

KfK 5183
März 1993

Eignung der Infrarotspektroskopie zur Fernerkundung troposphärischer Spurengase

G. Wetzel
Institut für Meteorologie und Klimaforschung

Kernforschungszentrum Karlsruhe

Kernforschungszentrum Karlsruhe
Institut für Meteorologie und Klimaforschung

KfK 5183

**EIGNUNG DER INFRAROTSPEKTROSKOPIE
ZUR FERNERKUNDUNG
TROPSPHÄRISCHER SPURENGASE ¹⁾**

Gerald Wetzel

Kernforschungszentrum Karlsruhe GmbH, Karlsruhe

¹⁾ Von der Fakultät für Physik der Universität Karlsruhe genehmigte Dissertation

Als Manuskript gedruckt
Für diesen Bericht behalten wir uns alle Rechte vor

Kernforschungszentrum Karlsruhe GmbH
Postfach 3640, 7500 Karlsruhe 1

ISSN 0303-4003

Zusammenfassung

Die räumliche und zeitabhängige Verteilung von klimarelevanten Spurenstoffen in der Troposphäre ist auf globaler Ebene bis heute nur unzureichend bekannt. Die satelliten- und flugzeuggestützte Fernerkundung troposphärischer Spurenstoffe kann einen wichtigen Beitrag zur Verbesserung dieses aktuellen Kenntnisstandes liefern. Die Aufgabe dieser Studie ist deshalb, die Leistungsfähigkeit der Infrarotspektroskopie für die Messung troposphärischer Spurengase zu untersuchen.

Ein wichtiges Ziel dabei ist, Spektralbereiche zu finden, in denen diese Spurengase zur Messung geeignete Absorptionslinien besitzen. Aus solchen spektralen Signaturen können Rückschlüsse auf das Mischungsverhältnis der Gase in der Troposphäre gezogen werden. Dazu wurden synthetische Strahldichtespektren im mittleren Infrarotbereich des elektromagnetischen Spektrums bei einer spektralen Auflösung von etwa 0.1 cm^{-1} für verschiedene Beobachtungsgeometrien berechnet. Die Separierbarkeit von Linien wurde für eine Reihe von Spurengasen wie Wasserdampf, Ozon, Kohlenmonoxid, Methan, Distickstoffoxid, Stickstoffoxide sowie Schwefeldioxid, Fluorchlorkohlenwasserstoffe und andere untersucht. Die Separierung von Spektrallinien wird dabei erschwert durch die starke Wasserdampfabsorption und die Druckverbreiterung der Linien in der Troposphäre. Die separierten spektralen Signaturen der einzelnen Gase wurden hinsichtlich ihrer Sensitivität bezüglich Konzentrationsänderungen der jeweiligen Spurengase sowie Fehlern im Temperaturprofil und der Oberflächentemperatur überprüft. Gemessene Strahldichtespektren enthalten radiometrische Ungenauigkeiten infolge von Eichfehlern und spektralem Rauschen. Die Auswirkung dieser Fehlerquellen auf die Spektren und damit letztendlich auf die Genauigkeit der zu bestimmenden Spurengaskonzentrationen wurde ebenso abgeschätzt wie der Einfluß ungenauer spektroskopischer Daten. Um beurteilen zu können, welche Atmosphärenschichten den größten Beitrag zum Strahldichtesignal liefern, wurden Beitragsfunktionen berechnet.

Besondere Aufmerksamkeit wurde der vergleichenden Betrachtung verschiedener Meßgeometrien gewidmet. Die Vertikalsondierung vom Satelliten aus ist besonders dazu geeignet, troposphärische Spurenstoffe in globalem Rahmen mit hoher zeitlicher und horizontaler Auflösung zu erfassen, und bildet deshalb einen Schwerpunkt im Rahmen der vorliegenden Studie. Als Ergebnis läßt sich festhalten, daß die Troposphärenkonzentration einer Reihe troposphärischer Quellgase, nämlich H_2O , CH_4 , N_2O und CO , mit 5 bis 15-prozentiger Genauigkeit bestimmt werden kann. Dabei sind auch Aussagen über die vertikale Verteilung dieser Gase in der Troposphäre möglich. Bei FCKW-12 ist eine Genauigkeit von 10 bis 20 % für den Gesamtgehalt zu erwarten. Für Ozon gilt, daß der Gesamtsäulengehalt in der Atmosphäre auf 5 bis 15 % genau bestimmt werden kann. Troposphärische O_3 -Konzentrationen können dagegen nur dann aus einem Spektrum abgeleitet werden, wenn zuvor die stratosphärische O_3 -Masse z.B. aus Horizontsondie-

rungsmessungen bestimmt wurde oder starke horizontale Konzentrationsgradienten in der planetaren Grenzschicht auftreten. Im übrigen ist zu erwarten, daß der Gesamtsäuregehalt mit einer Genauigkeit von bis zu 20 % bei HNO_3 bzw. bis zu 50 % bei Gasen wie NO_2 , OCS und CCl_3F ermittelt werden kann.

Bei Gasen mit Konzentrationsmaxima in der Stratosphäre bietet die Nadirsondierung vom Flugzeug Vorteile, weil der beim Satelliten dominante Stratosphärenereffekt entfällt.

Ein bei der Troposphärensondierung auftretendes Problem ist das häufige Vorhandensein von Wolken. Der Einfluß von Cirren auf die Infrarotspektren wurde untersucht. Um Fehler in der Gasmassenbestimmung zu vermeiden, muß dieser von der Dicke und Höhe der Wolken abhängige Einfluß bei der Auswertung der Spektren berücksichtigt werden.

Horizontsondierungsmessungen vom Satelliten aus eignen sich zur Erfassung von Spurenstoffen in der Stratosphäre und der oberen Troposphäre mit guter vertikaler aber begrenzter horizontaler Auflösung. Dabei ist es für eine Reihe von Spurengasen wie H_2O , CH_4 , N_2O , O_3 und FCKW's möglich, deren Konzentration über weite Höhenbereiche mit guter vertikaler Auflösung auf 10 bis 20 % zu bestimmen. Horizontsondierungen in der Troposphäre werden aber im Vergleich zur Nadirsondierung in sehr viel stärkerem Maße durch das Vorhandensein von Wolken behindert.

Eine weitere Meßmethode mit guter vertikaler Auflösung stellt die Aufwärtssondierung mit Blickwinkeln schräg nach oben von einem in verschiedenen Flugniveaus operierenden Flugzeug in der Troposphäre dar. Dabei kann die Masse von Spurenstoffen entlang der optischen Wege oberhalb der Flughöhen aus den Spektren bestimmt werden. Durch Differenzbildung ist es anschließend möglich, die Masse der jeweiligen Gase in den Zwischenschichten zu bestimmen. Einige troposphärische Quellgase mit entsprechend hohem Mischungsverhältnis, insbesondere H_2O , aber auch CO , CH_4 , N_2O und FCKW-12, sind mit dieser differentiellen Meßmethode mit einer Höhenauflösung von etwa 1 km meßbar.

Allgemein ist festzuhalten, daß die Leistungsfähigkeit der Infrarotspektroskopie zur Fernerkundung troposphärischer Spurengase aufgrund der spezifischen Eigenschaften der unteren Atmosphäre, verglichen mit dem Leistungspotential in der Stratosphäre, deutlich eingeschränkt ist.

As far as the spatial and time dependent distributions of climate relevant trace gases in the troposphere on a global level are concerned, only few data have been made available so far. Remote sensing of tropospheric trace gases by means of satellites or aircraft may contribute significantly to the improvement of current knowledge in this field. It is therefore the objective of the present study to investigate the efficiency of infrared spectroscopy for tropospheric trace gas measurement.

Above all it is of crucial importance to find spectral ranges, where the absorption lines of the trace gases can be measured. From these spectral features, conclusions may be drawn with regard to the mixing ratio of the gases in the troposphere. For this purpose, synthetic radiance spectra in the mid infrared of the electromagnetic spectrum were calculated at a spectral resolution of about 0.1 cm^{-1} for various observation geometries. Separability of the lines was studied for a number of trace gases, such as water vapor, ozone, carbon monoxide, methane, nitrous oxide, nitrogen oxides, sulfur dioxide, fluorochlorocarbons, etc. Separation of the spectral lines was complicated by the high water vapor absorption and pressure broadening of the lines in the troposphere. The separated spectral features of the individual gases were then investigated with regard to their sensitivity to changes of the respective trace gas concentrations as well as to errors in the temperature profile and surface temperature. The measured radiance spectra are characterized by radiometric inaccuracies due to calibration errors and spectral noise. The effect of these sources of error on the spectra and, hence, on the accuracy of the trace gas concentrations to be determined were estimated, as was the influence of unprecise spectroscopic data. To determine the atmospheric layers most contributing to the radiance signal, contribution functions were calculated.

Special attention was paid to comparative analysis of different measurement geometries. Vertical sounding from satellites is particularly suited for the determination of tropospheric trace gases on a global level with high time and horizontal resolutions and therefore represents one of the main topics of the present study. As a result it was found out that the tropospheric concentrations of a number of tropospheric source gases, namely, H_2O , CH_4 , N_2O and CO can be determined with an accuracy of 5 to 15 %. Furthermore, statements can be derived with regard to the vertical distribution of these gases in the troposphere. For CFC-12, the integral amount is expected to be measured with an accuracy of 10 to 20 %. The integral column amount of ozone in the atmosphere can be determined with an accuracy of 5 to 15 %. In contrast to this, tropospheric O_3 concentrations can only be derived from a spectrum, when the stratospheric O_3 mass has been determined before, e.g., from horizontal soundings, or high horizontal concentration gradients occur in the planetary boundary layer. As for the rest, it is to be expected

ted that the integral column amount can be determined with an accuracy of up to 20 % for HNO_3 and 50 % for gases like NO_2 , OCS and CCl_3F , respectively.

In case of gases with concentration peaks in the stratosphere, aircraft nadir sounding has a number of advantages, as the stratospheric effect dominant for satellite measurements is no longer encountered. A problem arising during troposphere sounding is the frequent presence of clouds. The influence of cirrus clouds on the IR spectra was investigated. To avoid errors when determining the integral gas mass, this influence depending both on the thickness and the height of the clouds must be taken into account in the evaluation of the spectra.

Horizontal sounding measurements from satellites serve to determine trace gases in the stratosphere and the upper troposphere with a good vertical, but a limited horizontal resolution. The concentrations of numerous trace gases such as H_2O , CH_4 , N_2O , O_3 and CFC's can be determined over large altitude ranges with a good vertical resolution and an accuracy of 10 to 20 % being reached. Compared to nadir sounding, however, horizontal soundings of the troposphere are much more obstructed by the presence of clouds.

Another measurement technique with a good vertical resolution is upward sounding with the viewing angles from the aircraft operating at different flight levels in the troposphere being directed diagonally upwards. In this case, the mass of trace gases along the optical paths above the flight altitudes can be derived from the spectra. Subsequent subtraction allows to determine the mass of the respective gases in the intermediate layers. Some tropospheric source gases with a correspondingly high mixing ratio, above all H_2O , but also CO , CH_4 , N_2O and CFC-12 can be measured with an altitude resolution of about 1 km using this differential measurement technique.

In general it must be noticed that compared with the efficiency potential of infrared spectroscopy in the stratosphere, its suitability for remote sensing of tropospheric trace gases is very limited due to the specific properties of the lower atmosphere.

Inhaltsverzeichnis

1. Einleitung	1
2. Theoretische Grundlagen	3
2.1 Die Strahlungsübertragung	3
2.2 Die Modellierung der Strahlungsübertragung	7
2.3 Fernerkundung in der Troposphäre	10
2.3.1 Problemstellung	10
2.3.2 Beobachtungsgeometrien bei der Satellitensondierung	12
2.4 Die Ableitung von Atmosphärenparametern	14
3. Methodik	17
3.1 Auswahl geeigneter spektraler Signaturen	17
3.2 Ableitung von Information über die vertikale Verteilung der Spurengase	20
3.3 Sensitivität der Signaturen gegenüber Änderungen der Gasmasse und der Temperatur	24
4. Nadirsondierung von Spurengasen vom Satelliten aus	27
4.1 Klimarelevante troposphärische Spurengase	27
4.2 Meßbarkeit von Spurengasen unter Berücksichtigung verschiedener Fehlerquellen	30
4.2.1 Mit hoher Genauigkeit meßbare Spurengase	30
4.2.2 Mit niedriger Genauigkeit meßbare Spurengase	38
4.2.3 Detaillierte Untersuchungen kurzlebiger Gase in der Troposphäre	45
4.2.3.1 Wasserdampf (H ₂ O)	45
4.2.3.2 Kohlenmonoxid (CO)	49
4.2.3.3 Ozon (O ₃)	55
4.2.4 Detaillierte Untersuchungen langlebiger Gase in der Troposphäre	63
4.2.4.1 Methan (CH ₄) und Distickstoffoxid (N ₂ O)	63
4.2.4.2 FCKW-12 (CCl ₂ F ₂)	68
4.2.5 Der Einfluß von Cirruswolken auf die Strahldichtespektren	73
5. Andere Meßgeometrien	81
5.1 Horizontsondierung vom Satelliten aus	81
5.2 Flugzeugsondierung	87
5.2.1 Nadirsondierung	87
5.2.2 Aufwärtssondierung	91
6. Schlußbemerkungen	101

