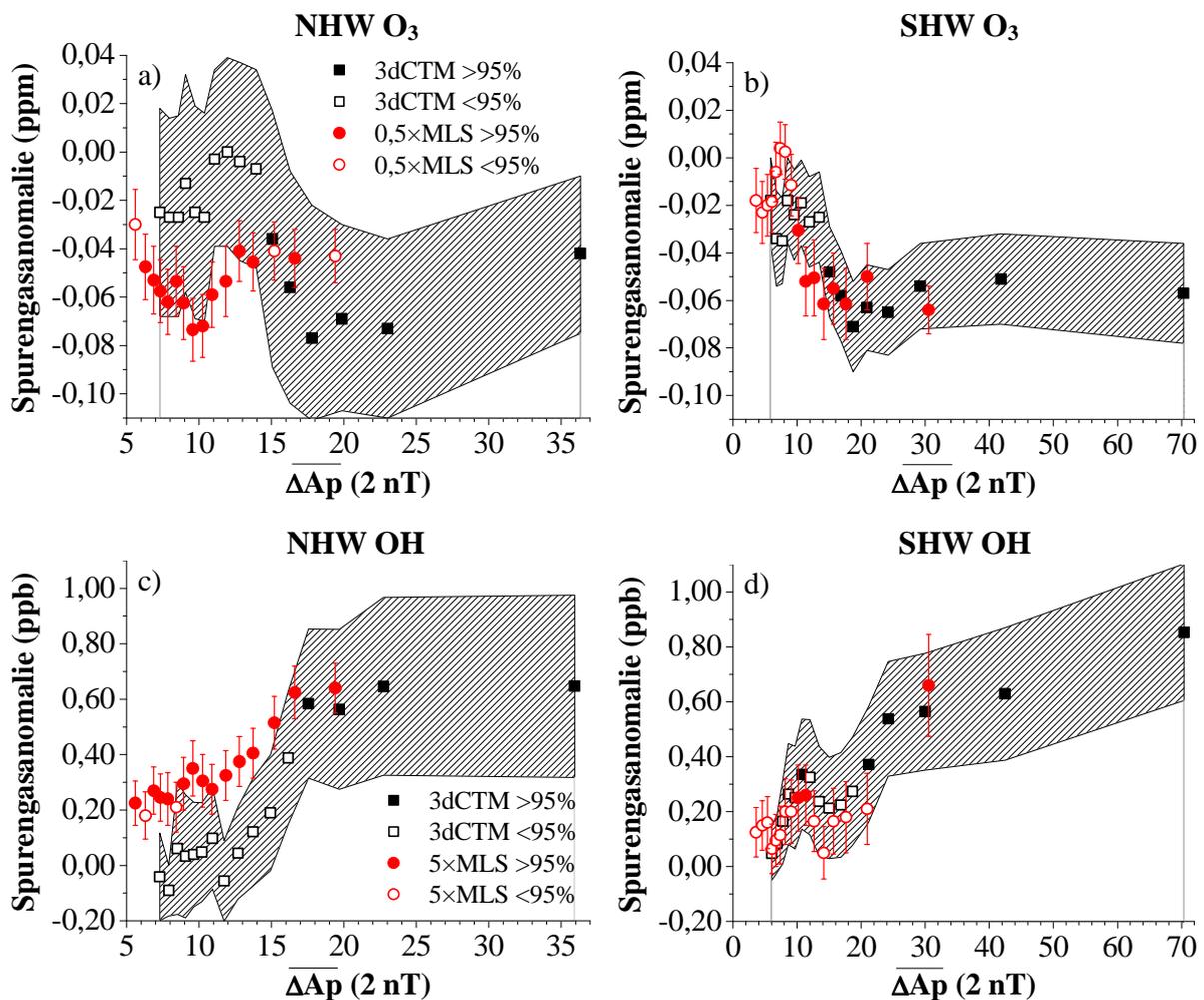
#### **9.1.1 Einfluss der Stärke der geomagnetischen Ereignisse**

In Analogie zu Kap. 7.3 werden zur weiteren Validierung des 3dCTMs die absoluten Spurengasanomalien (s. Gl. 8) von O<sub>3</sub> und OH als Funktion der Ereignisstärke untersucht (Abb. 9.1). Die Anomalien wurden folglich dem Hauptmaximum der SEA-Ergebnisse in 74 km entnommen. Zu beachten ist, dass die O<sub>3</sub>-Anomalien vom Modell im Vergleich zu den MLS-Beobachtungen generell um etwa den Faktor 2 unterschätzt werden, wohingegen die simulierten OH-Anomalien um den Faktor 5 zu groß auffallen. Um dennoch einen relativen Vergleich zu ermöglichen, wurden die MLS-Anomalien in Abb. 9.1 für O<sub>3</sub> (OH) mit dem Faktor 0,5 (5) multipliziert. Des Weiteren berücksichtigen die Messungen und die

## 9. Auswirkungen von Chemie und Dynamik auf mesosphärisches Ozon

Simulationen auf Grund der unterschiedlichen Untersuchungszeiträume (MLS: 2004-2009, 3dCTM: 2002-2008) nur teilweise dieselben Ereignisse. Dadurch ergeben sich abweichende Spektren der untersuchten geomagnetischen Ereignisse, was aber bei dem hier durchgeführten qualitativen Vergleich nur eine untergeordnete Rolle spielt.

Die Simulationen für die O<sub>3</sub>-Anomalien zeigen im NHW (Abb. 9.1a) zunächst keine Variationen für  $\overline{\Delta A_p} < 15 \times 2$  nT. Für stärkere geomagnetische Ereignisse kommt es aber zu einer signifikanten Zunahme der Ozonverluste, wobei die O<sub>3</sub>-Anomalie Werte von -0,08 ppm



**Abbildung 9.1.** Die MLT-Spurengasanomalien des Hauptmaximums in ca. 75 km Höhe als Funktion von  $\overline{\Delta A_p}$  für a) NHW O<sub>3</sub>, b) SHW O<sub>3</sub>, c) NHW OH und d) SHW OH in 55°-75° geomagnetischer Breite. Gefüllte Symbole zeigen Anomalien oberhalb des 95% Signifikanzniveaus auf Basis eines studentschen t-tests. Der  $1\sigma$  Fehler der Anomalien ist als Fehlerbalken (Aura/MLS) bzw. schraffierte Fläche (3dCTM) dargestellt. Zu beachten ist die unterschiedliche Skalierung [adaptiert von Fyterer et al., 2016, unter Begutachtung].

## 9. Auswirkungen von Chemie und Dynamik auf mesosphärisches Ozon

erreicht und auch das Signifikanzniveau von 95% überschreitet. Für  $\overline{\Delta A_p} > 20 \times 2$  nT zeigen sich dann keine weiteren Erhöhungen der Ozonverluste. Der scharfe Anstieg und der Übergang in einen gesättigten Zustand stimmen im Prinzip mit den MLS-Messungen überein. Allerdings tritt dieses Verhalten im 3dCTM erst für stärkere Ereignisse auf. Außerdem ist in den Messungen eine Dämpfung der O<sub>3</sub>-Anomalie zu erkennen, welche in den Simulationen nur für erheblich stärkere Ereignisse ( $\overline{\Delta A_p} \approx 35 \times 2$  nT) angedeutet ist.

Das relative Verhalten der O<sub>3</sub>-Anomalien im SHW (Abb. 9.1b) wird vom Modell qualitativ reproduziert, was den schnellen Anstieg für  $\overline{\Delta A_p} < 20 \times 2$  nT und einen Sättigungseffekt für stärkere Ereignisse mit einschließt. Im Vergleich zum NHW ist der Versatz zwischen Modell und Messung bzgl. der Ereignisstärke hier weniger stark ausgeprägt. Allerdings wird auch im SHW der höchste Ozonverlust in den Beobachtungen bereits für  $\overline{\Delta A_p} \approx 15 \times 2$  nT erreicht, während dies in den Simulationen erst für  $\overline{\Delta A_p} \approx 20 \times 2$  nT der Fall ist.

Die OH-Anomalien weisen im NHW (Abb. 9.1c) in beiden Datensätzen nahezu keine OH-Variationen für schwache geomagnetische Aktivität ( $\overline{\Delta A_p} < 10 \times 2$  nT) auf. Für  $\overline{\Delta A_p} \approx 10-15 \times 2$  nT kommt es zu einem signifikanten Anstieg der OH-Anomalien, welcher in den Simulationen wesentlich stärker ausgeprägt. Dabei wachsen die simulierten Anomalien von ca. 0,1 ppb auf fast 0,7 ppb an, während in den Beobachtungen lediglich eine Verdoppelung stattfindet. Ähnlich wie bei O<sub>3</sub> deutet sich auch im Verhalten der OH-Anomalien ein Sättigungseffekt an, welcher in den Messungen auf Grund des Fehlens stärkerer Ereignisse aber nur erahnt werden kann. Während die gemessenen Anomalien nahezu vollständig oberhalb des 95% Signifikanzniveaus liegen, gilt dies für die Simulationen erst nach dem scharfen Anstieg.

In Analogie zu O<sub>3</sub> liegt auch für OH im SHW (Abb. 9.1d) eine gute relative Übereinstimmung zwischen den Beobachtungen und den Ergebnissen des 3dCTMs vor. Dies schließt sowohl den schwachen geomagnetischen Einfluss für  $\overline{\Delta A_p} < 20 \times 2$  nT als auch den signifikanten Anstieg für stärkere Ereignisse mit ein. Dabei kommt es zu einer ungefähren Verdoppelung der Modellanomalien, welche nun das 95% Signifikanzniveau überschreiten. Für eine weitere Zunahme von  $\overline{\Delta A_p}$  auf etwa  $70 \times 2$  nT ist im 3dCTM ein schwacher Anstieg angedeutet, der auf Grund der fehlenden Messergebnisse nicht validiert werden kann.

## 9. Auswirkungen von Chemie und Dynamik auf mesosphärisches Ozon

Die simulierten OH-Anomalien sind in beiden Hemisphären ungefähr um den Faktor 5 größer als in den Messungen. Dies resultiert vermutlich aus einer systematischen Überschätzung der Ionisationsraten durch das AIMOS-Modell, da zwischen der teilcheninduzierten OH-Produktion und der Ionenanzahl ein linearer Zusammenhang besteht [Solomon et al., 1981]. Auf Grund der qualitativen Übereinstimmung der relativen Merkmale mit den gemessenen OH-Anomalien, können die Simulationen zur Ergänzung bzw. Unterstützung der beobachteten Charakteristika verwendet werden. So deckt der Simulationszeitraum ein breiteres Spektrum an geomagnetischen Ereignissen ab. Dadurch ist die Existenz des Schwellwerts in der Ereignisstärke, welcher zur OH-Bildung überschritten werden muss, deutlicher zu erkennen. Ein ähnliches Verhalten zwischen den Simulationen und den Beobachtungen ist auch für O<sub>3</sub> in beiden Hemisphären ersichtlich, wobei vor allem im SHW eine hohe relative Übereinstimmung beider Datensätze vorliegt. Außerdem unterstützen die 3dCTM-Ergebnisse die Beobachtungen in der Hinsicht, dass auch dort eine Verlangsamung der Zunahme der O<sub>3</sub>- und OH-Anomalien für  $\overline{\Delta Ap} > 15-20 \times 2 \text{ nT}$  erkennbar ist.

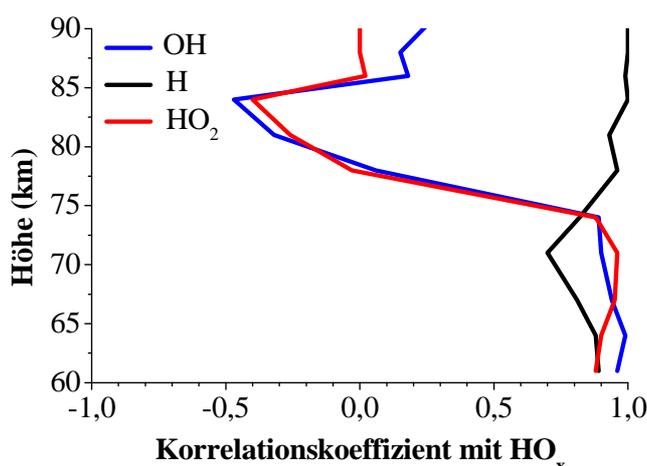
Im Vergleich zwischen O<sub>3</sub> und OH fällt auf, dass die O<sub>3</sub>-Anomalien vom 3dCTM unterschätzt werden, obwohl im Gegenzug eine Überschätzung der zugehörigen OH-Anomalien vorliegt. Dieser scheinbare Widerspruch lässt sich damit erklären, dass der Ozonabbau nicht nur von der Menge an OH bzw. HO<sub>x</sub>, sondern auch von der Ozonkonzentration selbst abhängt. Daher muss der Ozonhintergrund berücksichtigt werden, welcher im 3dCTM in 75 km erheblich niedriger ist als in den MLS-Messungen (vgl. Abb. 8.11, Kap. 8.4.1). Im Vergleich zu den Beobachtungen kommt es folglich zu einer Dämpfung des katalytischen Ozonverlustes im 3dCTM. Allerdings kann dadurch nicht das verzögerte Auftreten der Zunahme der simulierten O<sub>3</sub>-Anomalie im NHW erklärt werden.