7. Symbole und Abkürzungen	103
7.1 Liste der Symbole	103
7.2 Liste der Abkürzungen	105
8. Literatur	107

Abbildungsverzeichnis

1.	Sondierungsgeometrien (für einen Beobachter innerhalb der Atmosphäre) . . .	4
2.	Profile einiger klimarelevanter Spurengase (mittlere Breiten)	8
3.	Temperaturprofil (mittlere Breiten)	9
4.	Strahldichtespektren mit unterschiedlicher spektraler Auflösung (Nadirsondierung)	18
5.	Separierung von N ₂ O-Signaturen, $\Delta\nu = 0.1 \text{ cm}^{-1}$	19
6.	Gewichts- (links) sowie Beitragsfunktionen (rechts) für die N ₂ O-Signatur bei $\nu = 1264.75 \text{ cm}^{-1}$	20
7.	Beitragsfunktionen für die N ₂ O-Signatur bei $\nu = 1264.75 \text{ cm}^{-1}$ mit $\Delta\nu = 0.1$ cm^{-1}	21
8.	Beitragsfunktionen verschiedener N ₂ O-Signaturen ($\Delta\nu = 0.1 \text{ cm}^{-1}$)	22
9.	Beitrags- (links) sowie Sensitivitätsfunktionen (rechts) der N ₂ O-Signatur bei $\nu = 1309.12 \text{ cm}^{-1}$	23
10.	Temperaturprofile	37
11.	Strahldichtespektren im Bereich der $6.2 \mu\text{m}$ NO ₂ -Bande ($\Delta\nu = 0.05 \text{ cm}^{-1}$) . . .	40
12.	Nadirsondierung im Bereich der $4.85 \mu\text{m}$ OCS-Bande ($\Delta\nu = 0.05 \text{ cm}^{-1}$)	41
13.	Strahldichtespektren im Bereich der $11.3 \mu\text{m}$ HNO ₃ -Bande ($\Delta\nu = 0.1 \text{ cm}^{-1}$) . .	42
14.	Strahldichtespektren im Bereich der $11.8 \mu\text{m}$ CCl ₃ F-Bande ($\Delta\nu = 0.1 \text{ cm}^{-1}$) . .	43
15.	Strahldichtespektren im Bereich nahe $\lambda = 12 \mu\text{m}$	45
16.	Beitragsfunktionen für H ₂ O-Signaturen	46
17.	Strahldichtespektren im Bereich der $4.6 \mu\text{m}$ CO-Bande	50
18.	Differenzspektren im Bereich der CO-Signatur bei $\nu = 2158.30 \text{ cm}^{-1}$	51
19.	Gewichts- (links) sowie Beitragsfunktionen (rechts) für die ausgewählten CO-Signaturen	52
20.	Beitragsfunktionen für das Zentrum der CO-Signatur bei $\Delta\nu = 2158.30 \text{ cm}^{-1}$.	53
21.	Strahldichtespektren im Bereich der $9.6 \mu\text{m}$ O ₃ -Bande	55
22.	Beitragsfunktionen für O ₃ -Signaturen	56
23.	Ozonprofile (Sommer, mittlere Breiten) mit durchschnittlichen bzw. erhöhten Werten in der Grenzschicht	57
24.	Differenzspektrum im Bereich der O ₃ -Signaturen bei $\nu = 1054.95 \text{ cm}^{-1}$ bzw. 1059.40 cm^{-1}	58
25.	Beitragsfunktionen der O ₃ -Signatur bei $\nu = 1059.40 \text{ cm}^{-1}$	60
26.	Differenzspektren im Bereich der O ₃ -Signatur bei $\nu = 1026.50 \text{ cm}^{-1}$	61
27.	Strahldichtespektren im Bereich der $7.7 \mu\text{m}$ CH ₄ - sowie $7.8 \mu\text{m}$ N ₂ O-Bande . .	63
28.	Beitragsfunktionen für CH ₄ -Signaturen	64
29.	Strahldichtespektren im Bereich der $8.55 \mu\text{m}$ N ₂ O-Bande	67
30.	Strahldichtespektren im Bereich der $10.8 \mu\text{m}$ CCl ₂ F ₂ -Bande	69
31.	Strahldichtespektren im Bereich der $8.6 \mu\text{m}$ CCl ₂ F ₂ -Bande	70

32.	Differenzspektren im Bereich der 8.6 μm CCl_2F_2 -Bande ($\Delta\nu = 0.1 \text{ cm}^{-1}$)	71
33.	Beitragsfunktionen für CCl_2F_2 -Signaturen	72
34.	Nadirsondierung im Bereich der 8.6 μm CCl_2F_2 -Bande ($\Delta\nu = 0.05 \text{ cm}^{-1}$)	73
35.	Nadirsondierung mit bzw. ohne Wolken	74
36.	Strahldichtespektren ohne bzw. mit Cirruswolken unterschiedlicher Dicke bei gleicher Basishöhe	75
37.	Strahldichtespektren ohne bzw. mit Cirruswolken gleicher Dicke in unterschiedlichen Höhen	76
38.	Differenzspektren im Bereich der CH_4 -Signatur bei $\nu = 1263.33 \text{ cm}^{-1}$	77
39.	Horizontsondierung mit unterschiedlichen Tangentenhöhen	82
40.	Strahldichtespektren im Bereich der 11.8 μm CCl_3F -Bande, $z_{\text{min}} = 8 \text{ km}$	83
41.	Differenzspektren im Bereich der 11.8 μm CCl_3F -Bande, $z_{\text{min}} = 8 \text{ km}$	84
42.	Beitragsfunktion im Bereich der 11.8 μm CCl_3F -Bande bei $\nu = 846.50 \text{ cm}^{-1}$ ($z_{\text{min}} = 8 \text{ km}$)	85
43.	Nadirsondierungsspektren im Bereich der 9.6 μm O_3 -Bande	87
44.	Differenzspektren im Bereich der O_3 -Signatur bei $\nu = 1026.50 \text{ cm}^{-1}$	88
45.	Beitragsfunktionen für O_3 -Signaturen (Flugzeugsondierung)	89
46.	Geometrie der Aufwärtssondierung vom Flugzeug	91
47.	Spektren im Bereich der 4.6 μm CO -Bande, Elevation = 25°	92
48.	Differenzspektren zwischen verschiedenen Beobachterhöhen	93
49.	Beitragsfunktionen für die CO -Signatur bei $\nu = 2154.60 \text{ cm}^{-1}$	96
50.	Spektren im Bereich der 4.6 μm CO -Bande, $z_{\text{obs}} = 2 \text{ km}$	97
51.	Spektren im Bereich der 9.6 μm O_3 -Bande, Elevation = 5° (bei erhöhter O_3 -Konzentration in der Grenzschicht)	98

Tabellen

1. Gegenüberstellung der Nadir- und Horizontsondierung	13
2. Satelliten-Nadirsondierung (1)	31
3. Satelliten-Nadirsondierung (2)	39
4. Nadirsondierung von troposphärischem H ₂ O	47
5. Ableitung von Information über die vertikale Verteilung von H ₂ O in der Troposphäre	48
6. Nadirsondierung von troposphärischem CO	49
7. Nadirsondierung von O ₃ in der Grenzschicht	59
8. Nadirsondierung von troposphärischem CH ₄	65
9. Ableitung von Information über die vertikale Verteilung von CH ₄ in der Troposphäre	66
10. Nadirsondierung von troposphärischem N ₂ O	68
11. Nadirsondierung von troposphärischem CCl ₂ F ₂	69
12. Nadirsondierung ohne bzw. mit Cirruswolken	78
13. Wolkensensitivität der CH ₄ -Signaturen im Vergleich zu deren Massensensitivität	79
14. Horizontsondierung von CCl ₃ F	86
15. Flugzeug-Nadirsondierung von O ₃ in der Grenzschicht	90
16. CO-Massen bei der Aufwärtssondierung	94
17. Relative Massenänderungen einiger troposphärischer Quellgase bei der Aufwärtssondierung	95

1. Einleitung

Seit Beginn der Industrialisierung im 19. Jahrhundert beeinflusst der Mensch mit seinen Aktivitäten bei der Produktion von Industriegütern und Nahrungsmitteln, sowie der dazu erforderlichen Bereitstellung von Energie, in zunehmendem Maße die Umwelt. Die Atmosphäre ist davon betroffen durch die anthropogene Emission von Aerosolen und Spurengasen, deren Konzentration proportional zu Wirtschaftswachstum und Bevölkerungsentwicklung angestiegen ist.

Aufgrund der chemischen Trägheit und der damit verbundenen langen Lebensdauer vieler Spurengase sowie den natürlichen Bewegungen in der Atmosphäre, ist die Zunahme der Konzentration dieser Gase nicht nur auf den lokalen Entstehungsort und dessen Umgebung begrenzt. Vielmehr hat die Belastung der Atmosphäre mittlerweile globale Bedeutung erlangt. Dabei zeichnen sich zwei Hauptaspekte ab, die Konsequenzen für den Menschen in seinem gewohnten Lebensraum haben können: Die Abnahme der stratosphärischen Ozonschicht und die Zunahme des troposphärischen Ozons, sowie eine mögliche Veränderung des Klimas durch den anthropogen verstärkten Treibhauseffekt infolge der Anreicherung von Spurenstoffen in der unteren Atmosphäre.

Um die für diese Klimaeffekte verantwortlichen Ursachen verstehen und künftige Entwicklungen vorhersagen zu können, ist es erforderlich, die Zusammensetzung der Atmosphäre mit möglichst guter zeitlicher und räumlicher Auflösung zu erfassen.

Diese Zielsetzung läßt sich prinzipiell am besten durch Fernerkundung von hochfliegenden Flugzeugen und Satelliten erreichen. Dabei wird das spezielle optische Verhalten der Spurengase, nämlich deren Vermögen infrarote Strahlung zu absorbieren und zu emittieren, bei der Messung ausgenutzt. Bei Kenntnis dieses Absorptions- und Emissionsverhaltens ermöglicht die Auswertung spektral hochaufgelöster Strahldichtemessungen Rückschlüsse auf die Zusammensetzung der Atmosphäre. Der große Vorteil dieser Meßmethode liegt darin, daß viele im Meßvolumen enthaltenen Spurengase simultan erfaßt werden können.

In den letzten Jahren hat die Entwicklung von leistungsfähigen, sensitiven, spektral hochauflösenden Instrumenten, wie z.B. Fouriertransformationsspektrometer, große Fortschritte gemacht. Das MIPAS¹ - Experiment ist zur Erfassung solcher Spektren im mittleren Infrarot konzipiert worden (FISCHER et al. 1983, OELHAF et al. 1991, ADRIAN et al. 1991, FISCHER 1992). In Modifikationen ist dieses Interferometer für den Einsatz am Boden, im Flugzeug, sowie vom Ballon und von Satelliten geeignet.

¹ Michelson Interferometer für Passive Atmosphärische Sondierung

Außerdem gibt es seit kurzem auch Entwicklungen im Ausland, die auf eine Erfassung von troposphärischen Spurengasen mit satellitengetragenen Fourierspektrometern abzielen. Dazu gehören das amerikanische TES² - Experiment (BEER und GLAVICH 1989), das japanische IMG³ - Projekt (OGAWA et al. 1992), sowie das französisch-italienische IASI⁴ - Experiment.

Allgemein betrachtet hat sich die Infrarotspektroskopie als leistungsfähige Methode zur Messung von zahlreichen Spurengasen in der Stratosphäre erwiesen. Demgegenüber liegen für die Troposphäre lediglich Fernerkundungsmessungen für wenige Spurengase vor. Neben dem in der Troposphäre von allen Gasen am stärksten absorbierenden und daher auch gut meßbaren Wasserdampf, wurden Kohlenmonoxid (REICHLE et al. 1986) und Ozon (FISHMAN et al. 1990) vom Satelliten aus gemessen. Einige wenige Interferometermessungen (REVERCOMB et al. 1990) wurden auch vom Flugzeug aus durchgeführt.

Derartige Messungen haben gezeigt, daß eine Fernerkundung von zumindest einigen Spurengasen auch unter den im Vergleich zur Stratosphäre ungünstigeren meteorologisch-physikalischen Randbedingungen der Troposphäre möglich sein sollte. Eine erste vorläufige Studie (WETZEL 1988, FISCHER et al. 1989) hat dies bestätigt. Die vorliegende Arbeit zielt auf eine fundierte Beurteilung der Leistungsfähigkeit der Infrarotspektroskopie für die genannte Meßaufgabe ab. Dabei ist insbesondere zu klären, welche Spurengase mit welcher Genauigkeit gemessen werden können, wieviele unabhängige Informationen über das Vertikalprofil abzuleiten sind und wie sich besondere meteorologische Situationen auf die Meßbarkeit auswirken.

² Tropospheric Emission Spectrometer

³ Interferometric Monitor for Greenhouse Gases

⁴ Improved Atmospheric Sounding in the Infrared

2. Theoretische Grundlagen

2.1 Die Strahlungsübertragung

Ein von einem Satelliten oder Flugzeug getragenes Spektrometer empfängt im terrestrischen Spektralbereich im allgemeinen die von einer Hintergrundquelle und von der Atmosphäre längs des optischen Weges emittierte elektromagnetische Strahlung.