Zur genaueren Analyse dieses Sachverhalts ist eine direkte Gegenüberstellung der O<sub>3</sub>- und OH-Anomalien notwendig. Dabei wird aber vorausgesetzt, dass OH als Proxy für HO<sub>x</sub> uneingeschränkt geeignet ist. Diese Annahme basiert auf den Überlegungen zur HO<sub>x</sub>-Bildung von Solomon et al. [1981], wobei ein H und ein OH aus einem H<sub>2</sub>O entstehen (s. Kap. 2.3.1). In diesem Kontext muss außerdem beachtet werden, dass der mesosphärische Ozonabbau in erster Linie auf H und nicht auf OH zurückgeht. Zum anderen beträgt der Anteil von OH an HO<sub>x</sub> in 75 km nur etwa 30%. Daher wird in der nachfolgenden Untersuchung zunächst die Eignung von OH als HO<sub>x</sub>-Proxy überprüft.

## 9. Auswirkungen von Chemie und Dynamik auf mesosphärisches Ozon

### 9.1.2 Abhängigkeit von Ozon ( $O_3$ ) vom Hydroxyl-Radikal (OH)

In Analogie zum vorangegangenen Abschnitt bzw. zu Kap. 7.3 wurde die SEA individuell für alle 16 Ereignisgruppen für  $HO_x$ , H, OH und  $HO_2$  des 3dCTM-MLT\_PT+F-Laufs durchgeführt. Die Analyse beschränkte sich auf die Höhen 60-90 km im Winter, wo der simulierte Teilcheneinfluss auf  $HO_x$ -Verbindungen am stärksten ist (vgl. Abb. 8.4, Kap. 8.2.2). Anschließend erfolgte die Berechnung des linearen Korrelationskoeffizienten zwischen den  $HO_x$ -Anomalien am Ereignistag aller Gruppen mit den zugehörigen Anomalien von H, OH und  $HO_2$ . Die Ergebnisse im SHW sind in Abb. 9.2 zu sehen und zeigen, dass H ein geeigneter  $HO_x$ -Indikator für den gesamten Höhenbereich darstellt. Dies gilt auch für OH und  $HO_2$  in einer Modellhöhe  $<74$  km, wo der Korrelationskoeffizient nahe +1 liegt. In den darüber liegenden atmosphärischen Schichten weist der Korrelationskoeffizient aber einen starken Abfall auf, wodurch eine Verwendung von OH und  $HO_2$  als  $HO_x$ -Proxy nicht mehr sinnvoll ist. Im NHW (hier nicht gezeigt) können OH und  $HO_2$  bis in 81 km als  $HO_x$ -Indikatoren genutzt werden. In diesem Zusammenhang ist die Verwendung von OH als  $HO_x$ -Proxy für MLS-Beobachtungen in 75 km im SHW zumindest kritisch zu betrachten. Allerdings ist das Verhalten der  $O_3$ - und OH-Anomalien in den Messungen in 75 und 70 km Höhe grundsätzlich ähnlich. Daher sprechen die in diesem Abschnitt präsentierten Ergebnisse nicht gegen eine Verwendung von OH als Indikator für  $HO_x$  in 75 km Höhe, was sowohl für die Beobachtungen als auch die Simulationen gilt.

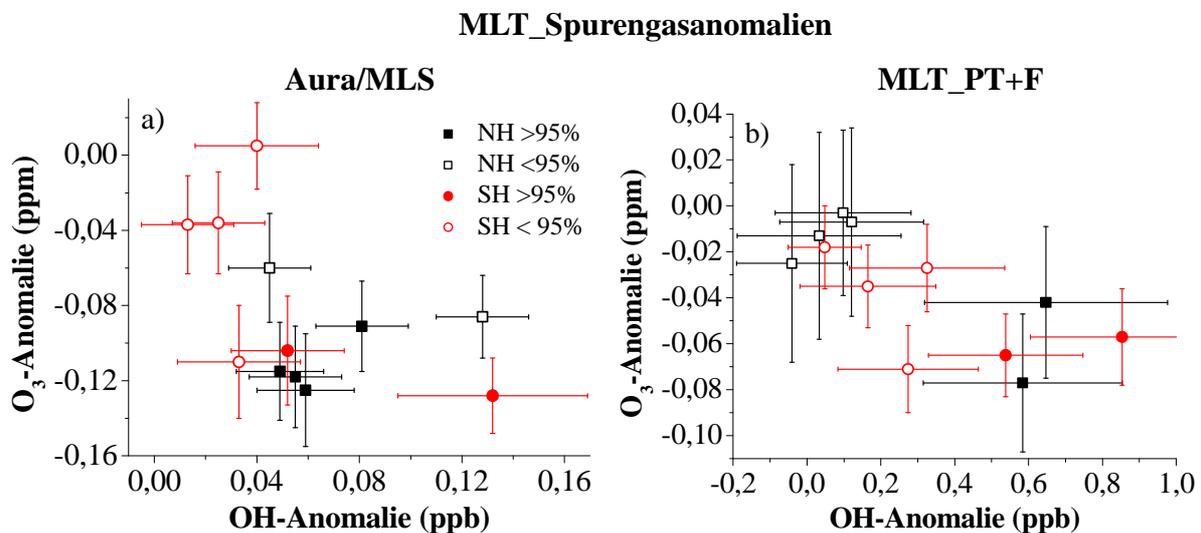


**Abbildung 9.2.** Linearer Korrelationskoeffizient zwischen  $HO_x$ -Anomalien am Ereignistag und den zugehörigen Anomalien der einzelnen  $HO_x$ -Komponenten als Funktion der Höhe. Die Anomalien resultieren aus einer überlagerten Epochenanalyse und basieren auf dem 3dCTM-MLT\_PT+F-Lauf von Januar 2002 bis August 2008 im SHW.

## 9. Auswirkungen von Chemie und Dynamik auf mesosphärisches Ozon

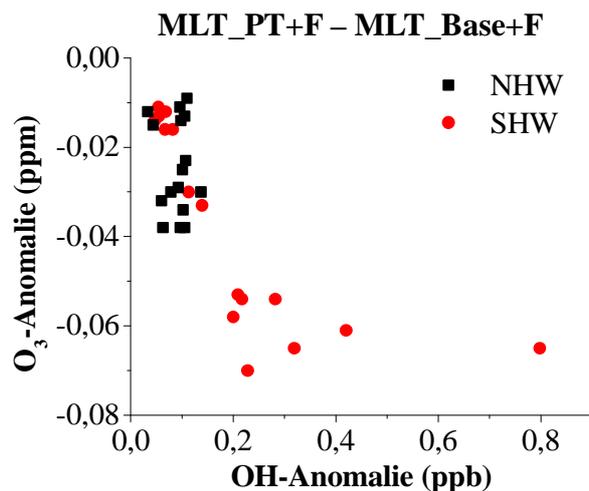
Demnach kann der simulierte Zusammenhang zwischen  $O_3$ -OH im Winter in beiden Hemisphären in 74 km mit den zugehörigen Aura/MLS-Messungen in 75 km qualitativ verglichen werden. Die entsprechenden Spurengasanomalien sind in Abb. 9.3 zu sehen, wobei es sich lediglich um eine alternative Visualisierung der Ergebnisse aus Abb. 9.1 handelt. Aus Gründen der Übersichtlichkeit ist aber nur jedes 3. Anomalienpaar dargestellt. Während die Beobachtungen eine nicht lineare Abhängigkeit von  $O_3$  zu OH zeigen (Abb. 9.3a), ist im 3dCTM ein annähernd linearer Zusammenhang ersichtlich (Abb. 9.3b). Die schwache qualitative Übereinstimmung zwischen den Messungen und dem Modell geht aber vor allem auf die Simulationen im NHW zurück. Bei einer alleinigen Betrachtung der SHW ist die Ähnlichkeit zu den Beobachtungen erheblich höher.

Zur genaueren Untersuchung dieser hemisphärischen Unterschiede wurde die Analyse auch für den 3dCTM-MLT\_Base+F-Lauf durchgeführt. Anschließend erfolgte die Subtraktion der erhaltenen Spurengasanomalien von entsprechenden Anomalien des MLT\_PT+F-Laufs aus Abb. 9.3b. Der dadurch berechnete isolierte Teilcheneinfluss ist in Abb. 9.4 dargestellt. Im



**Abbildung 9.3.** Die MLT\_ $O_3$ -Anomalien als Funktion der MLT\_OH-Anomalien des Hauptmaximums in ca. 75 km Höhe auf Basis a) der Aura/MLS-Beobachtungen [adaptiert von Fyterer et al., 2015b] und b) des 3dCTM-MLT\_PT+F-Laufs [adaptiert von Fyterer et al., 2016, unter Begutachtung]. Gezeigt ist nur für jedes 3. Anomalienpaar, um die Lesbarkeit zu gewährleisten. Die  $1\sigma$  Fehler sind durch horizontale und vertikale Fehlerbalken dargestellt. Gefüllte Symbole zeigen  $O_3$ - und OH-Anomalien oberhalb des 95% Signifikanzniveaus auf Basis eines studentischen t-tests.

## 9. Auswirkungen von Chemie und Dynamik auf mesosphärisches Ozon



**Abbildung 9.4.** Die teilcheninduzierten MLT\_O<sub>3</sub>-Anomalien als Funktion der MLT\_OH-Anomalien des Hauptmaximums in ca. 75 km Höhe. Die Werte stellen die Differenz zwischen den Anomalien des MLT\_PT+F-Laufs und den Anomalien des MLT\_Base+F-Laufs des 3dCTMs dar [adaptiert von Fyterer et al., 2016, unter Begutachtung].

SHW weisen die Ergebnisse deutlich auf nicht linearen Zusammenhang hin, welcher qualitativ mit den Beobachtungen in Abb. 9.3a übereinstimmt. Außerdem zeigen die isolierten OH- und O<sub>3</sub>-Anomalien ähnliche Werte wie die dynamisch beeinflussten Anomalien in Abb. 9.3b, was präzipitierende Teilchen hier als Hauptursache für die OH-Bildung bzw. den Ozonabbau bestätigt. Das Muster im NHW ist schwer zu interpretieren, da die Anomalien vergleichsweise geringe Werte aufweisen. Die erheblichen Abweichungen zu den Simulationen in Abb. 9.3b zeigen aber, dass der wesentliche Anteil der Spurengasanomalien auf dynamische Variationen der Hintergrundatmosphäre und nicht auf einen Teilcheneinfluss zurückgeht. Die Dynamik ist folglich auch für die geringere Übereinstimmung zwischen dem MLT\_PT+F-Lauf (Abb. 9.3b) und den Beobachtungen (Abb. 9.3a) verantwortlich. Demnach liegt eine Überschätzung des dynamischen Einflusses im NHW durch das LIMA-Modell vor.

### 9.1.3 Abhängigkeit von Ozon (O<sub>3</sub>) von Stickstoffmonoxid (NO)

Die bisher in dieser Arbeit präsentierten Ergebnisse zeigen, dass der mesosphärische Ozonabbau auf Zeitskalen von wenigen Tagen im Wesentlichen auf HO<sub>x</sub> zurückzuführen ist. Dies stimmt mit den Erkenntnissen aus Modell- und Satellitendaten überein [z. B. Jackman et al., 2014]. Allerdings geht die Bildung von HO<sub>x</sub> auch immer mit der Produktion von NO<sub>x</sub>-Verbindungen einher [Sinnhuber et al., 2012]. Von daher könnte NO<sub>x</sub> grundsätzlich auch zu

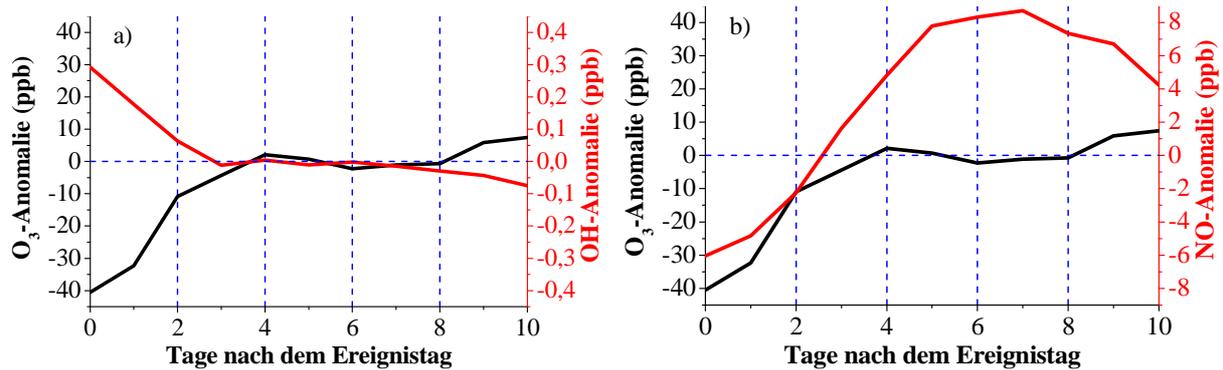
## 9. Auswirkungen von Chemie und Dynamik auf mesosphärisches Ozon

mesosphärischen Ozonverlusten beitragen. Unterstützt wird diese These von Bodenmessungen in der SH im Juli 2009, wo nach einem geomagnetischen Sturm sowohl die Zunahme von NO als auch ein verstärkter Ozonabbau beobachtet wurden [Daae et al., 2012]. Allerdings weist NO<sub>x</sub> im Vergleich zu HO<sub>x</sub> eine deutlich höhere Lebensdauer auf, wodurch die NO<sub>x</sub>-O<sub>3</sub>-Zyklen erheblich langsamer ablaufen. Auf Grund dessen kann nicht ausgeschlossen werden, dass die NO-Bildung lediglich ein Proxy für geomagnetische Aktivität ist und der tatsächliche Ozonabbau durch HO<sub>x</sub> verursacht wird. Weitere Modellsimulationen von Verronen und Lehmann [2015] deuten darauf hin, dass NO<sub>x</sub> zumindest auf saisonalen Zeitskalen für den mesosphärischen Ozonabbau von Bedeutung ist