Die Grundlage zur Berechnung der Strahldichte am Ort des Beobachters ist die integrale Strahlungsübertragungsgleichung. Im Spektralbereich des mittleren Infrarots (Wellenlängenbereich von etwa 4 bis 20 μm) kann die Streuung an Molekülen vernachlässigt werden. Dasselbe gilt für die Streuung an Aerosolen, sofern diese nicht in zu starkem Maße in der Atmosphäre angereichert sind. Weiterhin wird vorausgesetzt, daß sich die Atmosphäre im lokalen thermodynamischen Gleichgewicht (**Local Thermodynamic Equilibrium, LTE**) befindet, was in der hohen Atmosphäre allerdings nicht mehr erfüllt ist. Die Strahlungsübertragungsgleichung zur Berechnung der Strahldichte $L_{\Delta\nu,i}$ im Wellenzahlbereich $\Delta\nu$ lautet für eine durch den Nadirwinkel Θ_i (siehe Abb. 1 auf Seite 4) definierte Blickrichtung:

$$L_{\Delta\nu,i} = \varepsilon_{\Delta\nu,i} B_{\Delta\nu}(T_0) \tau_{\Delta\nu,i}(x_0, x_{\text{obs}}) + \int_{x_0}^{x_{\text{obs}}} B_{\Delta\nu}(T(x)) \frac{\partial \tau_{\Delta\nu,i}(x)}{\partial x} dx \quad (2.1)$$

mit	$\varepsilon_{\Delta\nu}$	Emissionsvermögen der Hintergrundquelle
	$B_{\Delta\nu}$	Planckfunktion
	$\tau_{\Delta\nu}$	über das Intervall $\Delta\nu$ gemittelte Transmission zwischen den Punkten x und x_{obs} , berechnet aus den monochromatischen Transmissionswerten τ_ν
	T	Temperatur
	T_0	Hintergrundtemperatur
	x	Wegkoordinate
	x_0	Ort der Hintergrundquelle
	x_{obs}	Ort des Beobachters

Der erste Term liefert den Beitrag der von der Hintergrundquelle emittierten und von der Atmosphäre geschwächten Strahlung; das Integral beschreibt den aus der Atmosphäre stammenden Anteil der Strahlung.

Im folgenden wird die Wegkoordinate x durch die Höhenkoordinate z ersetzt. In Abhängigkeit des Nadirwinkels Θ wird zwischen dreierlei Sondierungsgeometrien unterschieden.

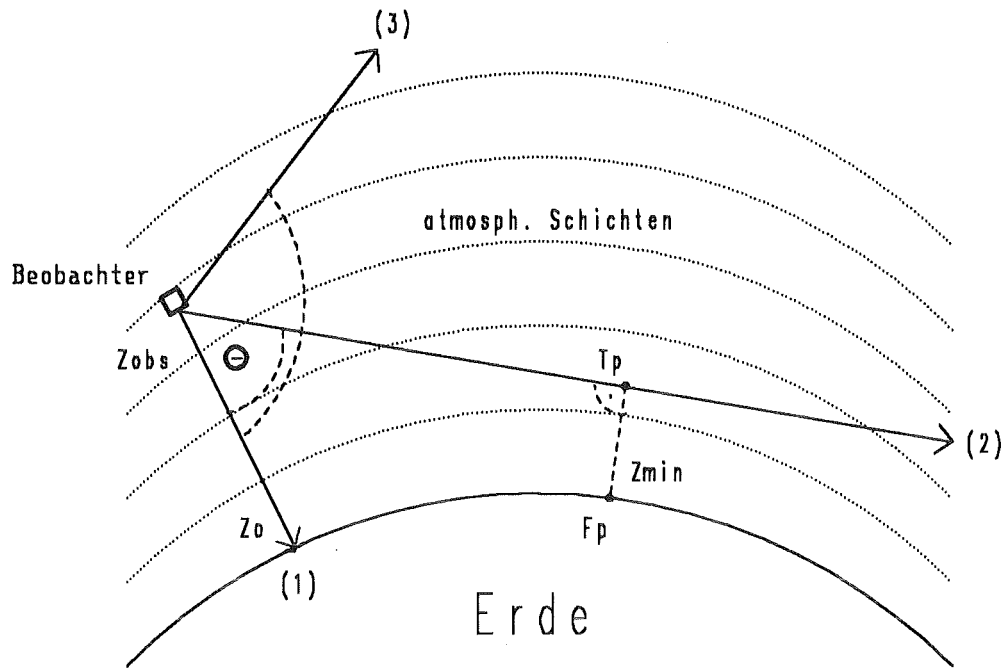


Abbildung 1. Sondierungsgeometrien (für einen Beobachter innerhalb der Atmosphäre).

- Θ = Nadirwinkel (1) = Nadirsondierung (Θ nahe 0°)
- z_{obs} = Beobachterhöhe (2) = Horizontsondierung ($\Theta_{z_{\text{min}}=0} < \Theta \leq 90^\circ$)
- z_{min} = Tangentenhöhe (3) = Aufwärtssondierung ($\Theta > 90^\circ$)
- z_0 = untere Begrenzung (Erdoberfläche)
- F_p = Tangentenfußpunkt
- T_p = Tangentenpunkt

Bei der Nadirsondierung ist Θ so klein, daß der optische Weg vom Beobachter zur Erdoberfläche führt (siehe Abb. 1, opt. Weg (1)). Für die senkrechte Blickrichtung ($\Theta = 0^\circ$) lautet die Strahlungsübertragungsgleichung zwischen den Grenzen z_0 (Boden) und z_{obs} (Beobachter):

$$L_{\Delta\nu} = \varepsilon_{\Delta\nu} B_{\Delta\nu}(T_0) \tau_{\Delta\nu}(z_0, z_{\text{obs}}) + \int_{z_0}^{z_{\text{obs}}} B_{\Delta\nu}(T(z)) \frac{\partial \tau_{\Delta\nu}(z)}{\partial z} dz \quad (2.2)$$

Im Falle einer Horizontsondierung ($\Theta_{z_{\text{min}}=0} < \Theta \leq 90^\circ$) verläuft der optische Weg mit einem kleinsten Abstand, der Tangentenhöhe z_{min} , an der Erdoberfläche vorbei in den Weltraum (siehe Abb. 1, opt. Weg (2)). Sofern nicht gegen einen Himmelskörper wie die Sonne sondiert wird, ist die Hintergrundstrahlung in diesem Fall vernachlässigbar gering. Die Strahlungsübertragungsgleichung lautet dann:

$$L_{\Delta\nu} = \int_{z_{\min}}^{z_{\text{obs}}} B_{\Delta\nu}(T(z)) \frac{\partial \tau_{\Delta\nu}^{\leftarrow}(z)}{\partial z} dz + \int_{\infty}^{z_{\min}} B_{\Delta\nu}(T(z)) \frac{\partial \tau_{\Delta\nu}^{\rightarrow}(z)}{\partial z} dz \quad (2.3)$$

mit $\tau_{\Delta\nu}$ über das Intervall $\Delta\nu$ gemittelte Transmission zwischen dem Beobachter und Punkten auf dem optischen Weg diesseits ($\tau_{\Delta\nu}^{\leftarrow}$) bzw. jenseits ($\tau_{\Delta\nu}^{\rightarrow}$) des Tangentenpunktes T_p , berechnet aus den monochromatischen Transmissionswerten τ_ν
 z_{\min} Tangentenhöhe

Die Strahldichte setzt sich zusammen aus einem Beitrag der Schichten zwischen Beobachter und Tangentenhöhe, sowie einem zweiten der Schichten jenseits der Tangentenhöhe.

Bei einer Aufwärtssondierung mit $\Theta > 90^\circ$ (siehe Abb. 1 auf Seite 4, opt. Weg (3)) nimmt die Strahlungsübertragungsgleichung, wiederum bei Vernachlässigung der Hintergrundstrahlung, folgende Form an:

$$L_{\Delta\nu} = \int_{\infty}^{z_{\text{obs}}} B_{\Delta\nu}(T(z)) \frac{\partial \tau_{\Delta\nu}(z)}{\partial z} dz \quad (2.4)$$

Die Transmission τ_ν an der Stelle ν berechnet sich für einen schrägen Weg durch die Atmosphäre zwischen den Höhen z_1 und z_2 folgendermaßen:

$$\tau_\nu = \exp \left\{ - \sum_{g=1}^G \int_{z_1}^{z_2} \sigma_{\nu,g}(p(z), T(z)) \frac{dm_g(z)}{dz} dz \right\} \quad (2.5)$$

mit G Anzahl der absorbierenden Gase
 $\sigma_{\nu,g}$ monochromatischer Massenabsorptionskoeffizient des Gases g
 p Druck
 m_g Masse des Gases g längs des optischen Weges

Die Absorbermasse m_g längs des optischen Weges kann aus den Profilen der Gasmischungsverhältnisse, der Temperatur und des Drucks berechnet werden (GALLERY et al. 1983; v. CLARMANN 1986).

Die monochromatischen Massenabsorptionskoeffizienten $\sigma_{\nu,g}$ lassen sich als Summe der Anteile aller Absorptionslinien des Gases g an der spektralen Stelle ν berechnen:

$$\sigma_{\nu,g}(p, T) = \sum_{n=1}^{N_g} S_{g,n}(T, E_{0,g,n}) f(\nu - \nu_{0,g,n}, \alpha_{g,n}(p, T)) \quad (2.6)$$

mit	N_g	Anzahl der Absorptionslinien des Moleküls g
	$S_{g,n}$	Linienintensität
	$E_{0,g,n}$	Energie des unteren Anregungszustands der Linien des Moleküls g
	f	Profilfunktion
	$\nu_{0,g,n}$	Wellenzahl des Linienzentrums
	$\alpha_{g,n}$	Halbwertsbreite der Linien

Die Abhängigkeit der Intensität und Form der Linien von Druck und Temperatur muß dabei berücksichtigt werden. Dazu notwendig ist die Kenntnis der spektroskopischen Daten der Gase, wie Linienintensitäten, Linienzentren, die Halbwertsbreiten und Energien des unteren Anregungszustands des jeweiligen Moleküls, bezogen auf Normalbedingungen. Sind diese spektroskopischen Parameter nur unzureichend bekannt, können stattdessen auch aus Labormessungen bestimmte Wirkungsquerschnitte verwendet werden.

Der in den Gleichungen (2.2), (2.3) und (2.4) enthaltene Term

$$f_B = B_{\Delta\nu}(T) \frac{\partial \tau_{\Delta\nu}(z)}{\partial z} \quad (2.7)$$

wird als Beitragsfunktion (f_B) bezeichnet.

Der Gradient

$$f_G = \frac{\partial \tau_{\Delta\nu}(z)}{\partial z} \quad (2.8)$$

wird Gewichtsfunktion (f_G) genannt.

Die Gewichtsfunktion beschreibt die Änderung der Transmission mit der Höhe längs des optischen Weges. Der Funktionsverlauf wird im wesentlichen von der Massenverteilung der beteiligten Gase bestimmt. Bei der Beitragsfunktion geht neben der Massenverteilung in starkem Maße auch die Temperaturabhängigkeit der Planckfunktion ein. Daher stellt sie die höhenabhängige Verteilung der emittierten Strahlung dar. Bei einer isothermen Atmosphäre oder bei einer geringen Temperaturabhängigkeit der Planck-

funktion gilt dies auch für die Gewichtsfunktion, da in diesen besonderen Fällen die Höhenabhängigkeit beider Funktionen qualitativ gleich ist.

2.2 Die Modellierung der Strahlungsübertragung

Für die Strahldichteberechnungen wurde der Algorithmus FASCOD²⁵ verwendet (CLOUGH et al. 1986). Dabei werden die Gleichungen (2.1), (2.5) sowie (2.6) für eine Modellatmosphäre mit endlich vielen, als homogen bezüglich der Gasmasse, der Temperatur und des Druckes angenommenen Schichten, numerisch gelöst (CLOUGH et al. 1981, 1986). Die Annahme der horizontalen Homogenität kann bei starken horizontalen Variationen der oben genannten Größen zu Fehlern in der Massenberechnung längs des optischen Weges führen. Im Modell kann ein in einer Schicht emittiertes Photon frühestens in der nächsten Schicht wieder absorbiert werden, während es in Wirklichkeit bereits vom nächstbesten Molekül mit den passenden Absorptionseigenschaften absorbiert werden könnte. Es muß daher ein brauchbarer Kompromiß zwischen der Genauigkeit der Strahldichteberechnung (möglichst viele Schichten) und der Rechenzeit (möglichst wenige Schichten) gefunden werden.

Für den Fall, daß hohe Atmosphärenschichten einen wesentlichen Beitrag zur Gesamtstrahldichte liefern und somit die Bedingung des lokalen thermodynamischen Gleichgewichts nicht mehr erfüllt ist (OELHAF und FISCHER 1989), hält das Programm Korrekturmöglichkeiten bereit.

Das Strahlungsübertragungsmodell rechnet mit einem infinitesimal dünnen Sehstrahl durch die Atmosphärenschichten, wobei die Refraktion des Strahls berücksichtigt wird. Dagegen empfängt ein Meßgerät ein Mischsignal aus unendlich vielen, mit unterschiedlicher Gewichtung eingehenden infinitesimalen Einzelstrahlen innerhalb eines Gesichtsfeldes, das durch den Öffnungswinkel bestimmt wird. Dies verursacht ebenso Verschmiereffekte im Spektrum (ABBAS und GUO 1985, WEGNER 1991), wie ein zeitlich nicht konstantes Meßvolumen, das beispielsweise bei schnell bewegten Meßgeräteträgern wie Satelliten oder Flugzeugen, zu beachten ist.

Um Rechenzeit zu sparen, werden bei der Berechnung der Absorptionskoeffizienten verschiedene Vereinfachungen angenommen (CLOUGH et al. 1986). Vor allem die Berechnung der sich mit der Höhe ändernden Profilkfunktionen der Spektrallinien, sowie die Berücksichtigung der Linienflügel weit entfernter Spektrallinien, sind davon betroffen. Wechselwirkungen eng benachbarter Übergänge ("Line-Mixing"-Effekte) werden in dieser Programmversion nicht berücksichtigt.

⁵ Fast Atmospheric Signature CODE 2

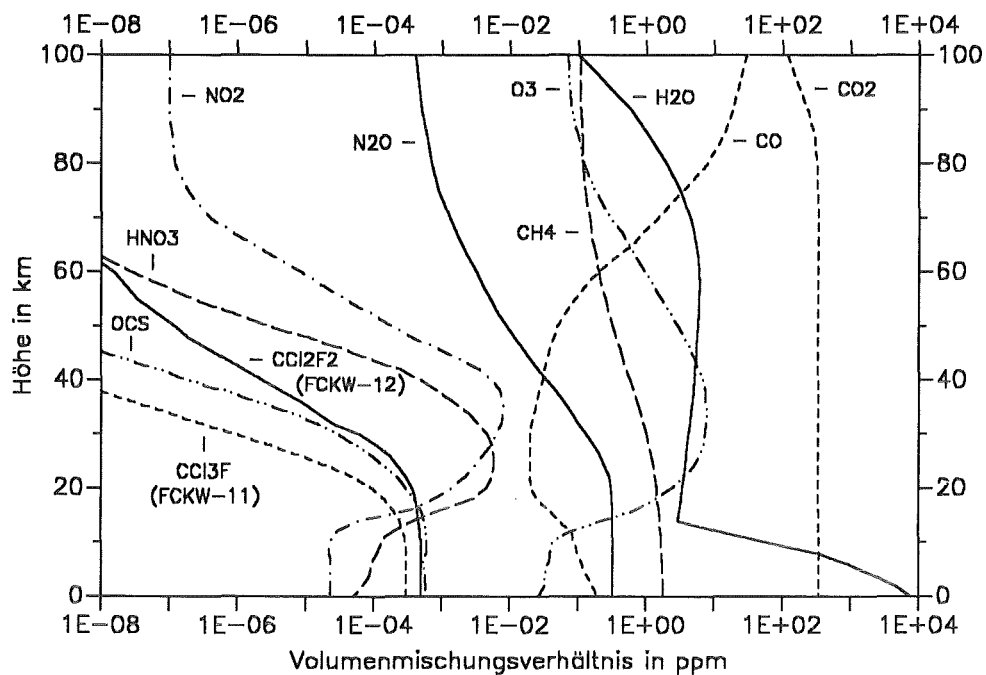


Abbildung 2. Profile einiger klimarelevanter Spurengase (mittlere Breiten). Dargestellt sind Standardprofile, die jeweils einen mittleren Zustand repräsentieren.

Bezüglich der korrekten Modellierung des Wasserdampf-Kontinuums gibt es derzeit noch keine einheitliche Theorie, die diese schwach wellenlängenabhängige Absorption bzw. Emission in zufriedenstellendem Maße beschreibt (ADRIAN 1990). FASCOD2 verwendet ein an die Messungen von BURCH und GRYVNAK (1980) empirisch angepaßtes Kontinuum.

Um Gase berücksichtigen zu können, die im Rahmen der allgemeinen Umweltproblematik (z.B. anthropogener Treibhauseffekt, Ozonloch) eine Rolle spielen, wurde das Originalprogramm dahingehend modifiziert, daß auch eine Reihe schwerer Moleküle, wie beispielsweise die bedeutenden Fluorchlorkohlenwasserstoffe CCl₃F (FCKW-11) und CCl₂F₂ (FCKW-12), bei den Berechnungen der Strahlungsübertragung berücksichtigt werden.

Infolge dieser Erweiterungen sind Vertikalprofile von derzeit 35 Molekülen im Atmosphärenmodell enthalten. In Abb. 2 ist ein Teil der bei den Rechnungen verwendeten Gasprofile dargestellt. Die Profile repräsentieren standardisierte Bedingungen in mittleren Breitengraden. Zugrundegelegt wurde dabei die U.S. Standardatmosphäre von 1976, die Zahlenwerte wurden jedoch mit Hilfe von neueren Meßergebnissen (WMO 1985, ZANDER et al. 1987) aktualisiert und durch Trendaussagen auf Werte entsprechend dem Jahr 1990 extrapoliert. Das bei den Rechnungen zumeist benutzte Tempera-

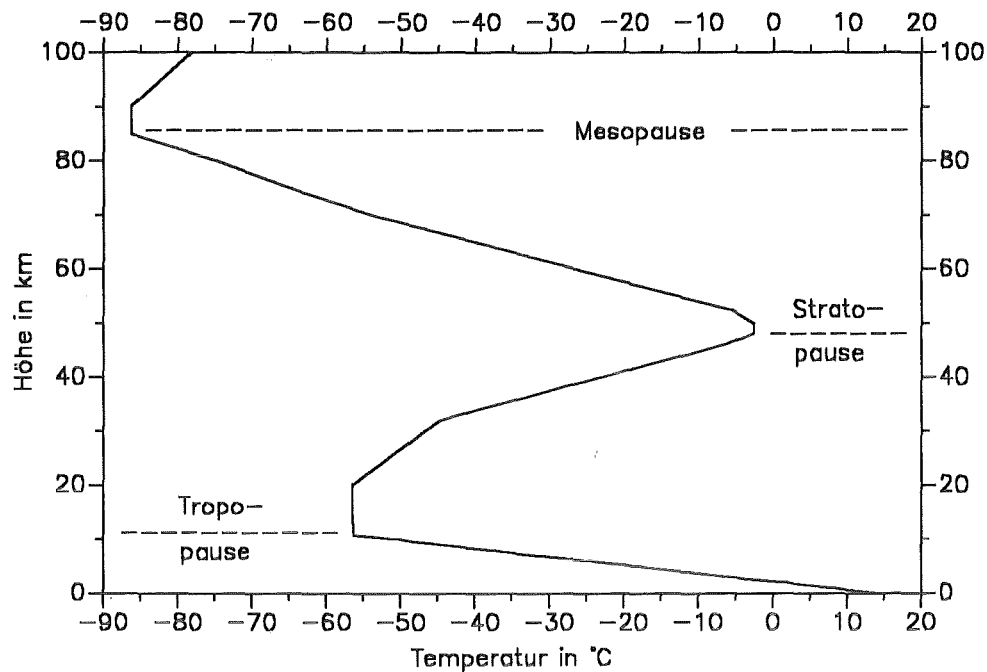


Abbildung 3. Temperaturprofil (mittlere Breiten). Dargestellt ist ein Standardprofil, das einen mittleren Zustand repräsentiert.

turprofil (siehe Abb. 3) entspricht ebenfalls den oben genannten jahreszeitlichen und geographischen Bedingungen.

Die Grundlage für die Strahldichteberechnungen bilden die HITRAN⁶ - Liniendaten (ROTHMAN et al. 1987, 1991), die durch empirische Liniendaten (BROWN et al. 1987) der schweren Moleküle ergänzt wurden. Im Bereich der FCKW-12-Bande nahe 11 μm wird dagegen mit Wirkungsquerschnitten gerechnet, die bei sechs verschiedenen Temperaturen gemessen wurden (MASSIE et al. 1991).

Das Strahlungsübertragungsprogramm FASCOD2 zeichnet sich vor allem durch seine vielseitige Verwendbarkeit sowie seine Schnelligkeit aus. So ist dieses Modell nicht nur für jede beliebige Beobachtungsgeometrie anwendbar, sondern es kann auch die Extinktion durch Aerosole, Regen und Wolken, näherungsweise simuliert werden (KNEIZYS et al. 1983). Der für Cirren berechnete Extinktionskoeffizient ist dabei proportional der Wolkendicke und wird im infraroten Spektralbereich als wellenlängenunabhängig angesehen. Die letztgenannte Annahme ist als grobe Näherung zu verstehen, denn

⁶ High TRANsmission

Messungen und Modellrechnungen deuten auf zum Teil größere wellenlängenabhängige Variationen des Extinktionskoeffizienten hin (SMITH et al. 1992). Demgegenüber wird die Wellenlängenabhängigkeit des Aerosol-Extinktionskoeffizienten berücksichtigt. Aufgrund der Tatsache, daß für diese Arbeit sehr viele und verschiedenartige Rechnungen durchgeführt werden mußten, wurde der FASCOD2-Algorithmus anderen exakteren, aber langsameren Algorithmen vorgezogen. Internationale Vergleichsrechnungen im Rahmen des ITRA⁷ - Workshops (FISCHER et al. 1988) haben gezeigt, daß dieses Modell für die hier durchgeführte Anwendung brauchbare Ergebnisse liefert.

2.3 Fernerkundung in der Troposphäre

In den vorangegangenen Kapiteln wurden Grundlagen der Zusammenhänge zwischen dem Strahlungsfeld und der Verteilung der Spurengase sowie der Temperatur in der Atmosphäre dargestellt.

Das übergeordnete wissenschaftliche Ziel ist eine möglichst kontinuierliche Messung troposphärischer Spurenstoffe mit guter horizontaler und vertikaler Auflösung bei möglichst globaler Überdeckung. Um dieses hochgesteckte Ziel zu erreichen, bietet sich als Meßgeräteträger in erster Linie der Satellit oder mit Einschränkungen auch das Flugzeug an.

2.3.1 Problemstellung

Die Fernerkundung troposphärischer Spurenstoffe wird erschwert durch spezifische Eigenschaften der unteren Atmosphäre.

Das schwerwiegendste Problem ist das Vorhandensein von Wolken, die eine Sondierung der dahinterliegenden atmosphärischen Schichten im infraroten Spektralbereich häufig unmöglich machen. Bei einer Verwendung von polarumlaufenden Satelliten als Instrumententräger mit hoher räumlicher Überdeckungsrate finden sich jedoch für viele Gebiete der Erde wolkenfreie Episoden innerhalb von einigen Tagen.

Ein Problem das bei der Nadirsondierung auftritt, ist die im Vergleich zur Atmosphäre meist warme und daher stark strahlende Erdoberfläche als Hintergrund des interessierenden Atmosphärensignals. Bei starken Absorptionslinien spielt das Bodensignal eine untergeordnete Rolle, ansonsten ist der Einfluß des in den Gleichungen (2.1) und (2.2) enthaltenen Bodenemissionsterms $\varepsilon_{\Delta\nu} B_{\Delta\nu}(T_0)$ auf das Spektrum recht groß. Das sich mit

⁷ Intercomparison of Transmittance and Radiance Algorithms

der Oberfläche verändernde Emissionsvermögen $\varepsilon_{\Delta\nu}$ ist nicht nur stark von der Wellenlänge abhängig, sondern ändert sich außerdem mit der Blickrichtung. So variiert das Emissionsvermögen von Land- und Wasseroberflächen im Bereich von 8 bis 13 μm zwischen etwa 0.8 und 0.98 (KRIEBEL und KOEPKE 1985). Über Landflächen ist auch die Variabilität der Oberflächentemperatur T_0 recht hoch. Im Gegensatz zum Emissionsvermögen geht die Oberflächentemperatur über die Planckfunktion $B_{\Delta\nu}(T_0)$ nicht linear in den Emissionsterm $\varepsilon_{\Delta\nu}B_{\Delta\nu}(T_0)$ ein. Bei einer Wellenlänge von $\lambda = 15 \mu\text{m}$ ist $B \sim T_0^4$. Bei $\lambda = 4 \mu\text{m}$ gilt sogar näherungsweise $B \sim T_0^5$. Sofern $\varepsilon_{\Delta\nu}$ bekannt ist, kann die Oberflächentemperatur aus Strahldichtemessungen in spektralen Bereichen bestimmt werden, in denen die Atmosphäre besonders durchlässig ist. Derartige "Fensterbereiche" befinden sich im mittleren Infrarot zwischen 8 und 13 μm Wellenlänge. Bei Messungen mit Radiometern können Genauigkeiten von etwa 1.6 K über Land (REUTTER et al. 1993) und 0.5 bis 0.3 K über Wasser (SINGH 1984) erreicht werden. Radiometer messen dabei die integrale Strahldichte über einen breiten spektralen Bereich (z.B. $\Delta\nu = 56 \text{ cm}^{-1}$ beim Kanal 5 des AVHRR⁸ -2 Radiometers des NOAA⁹ -7 Satelliten), in dem sich immer zahlreiche, wenn auch verhältnismäßig schwache Spektrallinien befinden. Mit hochauflösenden Spektrometern wie MIPAS ist es jedoch möglich, die Bodenemission über Strahldichtemessungen in Bereichen mit relativ schwacher Kontinuumsabsorption zwischen den Spektrallinien zu bestimmen. Daher ist zu erwarten, daß mit Spektrometern im Vergleich zu Radiometern höhere Genauigkeiten erzielt werden können.

Ein Aspekt, der sämtliche Sondierungen in der Troposphäre betrifft, ist die speziell in der unteren Troposphäre stark wirksame Druckverbreiterung der Spektrallinien. Die Halbwertsbreite der Linien ist dort um etwa einen Faktor 100 größer als in der oberen Stratosphäre. Im Vergleich zu Sondierungen in der Stratosphäre ist es daher schwieriger, spektrale Signaturen zu finden, die im wesentlichen nur Informationen über ein zu untersuchendes Gas enthalten. Häufig findet man daher Mischsignaturen, die Beiträge mehrerer Gase enthalten.