Die Zeitreihen der O<sub>3</sub>-, NO- und OH-Anomalien für den Zeitraum 0-10 Tage nach dem Ereignistag im SHW sind in Abb. 9.5 dargestellt. Hierbei handelt es sich um die Differenz der Anomalien aus dem 3dCTM-MLT\_PT+F-Lauf und dem zugehörigen MLT\_Base+F-Lauf, um nur teilcheninduzierte Variationen zu betrachten. Die Untersuchungen erfolgten für das Höhenlevel in 74 km, wo alle drei Spurengase qualitativ vom 3dCTM wiedergegeben werden und ausreichend hohe Anomalien aufweisen. Zudem ist ein zeitlicher Versatz zwischen OH- und NO-Variationen vorhanden, wodurch eine Separierung der Einflüsse auf O<sub>3</sub> möglich wird. Bei dem Vergleich werden OH und NO als Proxy für den HO<sub>x</sub> bzw. NO<sub>x</sub> verwendet. Zwar wurde die Eignung bisher nur für OH explizit gezeigt (s. Kap. 9.1.2). Allerdings beträgt der Anteil von NO an NO<sub>x</sub> im 3dCTM in 74 km rund 90%, was eine Verwendung von NO als NO<sub>x</sub>-Proxy rechtfertigt. Außerdem können die Ergebnisse so mit möglichen zukünftigen Beobachtungen leichter validiert werden, da Satelliten in der Regel NO messen.

Zwischen O<sub>3</sub> und OH (Abb. 9.5a) liegt über den gesamten Zeitraum eine hohe Antikorrelation vor, was der entsprechende lineare Korrelationskoeffizient von -0,98 verdeutlicht. Besonders an Tag 0 treten sowohl hohe Ozonverluste und als auch große OH-Zunahmen auf, wodurch ein direkter chemischer Zusammenhang impliziert wird. Für den Zeitraum von Tag 4-8 liegen die Anomalien nahe Null, bevor sich am Tag 9 und 10 erneut ein schwaches gegenläufiges Verhalten zeigt. Bei genauerer Betrachtung treten am Tag 4 zunächst schwache positive O<sub>3</sub>-Anomalien auf, welche sich für die folgenden 4 Tage in geringe Ozonverluste umkehren. Genau für diese Zeit sind auch erhöhter NO-Anomalien (Abb. 9.5b) zu sehen. Auf Grund der relativ kleinen Änderungen in O<sub>3</sub> liefern die Ergebnisse aber höchstens ein Indiz für einen möglichen Einfluss von NO<sub>x</sub> auf mesosphärisches O<sub>3</sub>. Für eine genauere Identifizierung des NO<sub>x</sub>-O<sub>3</sub>-Zusammenhangs müsste ein Vergleich mit dem 3dCTM\_MLT-PT+F-Lauf ohne NO<sub>x</sub>-Verbindungen stattfinden, der aber zum Zeitpunkt der Erstellung dieser Arbeit nicht vorlag.

## 9. Auswirkungen von Chemie und Dynamik auf mesosphärisches Ozon



**Abbildung 9.5.** Zeitreihen der teilcheninduzierten Spurengasanomalien von a) O<sub>3</sub> und OH bzw. b) O<sub>3</sub> und NO (3dCTM\_MLT\_PT+F-Lauf - 3dCTM\_MLT\_Base+F-Lauf) von Januar 2002 bis August 2008 in 74 km im SHW.

### 9.2 Ozonvariationen nach einzelnen Teilchenereignissen

Für eine weitere Einschätzung der Modellergebnisse hinsichtlich des Einflusses der Dynamik auf teilcheninduzierte Ozonänderungen werden in diesem Abschnitt die Ozonvariationen nach einigen einzelnen Teilchenereignissen mit hohen Elektronenraten (engl. energetic electron precipitation, EEP events) untersucht. Anschließend erfolgt ein Vergleich mit Satellitenbeobachtungen in 61-80 km von Andersson et al. [2014, Abb. 2a-c und Zusatzmaterial Abb. 1A]. Um einen möglichst direkten Vergleich mit den Messungen zu gewährleisten, berücksichtigen die Simulationen nur nächtliche Ozonvariationen. Außerdem beziehen sich die O<sub>3</sub>-Amplituden in diesem Abschnitt auf das 7-Tage-Mittel vor dem EEP-Ereignis. Allerdings repräsentieren die Simulationen weiterhin den Bereich zwischen 55° und 75° geomagnetischer Breite, während die Messungen nur für 55°-65° geomagnetischer Breite durchgeführt wurden. Dadurch sind aber keine grundsätzlichen Unterschiede zu erwarten, da beide Gebiete innerhalb der Breiten der Auroraregion liegen. Dementsprechend können die erhaltenen Ozonverluste im 3dCTM-MLT\_PT+F-Lauf mit den Beobachtungen verglichen werden. Des Weiteren dient die Amplitudendifferenz zwischen dem MLT\_PT+F-Lauf und dem MLT\_Base+F-Lauf zur Abschätzung des dynamischen Einflusses auf den Ozonabbau. Zu beachten ist, dass die EEP-Ereignisse über einige Tage andauern und aus mehreren, zum Teil überlagerten, Teilereignissen bestehen. Daher fällt der Beginn des EEP-Ereignisses (=Tag 0) nicht unbedingt mit den höchsten Elektronenraten zusammen.

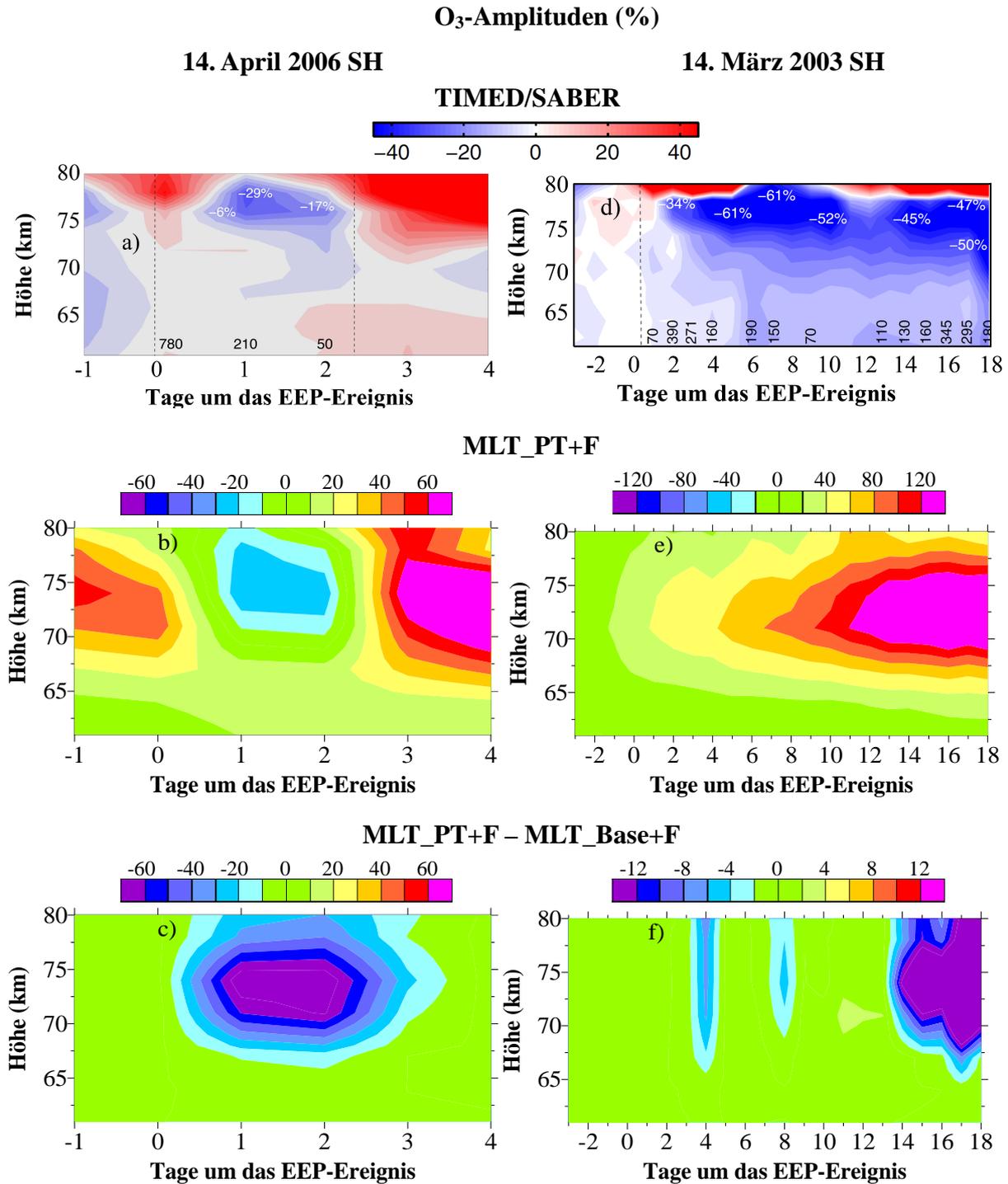
## 9. Auswirkungen von Chemie und Dynamik auf mesosphärisches Ozon

Das erste untersuchte EEP-Ereignis begann am 14. April 2006 (Abb. 9.6, linke Spalte), wobei die Beobachtungen (Abb. 9.6a) Ozonverluste von 20-30% für Tag 1-2 in 75-80 km Höhe zeigen. In den Tagen vor und nach Beginn des EEP-Ereignisses sind im Gegenzug starke Ozonerhöhungen ersichtlich. Dieses Verhalten wird in Bezug auf die Zeit und die Amplitudenstärke qualitativ vom 3dCTM wiedergegeben (Abb. 9.6b). Allerdings treten die simulierten O<sub>3</sub>-Amplituden etwa 5 km tiefer als in den Messungen auf. Bei der Betrachtung des isolierten Teilcheneinflusses (Abb. 9.6c) ergeben sich im 3dCTM wesentlich größere Ozonverluste von bis zu 80%, wobei sich die gesamte Struktur nun bis in 65 km Höhe erstreckt und von Tag 1-3 zu erkennen ist. Somit zeigt sich deutlich, dass die dynamische Variabilität des Hintergrunds im Modell die Ozonverluste um mehr als den Faktor 2 dämpft. Dahingegen sind die Ozonerhöhungen vor und nach dem Ereignis vollständig verschwunden. Diese stehen damit in keinem Zusammenhang mit präzipitierenden Teilchen und sind allein auf dynamische Schwankungen zurückzuführen.

Ein weiteres EEP-Ereignis fand zwischen dem 14. März und dem 3. April 2003 statt (Abb. 9.6, rechte Spalte). Nach Eintreten des Ereignisses zeigen sich in der SH in den Messungen oberhalb von 65 km ausgeprägte Ozonverluste von über 50% (Abb. 9.6d), während es im 3dCTM hier zu Ozonerhöhungen von mehr als 150% kommt (Abb. 9.6e). Wird der Einfluss des Modellhintergrunds nicht berücksichtigt (Abb. 9.6f), verschwinden die Ozonerhöhungen im 3dCTM vollständig und es werden Ozonverluste von etwa 6% (Tag 4), 4% (Tag 8) und über 30% (Tag 14-18) sichtbar. Folglich wird der Einfluss präzipitierender Teilchen im Vergleich zu den dynamisch bedingten Änderungen der Hintergrundatmosphäre vom 3dCTM deutlich unterschätzt. Gleiches gilt auch für zwei weitere EEP-Ereignisse im November 2003 in der NH sowie im Januar 2005 in der SH, auf deren Analyse hier nicht explizit eingegangen wird.

Somit werden die O<sub>3</sub>-Amplituden nach einzelnen Teilchenereignissen vom 3dCTM nur im SHW qualitativ wiedergegeben, wohingegen im NHW und im Sommer große Unterschiede auftreten. Diese Schlussfolgerung steht nicht im Widerspruch zu hier präsentierten Ergebnissen, obwohl März und April eines Jahres zeitlich nah beieinander liegen. Die Ursache hierfür ist, dass im März die Umkehr der vorherrschenden Hintergrundzirkulation stattfindet. Dies ist aber grundsätzlich mit erheblicher Turbulenz verbunden, die vom LIMA-Modell nur schwer erfasst werden kann. Dahingegen ist die Umstellung von sommerlichem Ostwind auf winterlichen Westwind im April bereits abgeschlossen und kann so vom Modell daher leichter wiedergegeben werden.

9. Auswirkungen von Chemie und Dynamik auf mesosphärisches Ozon



**Abbildung 9.6.** Nächtliche O<sub>3</sub>-Amplituden bzgl. des 7-Tage-Mittels vor dem Beginn der EEP-Ereignisse am 14. April 2006 (links) und am 14. März 2003 (rechts). Die Beobachtungen (oben) zeigen Beginn und Ende des Ereignisses (vertikale gestrichelten Linien), wobei die schwarzen (weißen) Zahlen für die täglichen Elektronenraten (O<sub>3</sub>-Amplituden) stehen [adaptiert von Andersson et al., 2014]. In der mittleren und untersten Reihe sind der entsprechende 3dCTM-MLT\_PT+F-Lauf bzw. deren Abweichungen zum zugehörigen MLT\_Base+F-Lauf zu sehen [adaptiert von Fyterer et al., 2016, unter Begutachtung]. Zu beachten ist die individuelle Skalierung.

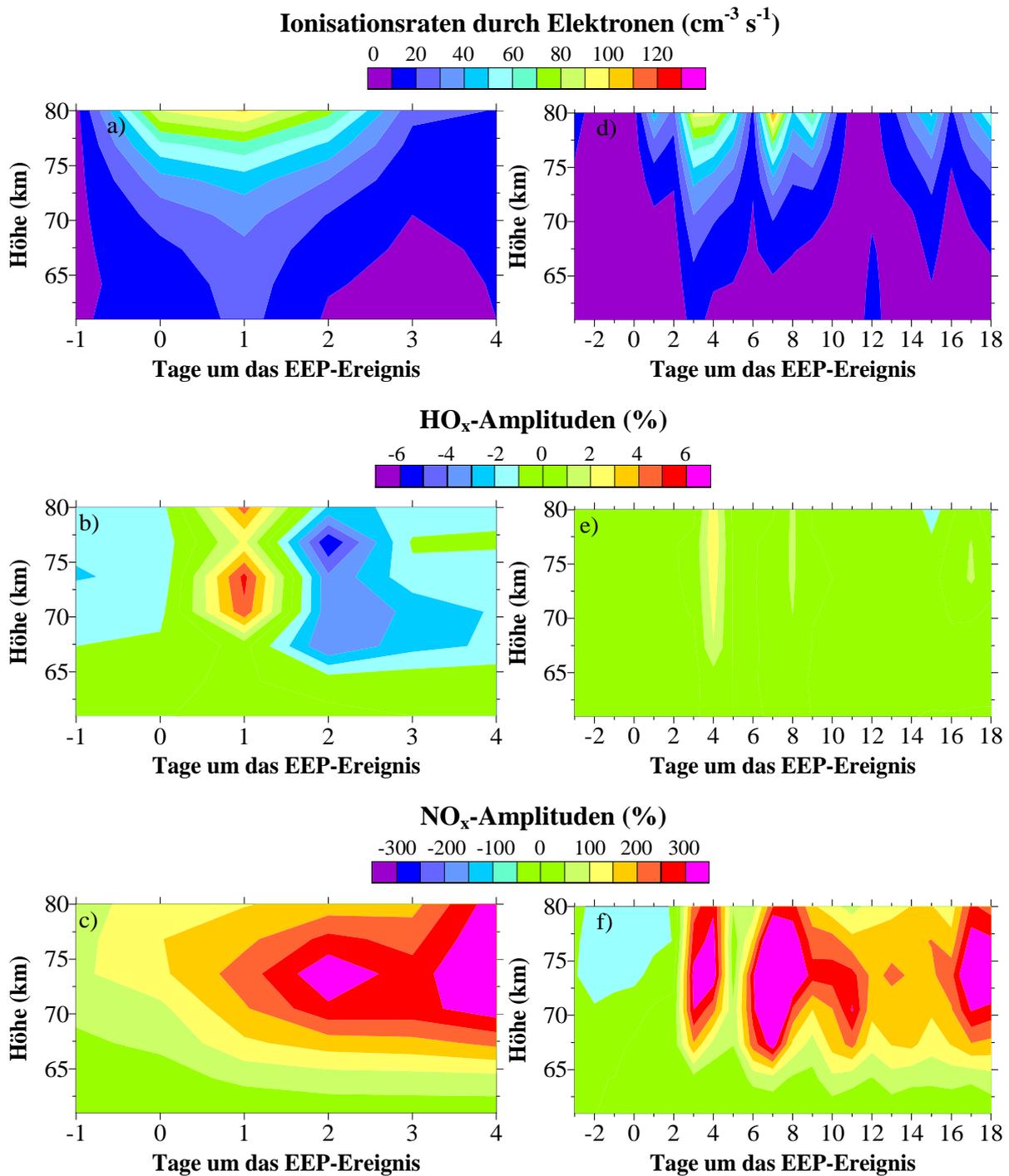
## 9. Auswirkungen von Chemie und Dynamik auf mesosphärisches Ozon

Zur Überprüfung der Ionisationsraten und der chemischen Konsistenz des 3dCTMs wurden die die beiden Ereignisse auch hinsichtlich der zugehörigen AIMOS-Ionisationsraten sowie der isolierten  $\text{HO}_x$ - und  $\text{NO}_x$ -Amplituden des 3dCTMs untersucht. In Abb. 9.7a sind die täglichen Ionisationsraten des AIMOS-Modells für das 1. EEP-Ereignis dargestellt. An den Tagen 0-2 sind erhöhte Werte zu erkennen, wobei das Maximum an Tag 1 auftritt. In diesem Zusammenhang werden  $\text{HO}_x$ -Amplituden von etwa 5% an Tag 1 erreicht (Abb. 9.7b). Somit ist die Bildung von  $\text{HO}_x$  in Phase mit den Ionisationsraten, was mit den Ergebnissen der SEA übereinstimmt (s. Kap. 8.2.2). Eine entsprechende Zunahme an  $\text{NO}_x$  (Abb. 9.7c) ist ebenfalls zu erkennen. Diese ist aber über den gesamten Zeitraum nach dem EEP-Ereignis präsent und weist Amplituden von  $>300\%$  auf. Beim 2. EEP-Ereignis sind in den Ionisationsraten (Abb. 9.7d) um die Tage 3-4, 7-9 und 14-18 erhöhte Werte ersichtlich. Während der ersten beiden Teilereignisse kommt es ebenfalls zur  $\text{HO}_x$ -Bildung mit Erhöhungen von etwa 2% (Abb. 9.7e). Für das 3. Teilereignis ist eine Zunahme von  $\text{HO}_x$  nur am Tag 17 ersichtlich. Bei  $\text{NO}_x$  (Abb. 9.7f) treten hingegen für alle drei Teilereignisse erneut hohe Amplituden von deutlich über 300% auf. Für beide EEP-Ereignisse sind die Ionisationsraten konsistent mit der Stärke und dem zeitlichen Auftreten von  $\text{HO}_x$ , was unter der Berücksichtigung von Akkumulierungseffekten auch für  $\text{NO}_x$  gilt. Hierbei müssen die beiden EEP-Ereignisse aber unabhängig voneinander betrachtet werden, da die  $\text{HO}_x$ - bzw.  $\text{NO}_x$ -Produktion nicht nur von der Ionisation, sondern auch z. B. von der vorhandenen Menge an  $\text{H}_2\text{O}$  (s. Kap. 2.3.1) oder an O (s. Kap. 2.3.2) beeinflusst wird.

Der Vergleich der zeitlichen und räumlichen Muster der isolierten  $\text{HO}_x$ -,  $\text{NO}_x$ - und  $\text{O}_3$ -Amplituden für beide Ereignisse zeigt, dass der simulierte Ozonverlust hauptsächlich auf  $\text{HO}_x$  und weniger auf  $\text{NO}_x$  zurückgeht. Hier spielt insbesondere H die entscheidende Rolle, da die Reaktion von H mit  $\text{O}_3$  um etwa 3 (5) Größenordnungen schneller abläuft als von OH ( $\text{NO}_x$ ) mit  $\text{O}_3$  [Brasseur und Solomon, 2005, Anhang 3]. Des Weiteren ist ein Einfluss von  $\text{NO}_x$  auf  $\text{O}_3$  für das 1. EEP-Ereignis unwahrscheinlich, da nach Tag 3 trotz großer  $\text{NO}_x$ -Amplituden kein weiterer Ozonabbau stattfindet. Dies gilt auch für die ersten beiden Teilereignisse des 2. EEP-Ereignisses. Für das 3. Teilereignis kann allerdings  $\text{HO}_x$  bzw. H nicht die alleinige Ursache für den Ozonabbau sein, da die  $\text{HO}_x$ -Bildung erst 3 Tage nach dem Beginn des Ozonverlustes einsetzt. Letzterer geht hier im Wesentlichen auf Erhöhungen von OH zurück (hier nicht gezeigt). Ein zusätzlicher Einfluss von  $\text{NO}_x$  ist an dieser Stelle zwar unwahrscheinlich, kann aber auch nicht ausgeschlossen werden. Eine weitere Analyse zur Ursache der ausbleibenden Bildung von H, obwohl es zur Entstehung von OH kommt, liegt außerhalb des Rahmens dieser Arbeit.

14. April 2006 SH

14. März 2003 SH



**Abbildung 9.7.** Zeitreihen nach den EEP-Ereignissen am 14. April 2006 (links) und am 14. März 2003 (rechts) in der SH. Die obere Reihe zeigt die täglichen AIMOS-Ionisationsraten durch Elektronen. In der mittleren und untersten Reihe sind die nächtlichen  $\text{HO}_x$ - und  $\text{NO}_x$ -Amplituden bzgl. des 7-Tage-Mittels vor dem Beginn der EEP-Ereignisse zu sehen, welche aus der Differenz zwischen den Amplituden des 3dCTM-MLT\_PT+F-Laufs und des MLT\_Base+F-Laufs resultieren.

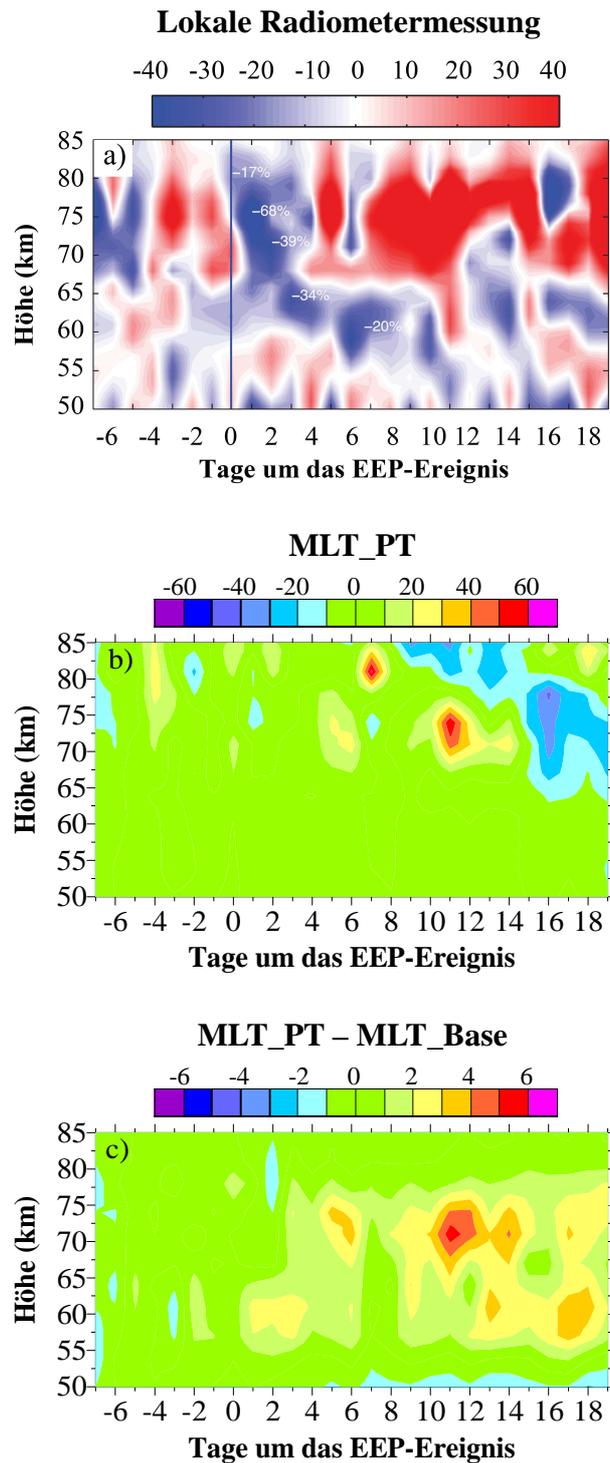
## 9. Auswirkungen von Chemie und Dynamik auf mesosphärisches Ozon

Die Untersuchungen der Spurengase und Ionisationsraten nach den beiden einzelnen Teilchenereignissen bestätigen, dass die im 3dCTM implementierten Reaktionen bzw. Parametrisierungen zur Bildung von  $\text{HO}_x$  und  $\text{NO}_x$  mit den AIMOS-Ionisationsraten qualitativ übereinstimmen. Dies gilt auch für den Ozonabbau durch  $\text{HO}_x$ - und  $\text{NO}_x$ -Verbindungen. Daher scheidet die Chemie als wesentliche Ursache für Abweichungen zwischen den beobachteten und simulierten Ozonverlusten in Abb. 9.6 aus. Im Gegenzug weisen die AIMOS-Ionisationsraten und die beobachteten Elektronenraten (vgl. Abb. 9.6a+d mit Abb. 9.7a+d) besonders für das 2. EEP-Ereignis nach dem 14. März nur eine geringe Übereinstimmung auf. Dies ist hier folglich neben der überschätzten Dynamik der zweite wesentliche Grund für die schlechte Reproduktion der  $\text{O}_3$ -Amplituden dem Teilchenereignis.