Das am stärksten absorbierende Molekül in der Troposphäre ist der Wasserdampf. Wie aus Abb. 2 auf Seite 8 zu ersehen ist, nimmt das H_2O -Volumenmischungsverhältnis in der Troposphäre nach unten hin stark zu und erreicht auf dem Meeresniveau Werte von mehr als 1 %. In einer vertikalen Säule durch die Atmosphäre befinden sich deshalb ungefähr 99.9 % aller H_2O -Moleküle im Bereich der Troposphäre zwischen 0 und 11 km. Neben den Absorptionsbanden, die nahezu den gesamten Spektralbereich des mittleren Infrarots abdecken (stärkste Bande bei 6.3 μm), besitzt der Wasserdampf auch eine aus-

⁸ **Advanced Very High Resolution Radiometer**

⁹ **National Oceanic and Atmospheric Administration**

geprägte Kontinuumsabsorption und beeinflusst die Troposphärenfernerkundung daher in starkem Maße.

2.3.2 Beobachtungsgeometrien bei der Satellitensondierung

Bei einer Beobachtung vom Satelliten aus sind zweierlei Sondierungsgeometrien möglich. In Tabelle 1 auf Seite 13 sind die Vor- und Nachteile der Nadir- und Horizontsondierung in der Troposphäre aufgelistet. In der linken Spalte der Tabelle sind diejenigen Eigenschaften aufgetragen, die als Vorteile zu werten sind. Die tabellarische Gegenüberstellung deutet auf eine Bevorzugung der Nadirsondierung hin, zumal die erste Forderung nach einer großen Absorbermasse im optischen Weg, die bei der Horizontsondierung erfüllt ist, sich bei den spezifischen Eigenschaften der unteren Atmosphäre auch als Nachteil erweisen kann. So führt der optische Weg bei einer Horizontsondierung vom Satelliten mit einer Minimalhöhe von 5 km auf einer Länge von ca. 585 km durch die Troposphäre (Tropopausenhöhe bei 11 km). Bei einer für mittlere Breiten repräsentativen Standardatmosphäre befinden sich dann um einen Faktor 12.5 mehr H₂O-Moleküle entlang dieses Weges als bei einer Nadirsondierung senkrecht nach unten durch die Troposphäre. Dies führt zu einer starken Maskierung des Spektrums durch den Wasserdampf, die um so stärker wird, je länger der Weg durch die tieferen Troposphärenschichten, d.h. je kleiner die Minimalhöhe wird.

Bei diesen langen optischen Wegen durch die Troposphäre ist außerdem die Wahrscheinlichkeit recht hoch, daß sich Wolken entlang dieses Weges befinden. Im allgemeinen ist der Einfluß von Wolken auf ein gemessenes Spektrum nur dann gering, wenn es sich entweder um ziemlich transparente Wolken (dünne Cirren) handelt, oder sie sich auf dem optischen Weg weit jenseits des Tangentenpunktes befinden und ihre Emissionstemperatur niedrig ist. Somit kann die Horizontsondierungstechnik in der Troposphäre nur bei weitgehend wolkenlosen Verhältnissen angewandt werden. Bei einer Nadirsondierung hingegen ist es bei durchbrochener Bewölkung möglich, zwischen den Wolken hindurch zu sondieren. Die horizontale Ausdehnung der erforderlichen Wolkenlücken wird dabei durch die Größe und die infolge der Flugbewegung räumliche Verlagerung des Gesichtsfeldes des Spektrometers während der Messung festgelegt. Der Durchmesser des Gesichtsfeldes ist abhängig von der Entfernung zum Meßgerät und dem Öffnungswinkel. Bei einer Satellitensondierung (Flughöhe: 800 km) beträgt der Durchmesser des Gesichtsfeldes in der Troposphäre meist einige Kilometer.

Diese gute horizontale Auflösung steht im Gegensatz zur relativ schlechten vertikalen Auflösung der Nadirsondierung. Die Beitragsfunktionen (Gl. 2.7), die ein Maß für die vertikale Auflösung darstellen, besitzen recht große Halbwertsbreiten. Bei einer horizontalen Sondierung sind die Verhältnisse genau umgekehrt. Hier kommt, rein geometrisch bedingt, ein großer Anteil der gemessenen Strahlung aus den massenreichen Schichten nahe der Tangentenhöhe, was zu einer guten vertikalen Auflösung führt. Dazu erforder-

lich ist aber eine genaue Messung des Nadirwinkels, denn bei einer angenommenen Flughöhe von 800 km würde eine Meßunsicherheit des Nadirwinkels von 0.01° eine Schwankungsbreite der Tangentenhöhe in der Troposphäre von mehr als 500 m hervorrufen. Interferometer wie MIPAS (Satellitenversion) erreichen derartige Genauigkeiten in der Winkelmessung. Daneben besteht die Möglichkeit, Tangentenhöhen mit brauchbarer Genauigkeit aus dem Spektrum direkt abzuleiten (LINDEN 1991).

vorteilhafte Eigenschaft:	wird erfüllt bei der	
	Nadirsondierung	Horizontsondierung
große Absorbermasse im optischen Weg	nein	ja
anwendbar auch bei durchbrochener Bewölkung	ja	nein
gute vertikale Auflösung	nein	ja
gute horizontale Auflösung	ja	nein
geringe Anforderungen an die Nadirwinkelmessung	ja	nein
gutes Signal-zu-Rausch-Verhältnis	ja	ja
viele Spurengase erfaßbar	nein	nein

Tabelle 1. Gegenüberstellung der Nadir- und Horizontsondierung. Gültig für Messungen in der Troposphäre im infraroten Spektralbereich

Zusammenfassend ist zu bemerken, daß sich Horizontsondierungsspektren im allgemeinen besser dazu eignen, die vertikale Verteilung von Spurenstoffen zu erfassen, während sich die Nadirsondierung besser für eine Erfassung der Gase mit guter horizontaler Auflösung eignet. Trotz des allgemein guten Signal-zu-Rausch-Verhältnisses bei der Troposphärensondierung, können aufgrund der spezifischen Eigenschaften der unteren Atmosphäre nur verhältnismäßig wenig Spurengase gemessen werden. Aufgrund des Wolkenproblems sowie der starken Absorption des Wasserdampfes ist die Nadirsondierung zumindest für die Bereiche der unteren und mittleren Troposphäre die

geeigneter Meßgeometrie. Deshalb wurde bei den Untersuchungen im Rahmen dieser Studie ein Schwerpunkt auf die Nadirsondierung gelegt.

2.4 Die Ableitung von Atmosphärenparametern

Der in Kapitel 2.2 beschriebene Strahlungsübertragungsalgorithmus FASCOD2 berechnet Strahldichtespektren für vorgegebene Atmosphärenmodelle. Mit dem Inversionsprogramm RAT¹⁰ (v. CLARMANN 1990), welches den FASCOD2-Algorithmus als Unterprogramm enthält, ist es möglich, den umgekehrten Weg zu beschreiten; d.h. von einem gemessenen Spektrum können Rückschlüsse auf Parameter des Atmosphärenmodells, wie die Temperatur T und das Volumenmischungsverhältnis $c_{v,g}$ der Gase gezogen werden. Dazu ist es erforderlich, das gemessene mit einem berechneten Spektrum zu vergleichen und das berechnete Spektrum durch Variation oben genannter Parameter des Atmosphärenmodells in einem iterativen Prozeß solange dem gemessenen anzupassen, bis der Unterschied zwischen beiden Spektren minimal wird.

Diese Unterschiede beruhen aber im allgemeinen nicht nur auf falsch angenommenen Atmosphärenparametern bei der Rechnung. Die gemessenen Spektren können beispielsweise sowohl bezüglich der Intensität (Bias) als auch der Frequenz um einen konstanten Betrag verschoben sein. Häufig stimmt auch die bei der Rechnung angenommene spektrale Auflösung nicht mit der tatsächlichen Auflösung der Messung überein. Deshalb können beim Anpassen der Spektren auch solche Parameter variiert werden. Die Anpassung selbst erfolgt mittels statistischer Optimierungsverfahren, wie der **Methode der kleinsten Quadrate** der Abweichungen. Für die Summe Q der Quadrate der Differenzen zwischen gemessenen und berechneten spektralen Strahldichten gilt:

$$Q(P_i) = \sum_{m=1}^M (L_{m,me} - L_{m,re})^2 \quad (2.9)$$

mit	P_i	anzupassende Parameter
	M	Anzahl der Stützstellen im Spektrum
	$L_{m,me}$	gemessene spektrale Strahldichte an der Stützstelle m
	$L_{m,re}$	berechnete spektrale Strahldichte an der Stützstelle m

Dabei dient Q als Kriterium für die Güte der Anpassung. Die Anpassung der Spektren ist um so besser, je kleiner Q wird.

¹⁰ Retrieval of Atmospheric Trace Gas Profiles

Die gemessenen Spektren sind unter anderem durch die eigenemittierte Strahlung des Meßgerätes, die auf den Detektor trifft, verrauscht. Das bedeutet, daß jeder Meßwert der spektralen Strahldichte $L_{\Delta\nu}$ mit einem statistischen Fehler behaftet ist. In RAT kann dieses Rauschen simuliert werden. Die Verteilungsfunktion von ideal verrauschten Meßwerten $L_{\Delta\nu}$ ist eine Gaußfunktion, die ihr Maximum beim wahren Wert $L_{\Delta\nu,w}$ hat. Die Methode von BOX und MULLER (1958) gestattet es, einen mittels eines Zufallszahlengenerators gewonnenen Satz gleichverteilter Zufallszahlen im Intervall $[0,1]$ in einen Satz gaußverteilter Zufallszahlen zu transformieren (v. CLARMANN 1990). Aufgrund dieses simulierten Meßfehlers kommt es bei der Inversion zu Parameterwerten, die von den wahren Daten um einen Differenzbetrag abweichen.

Das Programmpaket RAT wurde in erster Linie für Anwendungen im Bereich der Horizontsondierung konzipiert. Mit geeigneten Inversionsmethoden ist es dabei möglich, nicht nur ein Spektrum anzupassen, sondern es können Inversionsprobleme gelöst werden, bei denen n verschiedene Spektren bei n verschiedenen Nadirwinkeln ($\Theta_n \leq 90^\circ$) mit den dazugehörigen Tangentenhöhen zur Verfügung stehen. Dabei gibt es Verfahren, die sukzessive ein Spektrum nach dem anderen bearbeiten, wie beispielsweise das sogenannte **Onion-Peeling-Verfahren** (McKEE et al. 1969, RUSSEL und DRAYSON 1972, GOLDMAN und SAUNDERS 1979). Das **Global-Fit-Verfahren** (CARLOTTI 1988) dagegen ist eine Methode, bei der die Inversion für die gesamte Atmosphäre simultan durchgeführt wird.

Neben dem hauptsächlichen Anwendungsgebiet der Horizontsondierung ist der Inversionsalgorithmus auch im Aufwärtssondierungs- sowie im Nadirsondierungsmodus anwendbar. Bei der Nadirsondierung stellt die Erdoberfläche eine Strahlungsquelle hinter der Atmosphäre dar. Das Emissionsvermögen ε und die Temperatur T_0 der Oberfläche beeinflussen dabei das Spektrum häufig in starkem Maße. Aufgrund der großen Variabilität dieser Parameter über Landflächen ist es daher im allgemeinen notwendig, den Einfluß dieser Parameter beim Anpassen von Spektren zu berücksichtigen. Die in RAT enthaltenen Auswerteverfahren für die Horizontsondierung sind verhältnismäßig aufwendig. Die Inversionsprozedur für die Nadirsondierung ist bislang verhältnismäßig einfach angelegt. Im Rahmen dieser Studie dient dieses Inversionsverfahren als Mittel, um Aussagen über die Meßbarkeit von Spurengasen zu erhalten und Fehler in den Gasprofilen abzuschätzen. Soll ein berechnetes an ein gemessenes Spektrum durch die Veränderung eines Parameters der Modellatmosphäre, also beispielsweise durch die Variation des Mischungsverhältnisses $c_{v,g}$ eines Gases g angepaßt werden, so kann $c_{v,g}$ in den Schichten zwischen dem Beobachter z_{obs} und dem Fußpunkt z_0 mit einem in allen Schichten konstanten Faktor multipliziert werden. Die Form des Ausgangsprofils bleibt dabei also erhalten. Das Mischungsverhältnis muß jedoch nicht zwangsläufig in allen Schichten zwischen Beobachter und Fußpunkt verändert werden, denn es ist möglich, entsprechend der Beitragsfunktion (Gl. 2.7) Teilbereiche des Atmosphärenmodells aus-

zuwählen, die einen relevanten Beitrag zu einer ausgewählten Signatur im Spektrum liefern. Über eine solche Anpassung von Teilbereichen ist es möglich, auch die ursprüngliche Form des Ausgangsprofils entsprechend zu ändern.

3. Methodik

Im Rahmen dieser Studie wurde aus den in Kap. 2.3.2 genannten Gründen ein Schwerpunkt auf die Leistungsfähigkeit der Infrarotspektroskopie bei der Nadirsondierung vom Satelliten aus gelegt. In den folgenden Kapiteln wird daher am Beispiel einer Nadirsondierung von N_2O die Vorgehensweise bei den durchgeführten Untersuchungen beschrieben.

3.1 Auswahl geeigneter spektraler Signaturen

Ein gemessenes Strahldichtespektrum enthält im allgemeinen Informationen mehrerer atmosphärischer Parameter (z.B. Temperatur, Spurengaskonzentrationen, Aerosolgehalt). Um Konzentrationen einzelner Spurengase mit guter Genauigkeit ableiten zu können, ist es erforderlich, die im Spektrum enthaltene Information über die Zusammensetzung eines Gases in der Atmosphäre von der Restinformation zu trennen. Es sollten daher Spektralbereiche vorhanden sein, in denen diese Moleküle geeignete Linien aufweisen. Der Idealfall ist erreicht, wenn eine spektrale Signatur im wesentlichen nur von einem einzigen Gas erzeugt wird. Eine ideale Signatur reagiert also nur auf Änderungen der Konzentration eines Gases und ist invariant gegenüber Konzentrationsänderungen der übrigen Gase. Um diesem Idealfall möglichst nahe zu kommen, ist eine genügend hohe spektrale Auflösung bei der Messung erforderlich. Dieser Gesichtspunkt wird mit dem Einsatz spektral hochauflösender Meßgeräte, wie Fouriertransformationsspektrometer, erfüllt.