Da das 3dCTM im SHW die Ozonverluste qualitativ wiedergibt erfolgte ein weiterer Vergleich mit Daae et al. [2012], welche  $\text{O}_3$  mit Hilfe von Radiometermessungen im Mikrowellenbereich oberhalb von Troll, Antarktis ( $72^\circ\text{S}$ ,  $2^\circ\text{O}$ ) untersuchten. Die beobachteten Ozonschwankungen vom 15. Juli bis 10. August 2009 beziehen sich ebenfalls auf das 7-Tage-Mittel vor Eintreten des EEP-Ereignisses am 22. Juli. Für diesen Messzeitraum standen für das 3dCTM aber keine spektralen Sonnendaten zur Verfügung, weshalb nur ein Vergleich mit konstanten solaren Verhältnissen möglich war. Ausgehend von den Ergebnissen aus Kap. 8.3 wird die generelle Tendenz des Teilcheneffektes durch den 11-jährigen Sonnenzyklus aber nicht beeinflusst. Folglich spricht zumindest nichts gegen einen qualitativen Vergleich der Messungen mit dem 3dCTM-MLT\_PT-Lauf im SHW.

Die Beobachtungen zeigen einen Tag nach Beginn des Elektronenereignisses in etwa 75 km Ozonverluste von bis zu 70% (Abb. 9.8a). In den darauf folgenden Tagen ist eine Abwärtsbewegung dieser Amplituden bis in 60 km ersichtlich, wobei sie sich auf etwa -20% abschwächt. Weiterhin ist der Höhenbereich oberhalb von 70 km ab dem 4. Tag nach dem EEP-Ereignis durch hohe Ozonzunahmen gekennzeichnet. Der Vergleich mit den Simulationen des 3dCTMs zeigt allerdings keine wesentlichen Übereinstimmungen mit den Beobachtungen (Abb. 9.8b). Ursache hierfür ist vermutlich, dass die lokal beobachteten Ozonvariationen auf Grund präzipitierender Teilchen nicht durch das simulierte, zonale Ozonmittel repräsentiert werden können. Dies geht wiederum auf die tatsächlichen Teilchenflüsse bzw. die daraus berechneten AIMOS-Ionisationsraten zurück, welche um bis zu 4 Größenordnungen zwischen dem magnetischen Pol und niedrigeren geomagnetischen Breiten schwanken. Zu beachten ist allerdings die abwärts wandernde Struktur von Ozonverlusten (10-40%) zwischen 85 und 65 km in den 3dCTM-Simulationen. Diese tritt

**O<sub>3</sub>-Amplituden (%) in der SH um den 22. Juli 2009**



**Abbildung 9.8.** Nächtliche O<sub>3</sub>-Amplituden bzgl. des 7-Tage-Mittels vor dem Beginn des EEP-Ereignisses am 22. Juli 2009 in der SH für a) lokale Bodenmessungen [adaptiert von Daae et al., 2012], b) den 3dCTM-MLT\_PT-Lauf und c) der Differenz zwischen den Amplituden des 3dCTM-MLT\_PT-Laufs und des 3dCTM-MLT\_Base-Laufs. Zu beachten ist die individuelle Skalierung.

## 9. Auswirkungen von Chemie und Dynamik auf mesosphärisches Ozon

zwar erst 9-19 Tage nach dem EEP-Ereignis auf, weshalb ein Zusammenhang unwahrscheinlich ist. Dennoch weist diese Struktur eine auffällig starke Ähnlichkeit zu dem absinkenden Ozonverlusten in den Beobachtungen auf. Bei der Betrachtung des isolierten Teilcheneinflusses (Abb. 9.8c) verschwindet die Struktur aber vollständig. Daher geht das Muster im 3dCTM auf dynamische Effekte zurück. Folglich stellt das zeitnahe Auftreten von Teilchenereignissen und Ozonverlusten keinen Beweis für einen tatsächlichen Zusammenhang dar, was auch in Messungen berücksichtigt werden muss.

## 10. Zusammenfassung und Ausblick

Ziel dieser Arbeit war die Quantifizierung des Einflusses von präzipitierenden Teilchen (Elektronen und Protonen) auf polares O<sub>3</sub> in der mittleren Atmosphäre (≈10-110 km). Hierfür wurden Ozonvariationen aus Satelliten- und Modelldaten auf Zeitskalen von wenigen Tagen und mehreren Monaten analysiert. Darüber hinaus dienten die Modellläufe der genaueren Untersuchung der zu Grunde liegenden chemischen und physikalischen Prozesse. Die Ergebnisse dieser Arbeit sind daher wichtig für das Verständnis der Ozonchemie. Außerdem können sich Ozonschwankungen auch auf die Temperatur und den thermisch balancierten Wind auswirken. Die damit verbundenen Änderungen in der atmosphärischen Dynamik betreffen vermutlich nicht nur die mittlere Atmosphäre, sondern könnten sich bis in die Troposphäre ausbreiten. Dort wären dann auch Einflüsse auf saisonale Wettermuster denkbar.

Im ersten Teil dieser Arbeit ging es hauptsächlich um die Identifizierung und Quantifizierung des sogenannten indirekten Teilcheneffekts. Dabei verursacht der verstärkte Eintrag an präzipitierenden Teilchen in die Atmosphäre die Bildung von NO<sub>x</sub> (=N+NO+NO<sub>2</sub>). Dies wird innerhalb des Polarwirbels von der unteren Thermosphäre (≈110 km) bis in die untere Stratosphäre (≈20 km) transportiert, wobei NO<sub>x</sub> dort zum katalytischen Ozonabbau beiträgt. Zur Untersuchung wurden die Ozonstrukturen innerhalb des antarktischen Polarwirbels für 2002–2011 mit Hilfe der Messungen von drei unabhängigen Satelliteninstrumenten (ENVISAT/MIPAS, Odin/SMR, TMIED/SABER) ausgewertet. Dazu wurden 26-Tage-Mittel von gemessenen O<sub>3</sub> vmr von April bis Oktober in 20-70 km Höhe erstellt und diese in Hinblick auf die geomagnetische Aktivität (Ap), solare Einflüsse (F10.7) und dem Eintrag relativistischer Elektronen aus den Strahlungsgürteln (2MeV) zu Beginn des Südwinters (1. April, 1. Mai, 1. Juni) analysiert. Ausgehend von einer Eingruppierung der Ozonwerte in Jahre hoher und niedriger Indexwerte (Ap, F10.7, 2MeV) über den Indexmedian, erfolgte die Berechnung einer prozentualen Ozonabweichung vom jeweiligen Hintergrund (26-Tage-Mittel). Die Untersuchungen wurden um Simulationen mit dem globalen 3-dimensionalen Chemie-Transport-Modell (3dCTM) erweitert.

Durch die Betrachtung der Jahre mit relativ konstanter und schwacher solarer Aktivität (F10.7 ≈70-85×10<sup>-22</sup> W m<sup>-2</sup> Hz<sup>-1</sup>) wurde der direkte solare Einfluss minimiert. Im zugehörigen Zeitraum von 2005 bis 2010 konnte in der Kombination der drei Satellitendatensätze ein Absinken von Ozonverlusten innerhalb des antarktischen Polarwirbels auf Grund

## 10. Zusammenfassung und Ausblick

geomagnetischer Aktivität um den 1. April beobachtet werden. Der Ozonrückgang überschreitet das 95% Signifikanzniveau und erreicht Werte von durchschnittlich 5-10%, wobei er sich von 50 km im späten Mai bis hinunter in 25 km im Oktober ausbreitet. Das beobachtete Ozonsignal stimmt zeitlich und räumlich mit gemessenen signifikanten MIPAS-NO<sub>2</sub>-Zunahmen überein, was einen direkten chemischen Zusammenhang nahelegt. Da hier lediglich sechs Jahre betrachtet wurden, stellen die präsentierten Resultate zwar keinen endgültigen Beweis für den indirekten Teilcheneinfluss auf O<sub>3</sub> dar. Dennoch liefern die präsentierten Messergebnisse über mehrere Jahre zum ersten Mal belastbare Hinweise für die Existenz des indirekten Teilcheneffekts.

Weiterhin konnte gezeigt werden, dass die hohen Ozonzunahmen unterhalb von 30 km ebenfalls mit MIPAS-NO<sub>2</sub>-Verlusten zusammenfallen. Vergleiche mit dem 3dCTM zeigen eine qualitative Übereinstimmung mit den beobachteten Ozonmustern. Außerdem deuten die Modellergebnisse darauf hin, dass bei den Ozonerhöhungen unterhalb von 30 km auch dynamische Vorgänge eine wesentliche Rolle spielen. Die Ozonschwankungen durch relativistische Elektronen aus den Strahlungsgürteln um den 1. April sind zwar wesentlich schwächer ausgeprägt als die Ozonvariationen auf Grund geomagnetischer Aktivität. Die grundsätzliche Übereinstimmung der Strukturen weist aber auf einen gemeinsamen Antriebsmechanismus, der den Indizes zu Grunde liegenden Prozesse, hin. Hierbei handelt es sich vermutlich um Schwankungen in der Stärke des Sonnenwindes.

Im zweiten Teil der Arbeit lag der Fokus auf mesosphärischen Ozonschwankungen innerhalb weniger Tage in hohen Breiten, welche mit HO<sub>x</sub> (=H+OH+HO<sub>2</sub>) assoziiert werden. Konkret wurden Ozonvariationen in Hinblick auf geomagnetischen Aktivität (Ap) sowie einer Abhängigkeit von chemischen (HO<sub>x</sub>, NO<sub>x</sub>) und physikalischen Faktoren (Dynamik) untersucht. Dafür erfolgte eine Analyse der Aura/MLS-Satellitenmessungen für O<sub>3</sub> (OH) in 60-75 km (60-81 km) von August 2004 bis August 2014 (August 2004 bis Dezember 2009). Diese Beobachtungen wurden um die 3dCTM-Simulationen der atmosphärischen Spurengase (O<sub>3</sub>, O(<sup>1</sup>D), H<sub>2</sub>O, H<sub>2</sub>, H, OH, HO<sub>2</sub>, NO, NO<sub>2</sub>) und deren Familien (O<sub>x</sub>, HO<sub>x</sub>, NO<sub>x</sub>) erweitert, welche für die Ozonchemie in 60-133 km Höhe relevant sein können. Der Einfluss der geomagnetischen Aktivität bzw. der präzipitierenden Teilchen wird im 3dCTM über die Ionisationsraten des AIMOS-Modells abgeschätzt. Die 3dCTM-Läufe umfassten den Zeitraum von Januar 2002 bis August 2008. Die Analyse der Satelliten- und Modelldaten bezog sich auf nächtlich und täglich gemittelte Zonalmittel (55°-75° geomagnetischer Breite). Die daraus berechneten Spurengasamplituden repräsentieren die relative Abweichung zum

## 10. Zusammenfassung und Ausblick

entsprechenden Spurengashintergrund (27-Tage-Mittel). Die Untersuchung erfolgte für beide Hemisphären unter Sommer- und Winterbedingungen, welche über die Tagundnachtgleichen definiert wurden.

Die MLS-Beobachtungen zeigen zum ersten Mal ein deutliches 27-Tage-Signal im winterlichen  $O_3$  und OH, welches auf Variationen in Ap und damit auf präzipitierende Teilchen zurückzuführen ist. Die höchsten Ozonverluste (6-7%) treten dabei in 75 km auf, wo sie sich zeitlich und räumlich mit der stärksten OH-Erhöhung (8-14%) überlagern. In dieser Höhe konnten Hinweise dafür gefunden werden, dass die teilcheninduzierte OH-Bildung erst oberhalb einer bestimmten Stärke des geomagnetischen Ereignisses stattfindet. Des Weiteren deuten die Messungen auf einen nicht linearen Zusammenhang zwischen  $O_3$  und OH für relativ schwache geomagnetische Aktivität hin.

Mit Ausnahme von  $O_3$  im NHW wird das gemessene 27-Tage-Signal in winterlichen  $O_3$  und OH vom 3dCTM hinsichtlich der Phase und Höhe der maximalen Amplitude qualitativ wiedergegeben. Außerdem unterstützten die Simulationen die Existenz des beobachteten Schwellwerts in der geomagnetischen Aktivität zur Bildung von OH, sowie den nicht linearen  $O_3$ -OH Zusammenhang. Weitere Vergleiche mit Ergebnissen aus der Fachliteratur zeigen, dass auch das 27-Tage-Signal in NO vom 3dCTM bzgl. seiner Phase und grundsätzlichen Struktur wiedergegeben wird.

Darüber hinaus zeigen die 3dCTM-Ergebnisse vernachlässigbare Auswirkungen der Fotoionisation auf das 27-Tage-Signal in den untersuchten Spurengasen. Dahingegen kommt es durch den 11-jährigen solaren Zyklus über die Veränderung des Spurengashintergrundes zu einer indirekten Beeinflussung des 27-Tage-Signals, was in einer Modulation der teilchenindizierten Spurengasvariationen von 5-10% resultiert. Weiterhin führt die dynamisch induzierte Variabilität der Hintergrundatmosphäre in etwa zu einer Verdoppelung der Ozonverluste, was bei der Betrachtung von mehr als 100 überlagerten Ereignissen deutlich wird. Im Gegensatz zu  $O_3$  zeigen sich in NO und OH relativ geringe Variationen auf Grund der Dynamik, was mit ihrer vergleichsweise kurzen chemischen Lebensdauer zusammenhängt.

Bei der Untersuchung eines einzelnen Teilchenereignisses kam es hingegen zu einer Dämpfung des Ozonabbaus um etwa dieselbe Größenordnung. Daher ist bei einzelnen Teilchenereignissen eine vollständige Überlagerung des ursprünglichen Teilchensignals durch dynamische Variationen ebenfalls denkbar, auch wenn dies in den hier präsentierten Ergebnissen nicht auftritt. Außerdem können Ozonabnahmen im 3dCTM auch durch rein

## 10. Zusammenfassung und Ausblick

dynamische Effekte hervorgerufen werden. Daher sind Ozonverluste und deren Stärke nach einzelnen Teilchenereignissen grundsätzlich mit Vorsicht zu interpretieren, selbst dann, wenn nahezu keine zeitliche Verzögerung zwischen dem Teilchenereignis und dem Ozonrückgang vorliegt. Diese Erkenntnisse sollten auch bei der Interpretation von Messungen beachtet werden.

Alle hier beschriebenen qualitativen Übereinstimmungen zwischen 3dCTM und Beobachtungen beschränken sich aber auf Höhen  $>70$  km, da das AIMOS-Modell keine Elektronen mit einer Energie  $>300$  keV berücksichtigt. Folglich werden die Ionisationsraten und die Spurengasvariationen unterhalb von 70 km im 3dCTM unterschätzt. Über einen längeren Zeitraum von mehreren Jahren (2002-2008) geben die AIMOS Ionisationsraten die relativen Merkmale der geomagnetischen Aktivität wieder. Größere Abweichungen treten hingegen bei der Erfassung einzelner Teilchenereignisse auf. Weitere Vergleiche zwischen Messungen und 3dCTM-Simulationen von OH und NO deuten außerdem auf eine systematische Überschätzung der Ionisationsraten im AIMOS-Modell oberhalb von 70 km hin.

Weitere Analysen in 60-80 km Höhe zeigen einen konsistenten Zusammenhang zwischen AIMOS-Ionisationsraten, der Bildung von HO<sub>x</sub>- und NO<sub>x</sub>-Verbindungen sowie mit dem damit verbundenen Ozonabbau. Dies gilt sowohl für das Mittel über mehr als 100 geomagnetische Ereignisse als auch für einzelne Teilchenereignisse. Folglich bestätigen die Ergebnisse, dass die grundsätzlichen chemischen Prozesse nach Teilchenereignissen durch die Parametrisierung im 3dCTM richtig wiedergegeben werden. Bei weiteren Untersuchungen in diesen Höhen konnten keine belastbaren Hinweise hinsichtlich eines möglichen Einflusses von NO auf O<sub>3</sub> auf Zeitskalen von wenigen Tagen gefunden werden. Größere Unterschiede zwischen dem 3dCTM und Beobachtungen sind vor allem für O<sub>3</sub> im NHW zu erkennen. Diese resultieren wahrscheinlich aus einer Überschätzung des Einflusses der sehr komplexen Dynamik an der Mesopause in der NHW durch das LIMA-Modell.

Die Ergebnisse in dieser Arbeit zeigen einen signifikanten Teilcheneinfluss auf winterliches O<sub>3</sub> in polaren Breiten von durchschnittlich -5 bis -10%, was sowohl für kurzzeitige Schwankungen innerhalb von wenigen Tagen als auch auf saisonalen Zeitskalen gilt. Zukünftige Untersuchungen sollten sich daher mit den Auswirkungen von Ozonabnahmen auf die Temperatur- und Windfelder befassen. Hierfür kommen vor allem Reanalysedaten in Betracht, welche inzwischen einen konsistenten Datensatz über mehrere Dekaden gewährleisten. Allerdings zeigt diese Studie, dass die größten Ozonverluste im polaren Winter

## 10. Zusammenfassung und Ausblick

auftreten. Für diese Regionen existieren aber erst seit ungefähr 10-15 Jahren flächendeckende und durchgehende Messreihen für  $O_3$ , welche aber in die geläufigen Reanalyse-Datensätzen noch nicht integriert sind. Dadurch sind die zugehörigen  $O_3$ -Felder in den Reanalysedaten im Polarwinter weitgehend Modellgetrieben. Somit lassen sich mögliche Schwankungen in Temperatur oder Wind nur schwer auf reelle Ozonvariationen zurückführen. Eine weitere Möglichkeit wäre die Durchführung von Sensitivitätsstudien mit globalen Zirkulations- und Klimamodellen auf der Basis der hier präsentierten Ozonverluste. In diesem Zusammenhang sollten zunächst Änderungen in Temperatur und Wind untersucht werden. Letzterer wirkt sich wiederum auf die räumliche Ausbreitung atmosphärischer Wellen aus, welche die einzelnen atmosphärischen Schichten miteinander koppeln. Die daraus resultierenden möglichen (Rück)-Kopplungsmechanismen auf die Troposphäre könnten auch auf die saisonalen Wettermuster Einfluss nehmen. Gerade der letzte Punkt ist bisher nur unzureichend verstanden.

## Literaturverzeichnis

Allen J. H. (1982), Some commonly used magnetic activity indices: their derivation, meaning and use. in Proceedings of a Workshop on Satellite Drag, editiert von J. A. C. Joselyn, NOAA Space Environment Laboratory, Boulder, CO, 114-134.

Anchordoqui, L., T. Paul, S. Reucroft und J. Swain (2003), Ultrahigh energy cosmic rays: The state of the art before the Auger Observatory, *Int. J. Mod. Phys. A*, 18, 2229-2366, doi:10.1142/S0217751X03013879.

Andersson, M. E., P. T. Verronen, S. Wang, C. J. Rodger, M. A. Clilverd und B. R. Carson (2012), Precipitating radiation belt electrons and enhancements of mesospheric hydroxyl during 2004–2009, *J. Geophys. Res.*, 117, D09304, doi:10.1029/2011JD017246.

Andersson, M. E., P. T. Verronen, C. J. Rodger, M. A. Clilverd und A. Seppälä (2014), Missing driver in the Sun-Earth connection from energetic electron precipitation impacts mesospheric ozone, *Nat. Commun.*, 5:5197, doi:10.1038/ncomms6197.

Andrews, D. G., J. R. Holton und C. B. Leovy (1987), Middle atmospheric dynamics, *Int. Geophys. Ser.*, 40, editiert von R. Dmowska und J. R. Holton, Academic Press, Orlando, Florida, USA.

Azeem, S. M. I., E. R. Talaat, G. G. Sivjee und J. H. Yee (2010), Mesosphere and lower thermosphere anomalies during the 2002 Antarctic stratospheric warming event, *Ann. Geophys.*, 28, 267-276, doi:10.5194/angeo-28-267-2010.

Baldwin, M. P. und T. J. Dunkerton (2001), Stratospheric harbingers of anomalous weather regimes, *Science*, 294, 581-584, doi:10.1126/science.1063315.

Berger, U. (2008), Modeling of middle atmosphere dynamics with LIMA, *J. Atmos. Sol.-Terr. Phys.*, 70, 1170-1200, doi:10.1016/j.jastp.2008.02.004.

Brasseur, G. P. und S. Solomon (2005), *Aeronomy of the Middle Atmosphere*, Atmospheric and oceanographic science library, 32, 3. Ausgabe, editiert von A. M. Lawrence und K. Hamilton, Springer, Dordrecht, Niederlande.

Butchart, N. (2014), The Brewer-Dobson circulation, *Rev. Geophys.*, 52, 157–184, doi:10.1002/2013RG000448.

Carlson, H. C. Jr. und A. Egeland (1995), The aurora and auroral ionosphere, in Introduction to space physics, 459-502, editiert von M. G. Kievlson und C. T. Russel, Cambridge University Press, Cambridge, Großbritannien.

Chapman, S. (1930), A theory of upper atmospheric ozone, R. Meteorol. Soc. Mem., 2, 103-125.

Chree, C. (1913), Some phenomena of sunspots and of terrestrial magnetism at Kew Observatory, Philos. T. Roy. Soc. London, Series A, 212, 75-116.

Daae, M., P. Espy, H. Nesse Tyssøy, D. Newnham, J. Stadsnes und F. Søråas (2012), The effect of energetic electron precipitation on middle mesospheric night-time ozone during and after a moderate geomagnetic storm, Geophys. Res. Lett., 39, L21811, doi:10.1029/2012GL053787.

Damiani, A., M. Storini, M. Laurenza, C. Rafanelli, E. Piervitali und E. G. Cordaro (2006), Southern ozone variations induced by solar particle events during 15 January-5 February, J. Atmos. Solar-Terr. Phys., 68, 2042-2052, doi:10.1016/j.jastp.2006.03.010.

Damiani, A., M. Storini, M. Laurenza und C. Rafanelli (2008), Solar particle effects on minor components of the Polar atmosphere, Ann. Geophys., 26, 361-370, doi:10.5194/angeo-26-361-2008.

Dee, D. P., S. M. Uppala, A. J. Simmons, P. Berrisford, P. Poli, S. Kobayashi, U. Andrae, M. A. Balmaseda, G. Balsamo, P. Bauer, P. Bechtold, A. C. M. Beljaars, L. van de Berg, J. Bidlot, N. Bormann, C. Delsol, R. Dragani, M. Fuentes, A. J. Geer, L. Haimberger, S. B. Healy, H. Hersbach, E. V. Hólm, L. Isaksen, P. Kallberg, M. Köhler, M. Matricardi, A. P. McNally, B. M. Monge-Sanz, J.-J. Morcrette, B.-K. Park, C. Peubey, P. de Rosnay, C. Tavolato, J.-N. Thépaut und F. Vitart (2011), The ERA-Interim reanalysis: configuration and performance of the data assimilation system, Q. J. R. Meteorol. Soc., 137, 553–597, doi:10.1002/qj.828.

Dessler, A. J. und J. A. Fejer (1963), Interpretation of Kp index and M-region geomagnetic storms, Planet. Space Sci., 11, 505-511, doi:10.1016/0032-0633(63)90074-6.

Eckert, E., T. von Clarmann, M. Kiefer, G. P. Stiller, S. Lossow, N. Glatthor, D. A. Degenstein, L. Froidevaux, S. Godin-Beekmann, T. Leblanc, S. McDermid, M. Pastel, W. Steinbrecht, D. P. Swart, K. A. Walker und P. F. Bernath (2014), Drift-corrected trends and periodic variations in MIPAS IMK/IAA ozone measurements, Atmos. Chem. Phys., 14, 2571-2589, doi:10.5194/acp-14-2571-2014.

- Fischer, H., 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. P. Stiller und R. Zander (2008), MIPAS: an instrument for atmospheric and climate research, *Atmos. Chem. Phys.*, 8, 2151–2188, doi:10.5194/acp-8-2151-2008.
- Forbes, J. M. (2007), Dynamics in the thermosphere, *J. Meteo. Soc. Jap.*, 85B, 193-213, doi:<http://doi.org/10.2151/jmsj.85B.193>.
- Friederich, F. (2014a), Auswirkungen präzipitierender Teilchen auf NO und NO<sub>2</sub> der oberen Stratosphäre und unteren Mesosphäre: Messungen des Michelson Interferometer for Passive Atmospheric Sounding (MIPAS), Dissertation, 1-113, Karlsruhe Institut für Technologie, Eggenstein-Leopoldshafen, Deutschland.
- Friederich, F., M. Sinnhuber, B. Funke, T. von Clarmann und J. Orphal (2014b), Local impact of solar variation on NO<sub>2</sub> in the lower mesosphere and upper stratosphere from 2007 to 2012. *Atmos. Chem. Phys.*, 14, 4055-4064, doi:10.5194/acp-14-4055-2014.
- Funke, B., 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 (2005), Retrieval of stratospheric NO<sub>x</sub> 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, doi:10.1029/2004JD005225.
- Funke, B., A. Baumgaertner, M. Calisto, T. Egorova, C. H. Jackman, J. Kieser, A. Krivolutsky, M. López-Puertas, D. R. Marsh, T. Reddmann, E. Rozanov, S.-M. Salmi, M. Sinnhuber, M., G. P. Stiller, P. T. Verronen, S. Versick, S., T. von Clarmann, T. Y. Vyushkova, N. Wieters und J. M. Wissing, (2011), 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, 9089–9139, doi:10.5194/acp-11-9089-2011.
- Funke, B., M. López-Puertas, G. P. Stiller und T. von Clarmann (2014), Mesospheric and stratospheric NO<sub>y</sub> produced by energetic particle precipitation during 2002–2012, *J. Geophys. Res-Atmos.*, 119, 4429-4446, doi:10.1002/2013JD021404.