Abb. 4 auf Seite 18 zeigt ein simuliertes Nadirsondierungsspektrum¹¹ im Bereich der starken N_2O - und CH_4 -Banden mit Zentren nahe 7.8 bzw. 7.7 μm . Die Linienzentren treten bei dieser Sondierungsgeometrie fast ausschließlich als Minima im Spektrum hervor. Das bedeutet, die verhältnismäßig kräftige Hintergrundstrahlung des warmen Erdbodens wird im Linienzentrum stärker absorbiert als im Flügelbereich. Das gemessene Strahldichtesignal enthält daher im Zentrum einen größeren Anteil aus der relativ kalten Atmosphäre emittierter Strahlung als im Flügel. Je höher die spektrale Auflösung gewählt wird, desto deutlicher treten Strukturen im Spektrum hervor. Bei einer Auflösung von $\Delta\nu = 0.6 \text{ cm}^{-1}$ (Kurve 4) ist es nicht möglich, die markierten N_2O - und CH_4 -Linien zu trennen. Der Grenzfall für die Separierung ist hier $\Delta\nu = 0.3 \text{ cm}^{-1}$ (Kurve 3). Eine bessere Separierung der Linien und damit letztendlich eine höhere Genauigkeit bei der Bestimmung der Gasmasse liefern die Auflösungen $\Delta\nu = 0.1 \text{ cm}^{-1}$ (Kurve 2) bzw. $\Delta\nu = 0.05 \text{ cm}^{-1}$ (Kurve 1). Eine weitere Steigerung der spektralen Auflösung bringt für tropo-

¹¹ Nadirwinkel $\Theta = 0^\circ$, wenn nichts anderes angegeben

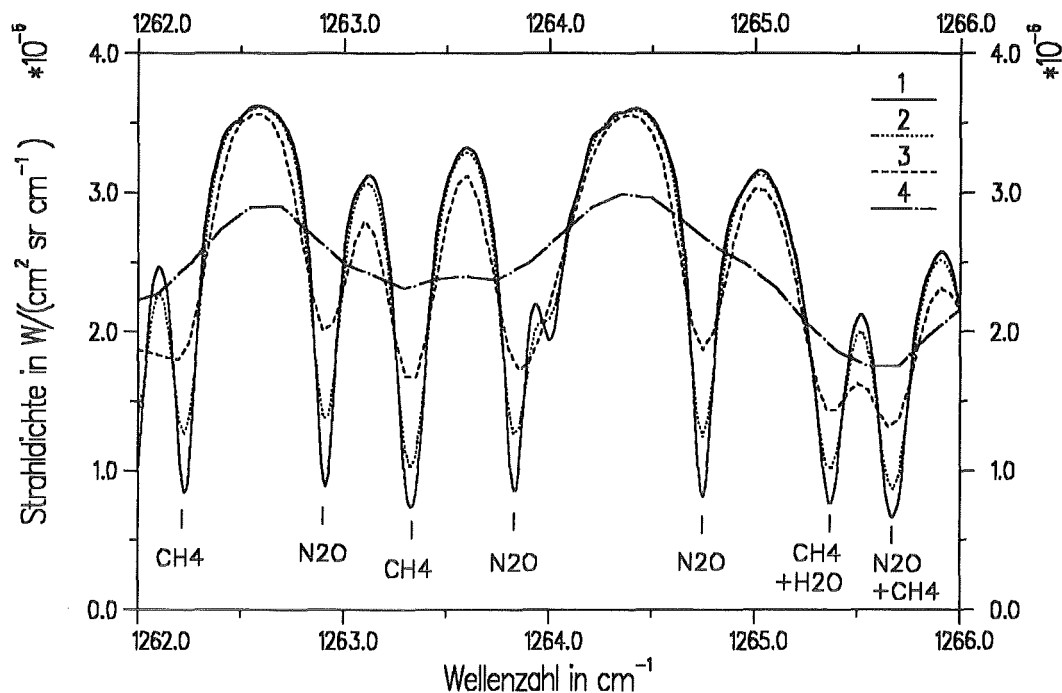


Abbildung 4. Strahllichtespektren mit unterschiedlicher spektraler Auflösung (Nadirsondierung).

1: $\Delta v = 0.05 \text{ cm}^{-1}$

2: $\Delta v = 0.10 \text{ cm}^{-1}$

3: $\Delta v = 0.30 \text{ cm}^{-1}$

4: $\Delta v = 0.60 \text{ cm}^{-1}$

Die Linienzentren treten bei der Nadirsondierung als Minima aus dem Spektrum hervor. Je höher die spektrale Auflösung gewählt wurde, desto deutlicher sind Strukturen im Spektrum erkennbar.

sphärische Fernerkundungsmessungen in den meisten Fällen keine Vorteile, da aufgrund der speziell in der unteren Troposphäre stark wirksamen Druckverbreiterung die Halbwertsbreiten der Spektrallinien im Größenordnungsbereich der letztgenannten Auflösungen liegen.

Ungünstiger sind die Verhältnisse, wenn trotz genügend hoher spektraler Auflösung (0.05 bis 0.1 cm^{-1}) keine reinen Signaturen separierbar sind. Solche Mischsignaturen, bei denen zwar immer noch das gesuchte Gas dominant sein kann, setzen sich aus Beiträgen mehrerer Gase zusammen. Beispielsweise werden die Signaturen mit Zentren bei 1265.36 bzw. 1265.67 cm^{-1} aus Beiträgen von Spektrallinien der Gase CH_4 und H_2O bzw. N_2O und CH_4 gebildet (siehe Abb. 4).

In einem ersten Schritt werden deshalb in ausgesuchten Spektralintervallen Gas für Gas synthetische Nadirsondierungsspektren berechnet. Die Separierbarkeit einer Signatur des interessierenden Gases wird unter Berücksichtigung aller sonstigen im ausge-

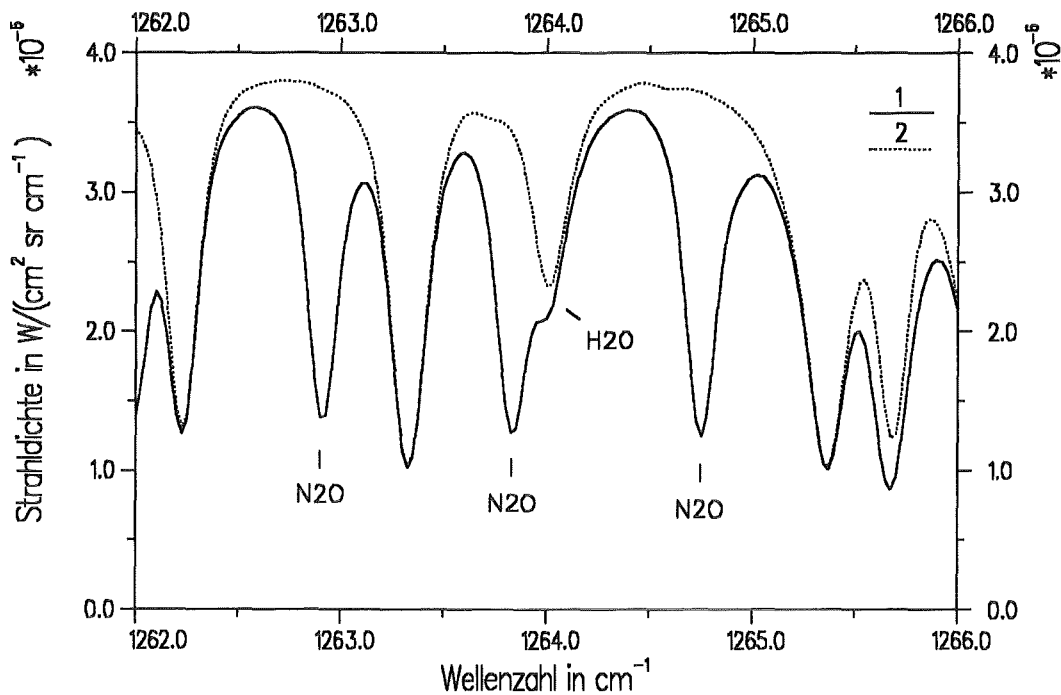


Abbildung 5. Separierung von N₂O-Signaturen, $\Delta\nu = 0.1 \text{ cm}^{-1}$.

1: alle Gase

2: alle Gase ohne N₂O

Die Signaturen bei 1262.90 und 1264.75 cm^{-1} sind gut separiert. Die Signatur bei 1263.83 cm^{-1} enthält Beiträge des Gases H₂O.

wählten Spektralintervall optisch aktiven Spurenstoffe geprüft. Der Beitrag eines Einzelgases ist gut zu erkennen, wenn man das Gesamtspektrum aller Gase und ein Spektrum aller Gase ohne das gewünschte Einzelgas darstellt. Abb. 5 zeigt dies am Beispiel von N₂O. Während die N₂O-Signaturen bei 1262.90 und 1264.75 cm^{-1} recht gut separiert sind, enthält die Signatur bei 1263.83 cm^{-1} in ihrem kurzwelligen Flügelbereich starke Beiträge des Gases H₂O. Neben N₂O findet man im mittleren infraroten Spektralbereich bei der Auflösung von $\Delta\nu = 0.1 \text{ cm}^{-1}$ gut separierte Signaturen auch für weitere Gase wie H₂O, O₃, CH₄, CO, CCl₂F₂ und andere. Wenn der Beitrag zum Strahlendichtespektrum sich weniger in einzelnen Signaturen sondern in einer Art Quasi-Kontinuum zeigt, so kann es auch sinnvoll sein, einen größeren Spektralbereich in die Betrachtungen mit einzubeziehen, um den Beitrag des gewünschten Gases herauszufiltern.

3.2 Ableitung von Information über die vertikale Verteilung der Spurengase

In einem zweiten Schritt wird untersucht, welche Atmosphärenbereiche den größten Beitrag zu einem gemessenen Signal beisteuern. Die Gewichtsfunktion (Gl. 2.8) und insbesondere die Beitragsfunktion (Gl. 2.7) geben darüber Auskunft.

Abb. 6 (links) zeigt Gewichtsfunktionen für das Zentrum der N_2O -Signatur bei 1264.75 cm^{-1} für unterschiedliche spektrale Auflösungen. Dargestellt ist hier lediglich der Beitrag des Gases N_2O . Das Funktionsmaximum ist dabei auf den Wert 1 normiert was bedeutet, daß die Funktionen mit unterschiedlichen Faktoren skaliert wurden. Die Lage der Funktionsmaxima variiert mit der spektralen Auflösung. Je feiner die Auflösung, desto stärker wird der zentrale Linienbereich, d.h. der Bereich der geringsten Transmission, betont und desto höher in der Atmosphäre befindet sich das Funktionsmaximum. Das Maximum kennzeichnet den Bereich der stärksten Transmissionsänderung mit der

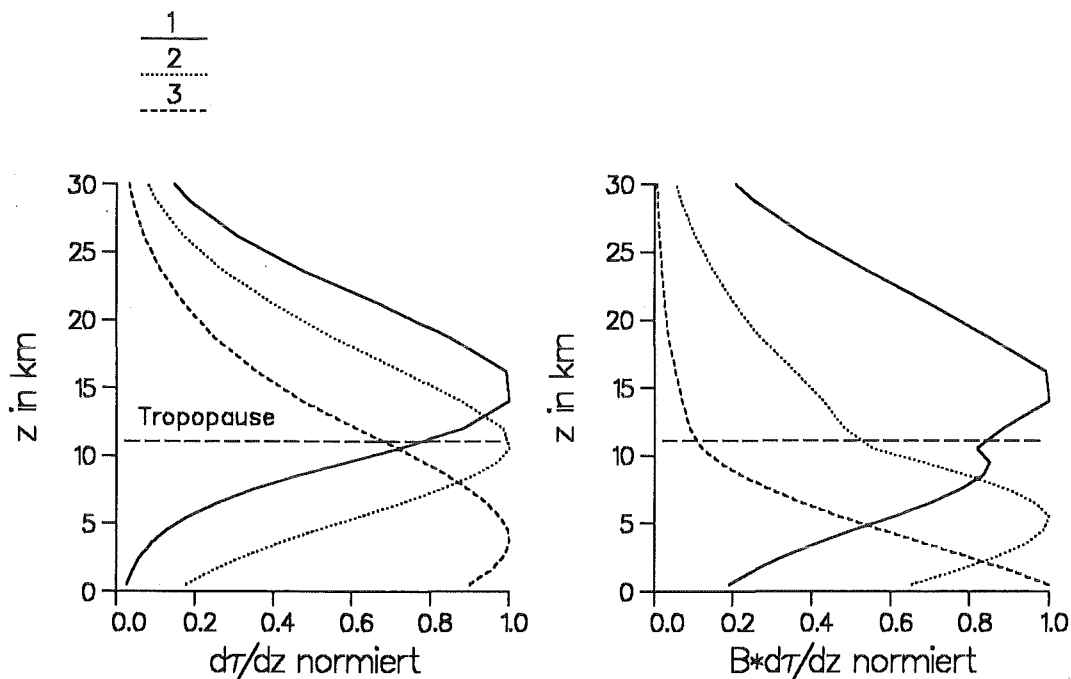


Abbildung 6. Gewichts- (links) sowie Beitragsfunktionen (rechts) für die N_2O -Signatur bei

$\nu = 1264.75 \text{ cm}^{-1}$.