- Fytterer, T., M. G. Mlynczak, H. Nieder, K. Pérot, M. Sinnhuber, G. Stiller und J. Urban (2015a), Energetic particle induced intra-seasonal variability of ozone inside the Antarctic polar vortex observed in satellite data, *Atmos. Chem. Phys.*, 15, 3327–3338, doi:10.5194/acp-15-3327-2015.
- Fytterer, T., M. L. Santee, M. Sinnhuber und S. Wang (2015b), The 27 day solar rotational effect on mesospheric nighttime OH and O<sub>3</sub> observations induced by geomagnetic activity, *J. Geophys. Res. Space Physics*, 120, doi:10.1002/2015JA021183.
- Fytterer, T. S. Bender, U. Berger, H. Nieder, M. Sinnhuber und J. M. Wissing (2016), Model studies of short-term variations induced in trace gases by particle precipitation in the mesosphere and lower thermosphere, *J. Geophys. Res. Space Physics*, unter Begutachtung.
- Garcia, R. R. und S. Solomon (1985), The effect of breaking gravity waves on the dynamics and chemical composition of the mesosphere and lower thermosphere, *J. Geophys. Res.*, 90, 3850-3868, doi:10.1029/JD090iD02p03850.
- Glatthor, N., T. von Clarmann, H. Fischer, B. Funke, S. Gil-López, U. Grabowski, M. Höpfner, S. Kellmann, A. Linden, M. López-Puertas, G. Mengistu Tsidu, M. Milz, T. Steck, G. P. Stiller und D. Y. Wang (2006), Retrieval of stratospheric ozone profiles from MIPAS/ENVISAT limb emission spectra: a sensitivity study, *Atmos. Chem. Phys.*, 6, 2767–2781, doi:10.5194/acp-6-2767-2006.
- Gray, L. J., J. Beer, M. Geller, J. D. Haigh, M. Lockwood, K. Matthes, U. Cubasch, D. Fleitmann, G. Harrison, L. Hood, J. Luterbacher, G. A. Meehl, D. Shindell, B. van Geel und W. White, (2010), Solar influences on climate, *Rev. Geophys.*, 48, RG4001, doi:10.1029/2009RG000282.
- Haerendel, G., (2001), Auroral acceleration in astrophysical plasmas, *Physics of Plasmas*, 8, 2365, doi:10.1063/1.1342227.
- Hendrickx, K., L. Megner, J. Gumbel, D. E. Siskind, Y. J. Orsolini, H. Nesse Tyssøy und M. Hervig (2015), Observation of the 27 day solar cycles in the production and mesospheric descent of EEP-produced NO, *J. Geophys. Res. Space Physics*, 120, 8978-8988, doi: 10.1002/2015JA021441.
- Huang, F. T., C. A. Reber und J. Austin (1997), Ozone diurnal variations observed by UARS and their model simulation, *J. Geophys. Res.*, 102, 12971–12985, doi: 10.1029/97JD00461.

- Huang, F. T., H. G. Mayr, J. M. Russell III, M. G. Mlynczak und C. A. Reber (2008), Ozone diurnal variations and mean profiles in the mesosphere, lower thermosphere, and stratosphere, based on measurements from SABER on TIMED, *J. Geophys. Res.*, 113, A04307, doi:10.1029/2007JA012739.
- Hughes, W. J. (1995), The magnetopause, magnetotail, and magnetic reconnection, in *Introduction to space physics*, 227-287, editiert von M. G. Kievlson und C. T. Russel, Cambridge University Press, Cambridge, Großbritannien.
- Jackman C. H. und R. D. McPeters (1985), The Response of Ozone to Solar Proton Events During Solar Cycle 21: A Theoretical Interpretation, *J. Geophys. Res.*, 90, 7955-7966, doi:10.1029/JD090iD05p07955.
- Jackman, C. H., R. D. McPeters, G. J. Labow und E. L. Fleming (2001), Northern Hemisphere atmospheric effects due to the July 2000 solar proton event, *Geophys. Res. Lett.*, 28, 2883–2886, doi:10.1029/2001GL013221.
- Jackman, C. H., M. T. DeLand, G. J. Labow, E. L. Fleming, D. K. Weisenstein, M. K. W. Ko, M. Sinnhuber und J. M. Russell III (2005), Neutral atmospheric influences of the solar proton events in October-November 2003, *J. Geophys. Res.*, 110, A09S27, doi:10.1029/2004JA010888.
- Jackman, C. H., D. R. Marsh, F. M. Vitt, R. R. Garcia, C. E. Randall, E. L. Fleming und S. M. Frith (2009), Long-term middle atmospheric influence of very large solar proton events, *J. Geophys. Res.*, 114, D11304, doi:10.1029/2008JD011415.
- Jackman, C. H., C. E. Randall, V. L. Harvey, S. Wang, E. L. Fleming, M. López-Puertas, B. Funke und P. F. Bernath (2014), Middle atmospheric changes caused by the January and March 2012 solar proton events, *Atmos. Chem. Phys.*, 14, 1025-1038, doi:10.5194/acp-14-1025-2014.
- Kallenrode, M.-B. (2010), *Space physics: An introduction to plasmas and particles in the heliosphere and magnetosphere*, 3. Ausgabe, Springer, Heidelberg, Deutschland.
- Kopp, E. L. André und L. G. Smith (1985), Positive ion composition and derived particle heating in the lower auroral ionosphere, *J. Atmos. Terr. Phys.*, 47, NO. 1-3, 301-308.
- Kurt, V., A. Belov, H. Mavromichalaki und M. Gerontidou (2004), Statistical analysis of solar proton events, *Ann. Geophys.*, 22, 2255–2271, doi:10.1029/2004-22-2255.

- Lary, D. J. (1997), Catalytic destruction of stratospheric ozone, *J. Geophys. Res.*, 102, 21515-21526, doi:10.1029/97JD00912.
- Li, F., D.W. Waugh, A. R. Douglass, P. A. Newman, S. E. Strahan, J. Ma, J. E. Nielsen und Q. Liang (2012), Long-term changes in stratospheric age spectra in the 21st century in the Goddard Earth Observing System Chemistry-Climate Model (GEOSCCM), *J. Geophys. Res.*, 117, D20119, doi:10.1029/2012JD017905.
- Livesey, N. J., W. G. Read, L. Froidevaux, A. Lambert, G. L. Manney, H. C. Pumphrey, M. L. Santee, M. J. Schwartz, S. Wang, R. E. Coeld, D. T. Cuddy, R. A. Fuller, R. F. Jarnot, J. H. Jiang, B. W. Knosp, P. C. Stek, P. A. Wagner und D. J. Wu (2013), EOS MLS version 3.3 and 3.4 Level 2 data quality and description document, Technical Support, Jet Propulsion Laboratory, California Institute of Technology, Pasadena, California.
- López-Puertas, M., B. Funke, S. Gil-López, T. von Clarmann, G. P. Stiller, M. Höpfner, S. Kellmann, G. Mengistu Tsidu, H. Fischer und C. H. Jackman (2005), HNO<sub>3</sub>, N<sub>2</sub>O<sub>5</sub>, and ClONO<sub>2</sub> enhancements after the October–November 2003 solar proton events, *J. Geophys. Res.*, 110, A09S44, doi:10.1029/2005JA011051.
- Lübken, F.-J., U. Berger und G. Baumgarten (2013), Temperature trends in the midlatitude summer mesosphere, *J. Geophys. Res. Atmos.*, 118, 13347-13360, doi:10.1002/2013JD020576.
- Luhmann, J. G. (1995), Ionospheres, in *Introduction to space physics*, 183-202, editiert von M. G. Kievlson und C. T. Russel, Cambridge University Press, Cambridge, Großbritannien.
- Manney, G. L., M. J. Schwartz, K. Krüger, M. L. Santee, S. Pawson, J. N. Lee, W. H. Daffer, R. A. Fuller und N. J. Livesey (2009), Aura Microwave Limb Sounder observations of dynamics and transport during the record-breaking 2009 Arctic stratospheric major warming, *Geophysical Research Letter*, 36, L12815, doi: 10.1029/2009GL038586.
- Maus, S., S. Macmillan, T. Chernova, S. Choi, D. Dater, V. Golovkov, V. Lesur, F. Lowes, H. Lühr, W. Mai, S. McLean, N. Olsen, M. Rother, T. Sabaka, A. Thomson und T. Zvereva (2005), The 10th generation international geomagnetic reference field, *Phys. Earth Planet. Inter.*, 151, 320-322, doi:10.1016/j.pepi.2005.03.006.
- McCracken, K. G., G. A. M. Dreschhoff, E. J. Zeller, D. F. Smart und M. A. Shea (2001), Solar cosmic ray events for the period 1561-1994: 1. Identification in polar ice, 1561-1950, *J. Geophys. Res.*, 106, A10, 21585-21598, 10.1029/2000JA000237.

McIntyre, M. E. und T. N. Palmer (1984), The 'surf zone' in the stratosphere, *J. Atmos. Terr. Phys.*, 46, 835-849, doi:10.1016/0021-9169(84)90063-1.

Murtagh, D., U. Frisk, F. Merino, M. Ridal, A. Jonsson, J. Stegman, G. Witt, P. Eriksson, C. Jiménez, G. Megie, J. de la Noë, P. Ricaud, P. Baron, J. R. Pardo, A. Hauchcorne, E. J. Llewellyn, D. A. Degenstein, R. L. Gattinger, N. D. Lloyd, W. F. J. Evans, I. C. McDade, C. S. Haley, C. Sioris, C., C. von Savigny, B. H. Solheim, J. C. McConnell, K. Strong, E. H. Richardson, G. W. Leppelmeier, E. Kyrölä, H. Auvinen und L. Oikarinen (2002), An overview of the Odin atmospheric mission, *Can. J. Phys.*, 80, 309-319, doi:10.1139/p01-157.

Nash, E. R., P. A. Newman, J. E. Rosenfield und M. R. Schoeberl (1996), An objective determination of the polar vortex using Ertel's potential vorticity, *J. Geophys. Res.*, 101, 9471-9478, doi:10.1029/96JD00066.

Nicolet, M. (1965), Ionospheric processes and nitric oxide, *J. Geophys. Res.*, 70(3), 691-701, doi:10.1029/JZ070i003p00691.

Nieder, H., H. Winkler, D. R. Marsh und M. Sinnhuber (2014), NO<sub>x</sub> production due to energetic particle precipitation in the MLT region: Results from ion chemistry model studies, *J. Geophys. Res-Space.*, 119, 2137-2148, doi:10.1002/2013JA019044.

Nieder (2015), Modellstudien zur Untersuchung des Einflusses solarer Prozesse auf die mittlere Atmosphäre, Dissertation, 1-108, Karlsruher Institut für Technologie, Eggenstein-Leopoldshafen, Deutschland.

Pickett, H. M., B. J. Drouin, T. Canty, R. J. Salawitch, R. A. Fuller, V. S. Perun, N. J. Livesey, J. W. Waters, R. A. Stachnik, S. P. Sander, W. A. Traub, K. W. Jucks und K. Minschwaner (2008), Validation of Aura Microwave Limb Sounder OH and HO<sub>2</sub> measurements, *J. Geophys. Res.*, 113, D16S30, doi:10.1029/2007JD008775.

Porter, H. S., C. H. Jackman und A. E. S. Green (1976), Efficiencies for production of atomic nitrogen and oxygen by relativistic proton impact in air, *J. Chem. Phys.*, 65, 154-167, doi:10.1063/1.432812.

Prather, M. J. (1986), Numerical advection by conservation of second-order moments, *J. Geophys. Res.*, 91, 6671-6681, doi:10.1029/JD091iD06p06671.

Preusse, P., S. D. Eckermann, M. Ern, J. Oberheide, R. H. Picard, R. M. Roble, M. Riese, J. M. Russell III und M. G. Mlynczak (2009), Global ray tracing simulations of the SABER gravity wave climatology, *J. Geophys. Res.*, 114, D08126, doi:10.1029/2008JD011214.