1: $\Delta\nu = 0.05 \text{ cm}^{-1}$

2: $\Delta\nu = 0.10 \text{ cm}^{-1}$

3: $\Delta\nu = 0.30 \text{ cm}^{-1}$

Je stärker der zentrale Bereich der Signatur infolge einer höheren spektralen Auflösung betont wird, desto höher in der Atmosphäre befindet sich das Funktionsmaximum.

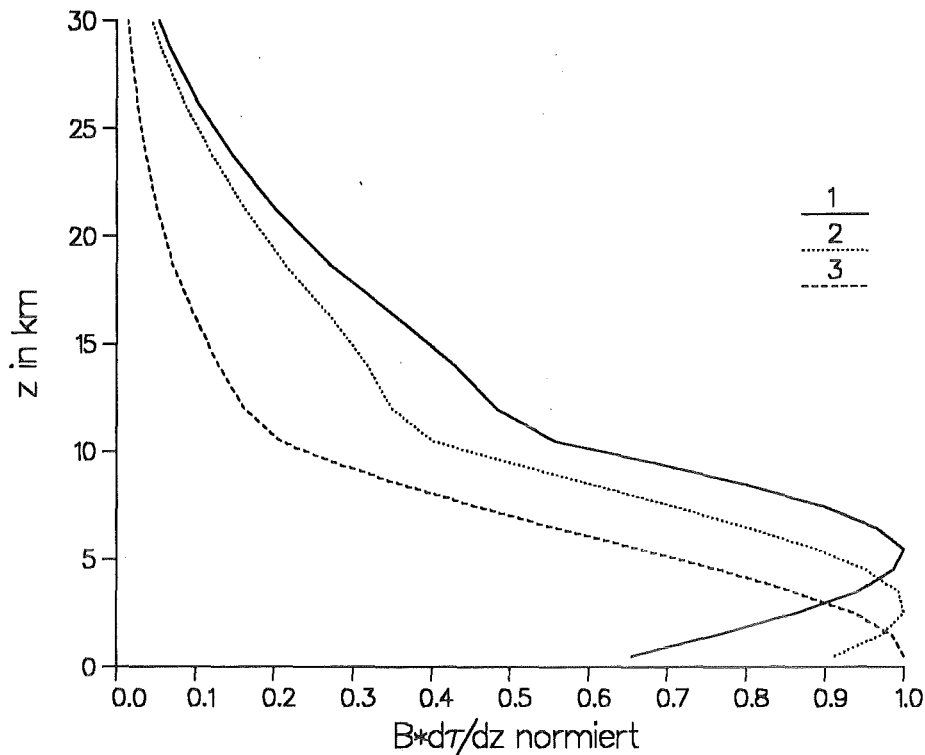


Abbildung 7. Beitragsfunktionen für die N₂O-Signatur bei $\nu = 1264.75 \text{ cm}^{-1}$ mit $\Delta\nu = 0.1 \text{ cm}^{-1}$.

- 1: 1264.750 cm^{-1} (Linienzentrum)
- 2: 1264.725 cm^{-1}
- 3: 1264.700 cm^{-1}

Mit zunehmendem Abstand vom Linienzentrum wandert das Funktionsmaximum in tiefere Troposphärenschichten.

Höhe längs des optischen Weges. Die im rechten Teil von Abb. 6 dargestellten Beitragsfunktionen berücksichtigen zusätzlich die Temperaturabhängigkeit der Planckfunktion. Da die Temperatur in der Troposphäre bei der betrachteten Standardatmosphäre (vgl. Abb. 3 auf Seite 9) zum Boden hin zunimmt, werden die unteren Schichten entsprechend stärker gewichtet und die troposphärischen Funktionsmaxima nach unten verschoben (Funktionen 2 und 3). Das Maximum der Funktion 1 befindet sich in einem sehr kalten, nahezu isothermen Atmosphärenbereich oberhalb der Tropopause und verschiebt sich praktisch nicht. Stattdessen bildet sich aber ein Nebenmaximum in der oberen Troposphäre. Abb. 6 zeigt, daß bereits bei $\Delta\nu = 0.3 \text{ cm}^{-1}$ (Kurve 3) der maximale Beitrag der emittierten Strahlung aus der untersten Atmosphärenschicht stammt, da im Vergleich zu den höheren Auflösungen die Transmission im zentralen Bereich der Signatur größer ist. Bei noch schlechteren spektralen Auflösungen ist der Funktionsverlauf qualitativ ähnlich. Unter Zugrundelegung dieses Konzepts ist es daher zum Erreichen einer gewissen vertikalen Auflösung erforderlich, Spektren mit genügend hoher spektraler Auflösung von etwa $\Delta\nu = 0.1 \text{ cm}^{-1}$ zu messen.

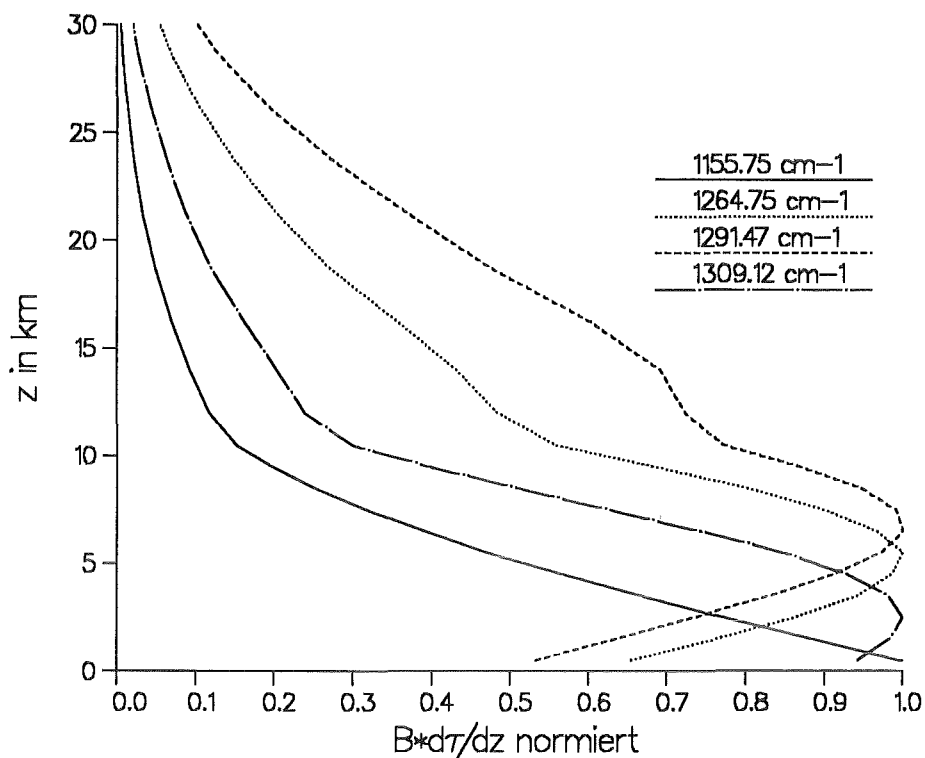


Abbildung 8. Beitragsfunktionen verschiedener N_2O -Signaturen ($\Delta\nu = 0.1 \text{ cm}^{-1}$). Die spektralen Angaben beziehen sich auf die Linienzentren. Die Lage der Funktionsmaxima ist abhängig von der Stärke der Signaturen.

Betrachtet man nicht nur das Zentrum einer Signatur, sondern auch den Bereich der (zentrumnahen) Flanke, so ist festzustellen, daß das Maximum der Beitragsfunktion mit zunehmender Entfernung vom Linienzentrum rasch in tiefere Troposphärenschichten absinkt (siehe Abb. 7). Bereits bei einem Abstand von 0.05 cm^{-1} vom Linienzentrum befindet sich das Maximum in Bodennähe. An diesem Beispiel wird deutlich, daß eine hohe spektrale Auflösung den Vorteil einer Auflösung des Vertikalprofils im Bereich einer einzelnen Signatur bietet. In Abb. 8 sind Beitragsfunktionen von N_2O -Signaturen im Bereich der Banden mit Zentren bei 7.8 bzw. $8.55 \mu\text{m}$ abgebildet. Die Maxima liegen in unterschiedlichen Troposphärenschichten. Für die Signatur bei 1155.75 cm^{-1} , deren Funktionsmaximum sich in der untersten Schicht befindet, muß der Einfluß der Hintergrundstrahlung des Erdbodens in starkem Maße berücksichtigt werden. Dabei ist anzumerken, daß die Lage der Beitragsfunktionsmaxima stark abhängig ist von dem benutzten Atmosphärenmodell (Temperatur, Mischungsverhältnis). Erhöht man die Gesamtmasse $m_{N_2O, \text{ges}}$ im Modell, so wandert das Funktionsmaximum nach oben, d.h. höhere Atmosphärenschichten liefern jetzt den größten Beitrag zum gemessenen Strahl-dichtesignal. Abb. 9 auf Seite 23 (links) zeigt Beitragsfunktionen der N_2O -Signatur bei 1309.12 cm^{-1} mit unterschiedlicher N_2O -Gesamtmasse. In dieser Darstellung ist das absolute Maximum aller beteiligten Funktionen auf 1 normiert, d.h. die Funktionen wurden

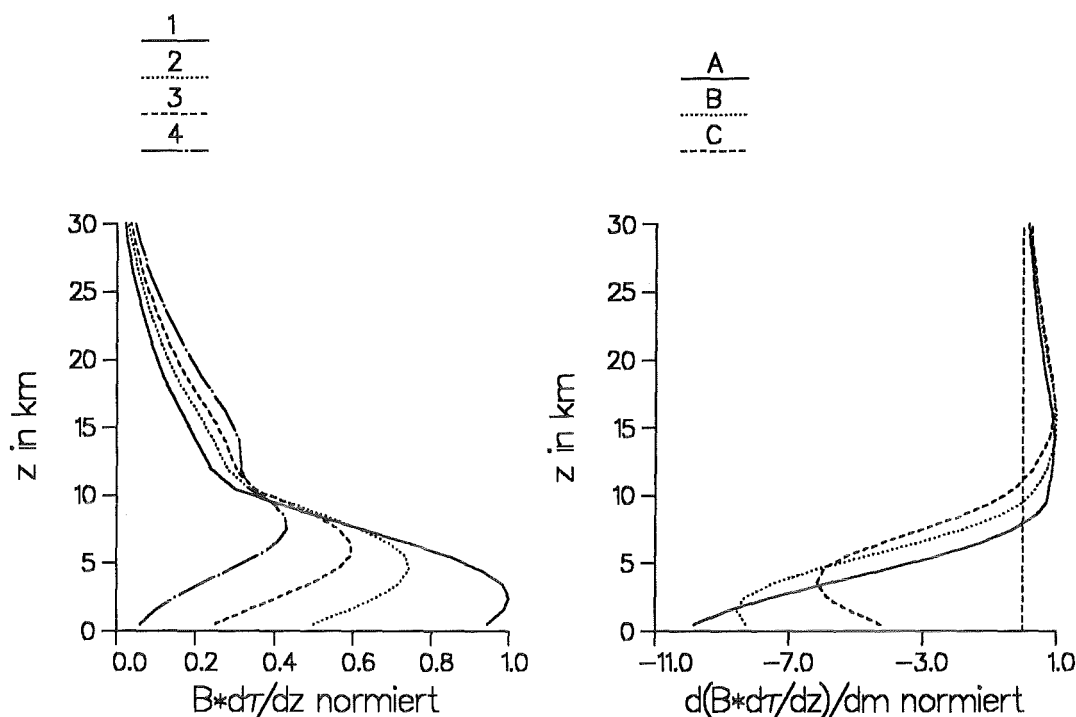


Abbildung 9. Beitrags- (links) sowie Sensitivitätsfunktionen (rechts) der N₂O-Signatur bei $\nu = 1309.12 \text{ cm}^{-1}$.

Variation der N₂O-Gesamtmasse ($\Delta\nu = 0.1 \text{ cm}^{-1}$):

1: $m_{1,0} = 1.0 \cdot m_{\text{N}_2\text{O,ges}}$

2: $m_{1,5} = 1.5 \cdot m_{\text{N}_2\text{O,ges}}$

3: $m_{2,0} = 2.0 \cdot m_{\text{N}_2\text{O,ges}}$

4: $m_{3,0} = 3.0 \cdot m_{\text{N}_2\text{O,ges}}$

A: $(f_B(m_{1,5}) - f_B(m_{1,0})) / (m_{1,5} - m_{1,0})$

B: $(f_B(m_{2,0}) - f_B(m_{1,5})) / (m_{2,0} - m_{1,5})$

C: $(f_B(m_{3,0}) - f_B(m_{2,0})) / (m_{3,0} - m_{2,0})$

Die Lage der Funktionsmaxima ändert sich bei einer Variation der Gasmasse.

mit einem konstanten Faktor skaliert. Die im rechten Teil der Abbildung aufgetragene Funktion

$$f_s = \frac{\partial}{\partial m_g} \left(B_{\Delta\nu}(T) \frac{\partial \tau_{\Delta\nu}(z)}{\partial z} \right) \quad (3.1)$$

wird Sensitivitätsfunktion (f_s) genannt. Sie beschreibt die Änderung des Beitrags der einzelnen Atmosphärenschichten zum Strahldichtesignal bei einer Änderung der Gasmasse. Aus Abb. 9 (links) wird deutlich, daß bei einer Erhöhung der Gasmasse höhere Troposphärenschichten einen größeren Beitrag zum Signal im Vergleich zu den unteren

Schichten liefern. Der Beitrag der unteren Schichten nimmt dabei stark ab, was am negativen Anteil der Sensitivitätsfunktion (Abb. 9, rechts) erkennbar ist. Der entsprechende Schluß gilt auch in umgekehrter Richtung, d.h. für eine Erniedrigung der Gaskonzentration nimmt der Beitrag der unteren Schichten zu. In Abb. 9 (rechts) sind die Flächen unter den Kurven im negativen Wertebereich betragsmäßig größer als im positiven Bereich. Dies liegt daran, daß bei der angenommenen Massenerhöhung die Intensität des atmosphärischen Strahldichtesignals abnimmt. Die Intensität dieses Strahldichtesignals wird geometrisch dargestellt durch die Fläche unter der Beitragsfunktion (siehe Abb. 9, links). Bei zunehmender Masse verkleinert sich diese Fläche, d.h. das Strahldichtesignal nimmt ab.