- Priest, E. R. (1995), The Sun and its magnetohydrodynamics, in Introduction to space physics, 58-90, editiert von M. G. Kievlson und C. T. Russel, Cambridge University Press, Cambridge, Großbritannien.
- Richardson, I. G., E. W. Cliver und H. V. Cane (2000), Sources of geomagnetic activity over the solar cycle: Relative importance of coronal mass ejections, high-speed streams, and slow solar wind. *J. Geophys. Res. Space Physics*, 105, 18203-18213, doi:10.1029/1999JA000400.
- Randall, C. E., D. W. Rusch, R. M. Bevilacqua und K. W. Hoppel (1998), Polar Ozone And Aerosol Measurement (POAM) II stratospheric NO<sub>2</sub>, 1993-1996, *J. Geophys. Res.*, 103, 28361-28371, doi:10.1029/98JD02092.
- Randall, C. E., V. L. Harvey, C. S. Singleton, S. M. Bailey, P. F. Bernath, M. Codrescu, H. Nakajima und J. M. Russell III (2007), Energetic particle precipitation effects on the Southern Hemisphere stratosphere in 1992–2005, *J. Geophys. Res.*, 112, D08308, doi:10.1029/2006JD007696, 2007.
- Reddmann, T., R. Ruhnke, S. Versick und W. Kouker (2010), Modeling disturbed stratospheric chemistry during solar-induced NO<sub>x</sub> enhancements observed with MIPAS/ENVISAT, *J. Geophys. Res.*, 115, D00I11, doi:10.1029/2009JD012569.
- Rodger, C. J., A. J. Kavanagh, M. A. Clilverd und S. R. Marple (2013), Comparison between POES energetic electron precipitation observations and riometer absorptions: Implications for determining true precipitation fluxes, *J. Geophys. Res. Space Physics*, 118, 7810–7821, doi:10.1002/2013JA019439.
- Rong, P. P., J. M. Russell III, M. G. Mlynczak, E. E. Remsberg, B. T. Marshall, L. L. Gordley und M. López-Puertas (2009), Validation of Thermosphere Ionosphere Mesosphere Energetics and Dynamics/Sounding of the Atmosphere using Broadband Emission Radiometry (TIMED/SABER) v1.07 ozone at 9.6 μm in altitude range 15–70 km, *J. Geophys. Res.*, 114, D04306, doi:10.1029/2008JD010073.
- Rusch, D. W., J. C. Gerard, S. Solomon, P. J. Crutzen und G. C. Reid (1981), The effect of particle precipitation events on the neutral and ion chemistry of the middle atmosphere—I. Odd nitrogen, *Planet. Space Sci.*, 29, 767–774, doi:10.1016/0032-0633(81)90048-9.
- Russell, C. T. (1975), On the possibility of determining interplanetary and solar parameters from geomagnetic records, *Solar Phys.*, 42, 259-269, doi:10.1007/BF00153301.

- Russell, J. M., III, M. G. Mlynczak, L. L. Gordley, J. Tansock und R. Esplin (1999), An overview of the SABER experiment and preliminary calibration results, in *Optical Spectroscopic Techniques and Instrumentation for Atmospheric and Space Research III*, Proc. SPIE Int. Soc. Opt. Eng., vol. 3756, 277– 288, editiert von A. M. Larar, Denver, Colorado, USA.
- Russel, C. T. (2001), Solar wind and interplanetary magnetic field: A tutorial, IN: *Space weather*, P. Song, H. J. Singer und G. L. Siscoe, doi: 10.1029/GM125p0073.
- Ruzmaikin, A., M. L. Santee, M. J. Schwartz, L. Froidevaux und H. M. Pickett (2007), The 27-day variations in stratospheric ozone and temperature: New MLS data, *Geophys. Res. Lett.*, 34, L02819, doi:10.1029/2006GL028419.
- Seppälä, A., C. E. Randall, M. A. Clilverd, E. Rozanov und C. J. Rodger (2009), Geomagnetic activity and polar surface air temperature variability, *J. Geophys. Res.*, 114, A10312, doi:10.1029/2008JA014029.
- Shapiro, A. V., E. Rozanov, A. I. Shapiro, S. Wang, T. Egorova, W. Schmutz und T. Peter (2012), Signature of the 27-day solar rotation cycle in mesospheric OH and H<sub>2</sub>O observed by Aura Microwave Limb Sounder, *Atmos. Chem. Phys.*, 12, 3181 – 3188, doi:10.5194/acp-12-3181-2012.
- Sinnhuber, M., J. P. Burrows, M. P. Chipperfield, C. H. Jackman, M.-B. Kallenrode, K. F. Künzi und M. Quack (2003), A model study of the impact of magnetic field structure on atmospheric composition during solar proton events, *Geophys. Res. Lett.*, 30(15), 1818, doi:10.1029/2003GL017265.
- Sinnhuber, M., S. Kazeminejad und J. M. Wissing (2011), Interannual variation of NO<sub>x</sub> from the lower thermosphere to the upper stratosphere in the years 1991–2005, *J. Geophys. Res.*, 116, A02312, doi:10.1029/2010JA015825.
- Sinnhuber, M., H. Nieder und N. Wieters (2012), Energetic particle precipitation and the chemistry of the mesosphere/lower thermosphere, *Surv. Geophys.*, 33, 1281-1334, doi:10.1007/s10712-9201-3.
- Sinnhuber, M., F. Friederich, S. Bender und J. P. Burrows (2016), The response of mesospheric NO to geomagnetic forcing in 2002-2012 as seen by SCIAMACHY, *J. Geophys. Res. Space Physics*, 121, doi:10.1002/2015JA022284.

- Smith, A. K., V. L. Harvey, M. G. Mlynczak, B. Funke, M. Garcia-Comas, M. Hervig, M. Kaufmann, E. Kyrola, M. Lopez-Puertas, I. McDade, C. E. Randall, J. M. Russell III, P. E. Sheese, M. Shiotani, W. R. Skinner, M. Suzuki und K. A. Walker (2013), Satellite observations of ozone in the upper mesosphere, *J. Geophys. Res. Atmos.*, 118, doi:10.1002/jgrd.50445.
- Sofieva, V. F., E. Kyrölä, P. T. Verronen, A. Seppälä, J. Tamminen, D. R. Marsh, A. K. Smith, J.-L. Bertaux, A. Hauchecorne, F. Dalaudier, D. Fussen, F. Vanhellefont, O. Fanton d'Andon, G. Barrot, M. Guirlet, T. Fehr und L. Saavedra (2009), Spatio-temporal observations of the tertiary ozone maximum, *Atmos. Chem. Phys.*, 9, 4439-4445, doi:10.5194/acp-9-4439-2009.
- Solomon, S. und L. Qian (2005), Solar extreme-ultraviolet irradiance for general circulation models, *J. Geophys. Res.* 110, doi:10.1029/2005JA011160.
- Solomon, S., D. W. Rusch, J. C. Gerard, G. C. Reid und P. J. Crutzen (1981), The effect of particle precipitation events on the neutral and ion chemistry of the middle atmosphere: II. odd hydrogen, *Planet. Space Sci.*, 29, 885–892, doi:10.1016/0032-0633(81)90078-7.
- Solomon, S., P. J. Crutzen und R. G. Roble (1982), Fotochemical coupling between the thermosphere and the lower atmosphere 1. odd nitrogen from 50 to 120 km, *J. Geophys. Res.*, 87, 7206–7220, doi:10.1029/JC087iC09p07206.
- St. Cyr, O. C., R. A. Howard, N. R. Sheeley Jr., S. P. Plunkett, D. J. Michels, S. E. Paswaters, M. J. Koomen, G. M. Simnett, B. J. Thompson, J. B. Gurman, R. Schwenn, D. F. Webb, E. Hildner und P. L. Lamy (2000), Properties of coronal mass ejections' SOHO LASCO observations from January 1996 to June 1998, *J. Geophys. Res.*, 105, A8, 18169-18185, doi: 10.1029/1999JA000381.
- Steck, T., T. von Clarmann, H. Fischer, B. Funke, N. Glatthor, U. Grabowski, M. Höpfner, S. Kellmann, M. Kiefer, A. Linden, M. Milz, G. P. Stiller, D. Y. Wang, M. Allaart, T. Blumenstock, P. von der Gathen, G. Hansen, F. Hase, G. Hochschild, G. Kopp, E. Kyrö, H. Oelhaf, U. Raffalski, A. Redondas Marrero, E. Remsberg, J. M. Russell III, K. Stebel, W. Steinbrecht, G. Wetzell, M. Yela und G. Zhang (2007), Bias determination and precision validation of ozone profiles from MIPAS-Envisat retrieved with the IMK-IAA processor, *Atmos. Chem. Phys.*, 7, 3639-3662, doi:10.5194/acp-7-3639-2007.

## Literaturverzeichnis

Urban, J., N. Lautié, E. Le Flochmoën, C. Jiménez, P. Eriksson, J. de La Noë, E. Dupuy, M. Ekström, L. El Amraoui, U. Frisk, D. Murtagh, M. Olberg und P. Ricaud (2005), Odin/SMR limb observations of stratospheric trace gases: Level 2 processing of ClO, N<sub>2</sub>O, HNO<sub>3</sub>, and O<sub>3</sub>, *J. Geophys. Res.*, 110, D14307, doi:10.1029/2004JD005741.

Verronen, P. T. und R. Lehmann (2015), Enhancement of odd nitrogen modifies mesospheric ozone chemistry during polar winter, *Geophys. Res. Lett.*, 42, 10, 445–10,452, doi:10.1002/2015GL066703.

Verronen, P. T., C. J. Rodger, M. A. Cliverd und S. Wang (2011), First evidence of mesospheric hydroxyl response to electron precipitation from radiation belts, *J. Geophys. Res.*, 116, D07307, doi:10.1029/2010JD014965.

Von Clarmann, T., N. Glatthor, U. Grabowski, M. Höpfner, S. Kellmann, M. Kiefer, A. Linden, G. Mengistu Tsidu, M. Milz, T. Steck, G. P. Stiller, D. Y. Wang, H. Fischer, B. Funke, S. Gil-López und M. López-Puertas (2003), 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), 4736, doi:10.1029/2003JD-003602.

Von Clarmann, T., M. Höpfner, S. Kellmann, A. Linden, S. Chauhan, B. Funke, U. Grabowski, N. Glatthor, M. Kiefer, T. Schieferdecker, G. P. Stiller und S. Versick (2009), Retrieval of temperature, H<sub>2</sub>O, O<sub>3</sub>, HNO<sub>3</sub>, CH<sub>4</sub>, N<sub>2</sub>O, ClONO<sub>2</sub> and ClO from MIPAS reduced resolution nominal mode limb emission measurements, *Atmos. Meas. Tech.*, 2, 159-175, doi:10.5194/amt-2-159-2009.

Waters, J. W., L. Froidevaux, R. S. Harwood, R. F. Jarnot, H. M. Pickett, W. G. Read, P. H. Siegel, R. E. Coeld, M. J. Filipiak, D. A. Flower, J. R. Holden, G. K. Lau, N. J. Livesey, G. L. Manney, H. C. Pumphrey, M. L. Santee, D. L. Wu, D. T. Cuddy, R. R. Lay, M. S. Loo, V. S. Perun., M. J. Schwartz, P. C. Stek, R. P. Thurstans, K. M. Chandra, M. C. Chavez, G. Chen, M. A. Boyles, B. V. Chudasama, R. Dodge, R. A. Fuller, M. A. Girard, J. H. Jiang, Y. Jiang, B.W. Knosp, R. C. LaBelle, J. C. Lam, K. A. Lee, D. Miller, J. E. Oswald, N. C. Patel, D. M. Pukala, O. Quintero, D. M. Sca, W. V. Snyder, M. C. Tope, P. A. Wagner und M. J. Walch (2006), The Earth Observing System Microwave Limb Sounder (EOS MLS) on the Aura satellite, *IEEE Trans. Geosci. Remote Sens.*, 44(5), 1075–1092, doi:10.1109/TGRS.2006.873771.

Winkler, H., C. von Savigny, J. P. Burrows, J. M. Wissing, M. J. Schwartz, A. Lambert und M. García-Comas (2012), Impacts of the January 2005 solar particle event on noctilucent clouds and water at the polar summer mesopause, *Atmos. Chem. Phys.*, 12, 5633-5646, doi:10.5194/acp-12-5633-2012.

Wissing, J. M. und M.-B. Kallenrode (2009), 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, doi:10.1029/2008JA013884.

Wissing, J. M., M.-B. Kallenrode, N. Wieters, H. Winkler und M. Sinnhuber (2010), Atmospheric Ionization Module Osnabrück (AIMOS): 2. Total particle inventory in the October-November 2003 event and ozone, *J. Geophys. Res.*, 115, A02308, doi:10.1029/2009JA014419.

Wolf, R. A. (1995), Magnetospheric configuration, in *Introduction to space physics*, 288-329, editiert von M. G. Kievlson und C. T. Russel, Cambridge University Press, Cambridge, Großbritannien.

Zommerfelds, W. C., K. F. Kunzi, M. E. Summers, R. M. Bevilacqua, D. F. Strobel, M. Allen und W. J. Sawchuck (1989), Diurnal variations of mesospheric ozone obtained by ground-based microwave radiometry, *J. Geophys. Res.*, 94, 12819–12832, doi:10.1029/JD094iD10p12819.

## Danksagung

### **Danksagung**

Ich bedanke mich bei der Helmholtz Gemeinschaft Deutscher Forschungszentren für die Finanzierung meiner Tätigkeit (Grant VH-NG-624). Weiterhin danke ich Miriam Sinnhuber für ihre wertvollen Kommentare und Hinweise zur Anfertigung dieser Arbeit. Außerdem gilt mein Dank den MIPAS-, SMR-, SABER-, MLS-, ERA-Interim- und 3dCTM-Teams für die kostenlose und schnelle Bereitstellung der entsprechenden Datensätze.