3.3 Sensitivität der Signaturen gegenüber Änderungen der Gasmasse und der Temperatur

In einem weiteren Schritt werden die separierten Signaturen in detaillierter Weise hinsichtlich ihrer Sensitivität gegenüber Änderungen der Gasmasse und der Temperatur untersucht.

Die Linienstärke S_g ist insbesondere abhängig von der Temperatur T und der Energie des unteren Anregungszustands $E_{0,g}$ des Moleküls. Dabei ist die Temperaturabhängigkeit um so geringer, je kleiner $E_{0,g}$ ist. Linien mit kleinem $E_{0,g}$ sind häufig stärkere Linien. Wie bereits erwähnt, wurden im Rahmen dieser Studie die Möglichkeiten der Fernerkundung troposphärischer Spurengase hauptsächlich für die Nadirsondierungsgeometrie untersucht. Aufgrund der damit verbundenen kurzen optischen Wege mit wenig Gesamtabsorbermasse im Vergleich zur Horizontsondierung, sind stärkere Linien meist besser dazu geeignet, Rückschlüsse auf die Konzentration des jeweiligen Spurengases zu ziehen, insbesondere wenn sich die Linienabsorption linear mit der Gasmasse ändert. Eine von einem bestimmten Gas erzeugte Signatur ist speziell dann zur Bestimmung der Gaskonzentration geeignet, wenn die Massensensitivität groß ist im Vergleich zur Temperatursensitivität.

Um die Sensitivität der Strahldichtesignaturen gegenüber *troposphärischen* Massenänderungen beurteilen zu können, wurde das Mischungsverhältnis des entsprechenden Gases in der Troposphäre um 20 bzw. 50 % erhöht und die Differenz der Spektren mit erhöhter bzw. normaler Gasmasse gebildet:

$$\Delta L_{\Delta v,1} = L_{\Delta v}(m_{\text{ges}}, T, T_0) - L_{\Delta v}(m_{\text{ges}} + \Delta m_{\text{g,Trop}}, T, T_0) \quad (3.2a)$$

mit	$L_{\Delta v}$	Strahldichte
	m_{ges}	Gesamtmasse der Gase in der Atmosphäre längs des optischen Weges
	$\Delta m_{g,\text{Trop}}$	zusätzliche Masse des betrachteten Gases g in der Troposphäre
	T	Temperaturprofil
	T_0	Bodentemperatur

Desweiteren wurde das Temperaturprofil mit einem Bias von 0.5 K, d.h. einer konstanten Temperaturdifferenz variiert, um die Temperatursensitivität zu prüfen:

$$\Delta L_{\Delta v,2} = L_{\Delta v}(m_{\text{ges}}, T + \Delta T, T_0) - L_{\Delta v}(m_{\text{ges}}, T, T_0) \quad (3.2b)$$

mit	ΔT	Bias des Temperaturprofils
-----	------------	----------------------------

Bei derartig kleinen Temperaturvariationen ist das Vorzeichen des Fehlers ΔT ohne Einfluß auf die Fehlerabschätzung. Die Strahldichteänderung ist in beiden Fällen betragsmäßig nahezu dieselbe. Um den Einfluß der Bodentemperatur ebenfalls zu berücksichtigen, wurde diese mit einem Bias von 1 K entsprechend dem Vorzeichen des Temperaturprofil-Bias geändert:

$$\Delta L_{\Delta v,3} = L_{\Delta v}(m_{\text{ges}}, T + \Delta T, T_0 + \Delta T_0) - L_{\Delta v}(m_{\text{ges}}, T, T_0) \quad (3.2c)$$

mit	ΔT_0	Bias der Bodentemperatur
-----	--------------	--------------------------

Die Qualität Q_s einer Signatur kann damit über den Quotienten der Strahldichtedifferenzen

$$Q_{s,a} = \frac{\Delta L_{\Delta v,1}}{\Delta L_{\Delta v,2}} \quad (3.3a)$$

bzw. zusätzlich mit Berücksichtigung des Einflusses der Bodentemperatur

$$Q_{s,b} = \frac{\Delta L_{\Delta v,1}}{\Delta L_{\Delta v,3}} \quad (3.3b)$$

ausgedrückt werden. Je größer Q_s wird, desto besser ist die Signatur dazu geeignet, um daraus das Mischungsverhältnis des entsprechenden Gases in der Troposphäre abzuleiten. Dabei sollte betont werden, daß troposphärische bzw. stratosphärische Massenänderungen zu spektral unterschiedlichen Strahldichteänderungen führen (siehe Kap. 4.2.3.3). Diese Aussage ergibt sich auch unmittelbar aus der unterschiedlichen Lage der

Maxima verschiedener Beitragsfunktionen. Deshalb ist es in einem hochaufgelösten Spektrum möglich, nicht nur gasspezifische Informationen sondern auch troposphärische und stratosphärische Informationen voneinander zu trennen.

Große Fehlerquellen bei der Nadirsondierung sind die ungenaue Kenntnis des Bodenemissionsterms $\varepsilon_{\Delta\nu} B_{\Delta\nu}(T_0)$ (vgl. Gl. 2.1 und 2.2) sowie Fehler in der Kenntnis des atmosphärischen Temperaturprofils. Diese Fehlerquellen lassen sich neben dem Vergleich von Massen- und Temperatursensitivität insbesondere durch Inversionsrechnungen mit dem Retrievalprogramm RAT (siehe Kap. 2.4) abschätzen. Dabei wird das "wahre" Referenzprofil eines Spurengases mit einem konstanten Faktor skaliert, d.h. in jeder Schicht wird das Mischungsverhältnis mit diesem Faktor multipliziert. Dieses neu gewonnene Profil werde Startprofil genannt. Das dazugehörige Spektrum (Startspektrum) soll nun an das zum Referenzprofil gehörende Referenzspektrum bestmöglich angepaßt werden. Bei dieser Anpassung wird von einem fehlerhaften Temperaturprofil ausgegangen. Das bedeutet, unter der Annahme dieses Temperaturfehlers wird die Masse des Spurengases im Startprofil solange variiert, bis die Differenz zwischen dem Referenzspektrum und dem aus dem variierten Startprofil berechneten Spektrum minimal wird. Das zum Spektrum mit der besten Anpassung an das Referenzspektrum gehörende Gasprofil ist das Ergebnisprofil. Die Differenz zwischen dem Ergebnisprofil und dem Referenzprofil beinhaltet einen Fehler in der Gasmassenbestimmung, der zurückzuführen ist auf das fehlerhaft angenommene Temperaturprofil.

Auswirkungen anderer Fehler auf die Spektren und damit letztendlich auf die Genauigkeit der zu bestimmenden Spurengasmasse, wie spektrales Rauschen oder Eichfehler, können mit RAT simuliert werden. Der Einfluß ungenauer spektroskopischer Daten auf die Gasmassenbestimmung wurde abgeschätzt (siehe Kap. 4.2.1).

4. Nadirsondierung von Spurengasen vom Satelliten aus

Das übergeordnete wissenschaftliche Ziel ist die möglichst kontinuierliche Messung klimawirksamer Spurengase mit guter räumlicher Auflösung bei globaler Überdeckung.

Meßbar sind dabei Moleküle, die geeignete Absorptionslinien im infraroten Spektralbereich besitzen und in genügend hoher Konzentration in der Troposphäre vorhanden sind, was gleichbedeutend damit ist, daß deren Quellen in erster Linie in der Troposphäre liegen.

4.1 Klimarelevante troposphärische Spurengase

Die Konzentration der klimarelevanten Spurengase nimmt durch die anthropogenen Emissionsraten laufend zu und führt damit insbesondere zu einer Verstärkung des Treibhauseffektes. Zur Zeit besitzen der Wasserdampf und das Kohlendioxid zusammen einen Anteil von etwa 85 % am Gesamttreibhauseffekt. Eine Änderung der Konzentrationen klimawirksamer Spurengase, insbesondere der im Bereich des sogenannten atmosphärischen Fensters ($\lambda = 8 - 13 \mu\text{m}$) optisch aktiven Gase, führt zu einer Veränderung des Strahlungshaushalts und damit zu einer Änderung des Erdklimas.

Man kann unterscheiden zwischen Gasen mit langen bzw. kurzen Verweilzeiten in der Troposphäre. Kurzlebige Gase wie H_2O , CO oder O_3 , zeichnen sich durch eine hohe zeitliche und räumliche Variabilität bezüglich ihrer Konzentration aus. Die wesentliche Quelle für das am stärksten absorbierende Gas, den atmosphärischen Wasserdampf, ist die Verdunstung von Wasser an der Erdoberfläche und durch die Ozeane. Einen signifikanten Einfluß auf die Konzentration und Verteilung des Wasserdampfs in der Tropopausenregion übt die Verbrennung des Treibstoffs von Flugzeugen aus. Generell ist die räumliche und zeitliche Variabilität der Wasserdampfkonzentration nicht nur aufgrund der kurzen mittleren Verweilzeit (mehrere Tage), sondern auch wegen der Abhängigkeit der Verdunstungsraten von der Temperatur recht hoch. Der Wasserdampfgehalt ist besonders hoch in den oberflächennahen Luftschichten über den warmen, tropischen Meeren. Dort kann das Volumenmischungsverhältnis des Wasserdampfs bis auf einige Prozent ansteigen. Es nimmt mit der Höhe und zu den Polen hin um mehr als den Faktor 1000 bzw. 10 ab. Neben den Polargebieten ist auch in den ariden Regionen der Subtropen der Wasserdampfgehalt der Luft recht niedrig.

Das Gas Kohlenmonoxid wird freigesetzt aus einer Reihe von anthropogenen, photochemischen und biosphärischen Quellen. Aufgrund der relativ kurzen troposphärischen Verweilzeit von ein bis drei Monaten können unter bestimmten meteorologischen Bedingungen in Großstädten und Industriegebieten kurzzeitig stark erhöhte Konzentrationen auftreten, die um bis zu einem Faktor 100 höher sein können als der nordhemi-

sphärische Mittelwert von 100 bis 150 ppbv. Außerdem ist ein Jahrgang der Konzentration mit im Frühjahr maximalen und im Frühherbst minimalen Werten erkennbar. Aufgrund der geringeren Anzahl anthropogener Quellen in der Südhemisphäre, liegt dort das Mischungsverhältnis mit Werten von durchschnittlich 40 bis 80 ppbv deutlich unter dem mittleren Wert der Nordhemisphäre.

Unter den klimarelevanten atmosphärischen Spurenstoffen nimmt das Ozon eine Sonderstellung ein. Es ist eine sehr reaktive und daher ziemlich kurzlebige Verbindung mit Verweilzeiten von 2 - 3 Monaten in der freien Troposphäre bzw. 1 - 2 Tagen in Bodennähe. Ozon wird nicht durch natürliche oder anthropogene Quellen emittiert, sondern als Folgeprodukt durch photochemische Prozesse in der Atmosphäre gebildet. Für die Konzentration und Verteilung des Ozons in der Stratosphäre sind neben den photochemischen auch dynamische Prozesse verantwortlich. Die O_3 -Produktionsprozesse in der Troposphäre unterscheiden sich von denen in der Stratosphäre.

Eine wesentliche Quelle für Ozon in der freien Troposphäre ist der vertikale Transport aus der Stratosphäre, der starke regionale Unterschiede aufweist. Daneben wird troposphärisches Ozon auch in einem erheblichen Umfang bei der durch die Stickstoffoxide NO und NO_2 katalysierten photochemischen Oxidation von CO , CH_4 und höheren Kohlenwasserstoffen gebildet. Die sehr reaktiven Stickstoffoxide entstammen dabei sowohl natürlichen als auch anthropogenen Quellen (z.B. Verbrennung fossiler Brennstoffe). Neben der wichtigen Absorption kurzweiliger solarer Strahlung in der Stratosphäre ist auch das troposphärische Ozon von besonderem Interesse. Zum einen ist dieses Spurengas äußerst klimawirksam und trägt merklich zum Treibhauseffekt der Atmosphäre bei, zum anderen ist das Ozon in der Troposphäre der wichtigste Vorläufer der OH -Radikale, die einen bedeutenden Einfluß auf die Chemie der Troposphäre haben und die Konzentration und Verteilung verschiedener troposphärischer Spurenstoffe, unter anderem auch des Methans, maßgeblich beeinflussen. Zusätzlich wirkt das Ozon in hohen Konzentrationen toxisch auf Fauna und Flora. In reinen Luftmassen der mittleren Breiten der Nordhemisphäre liegen die typischen Werte des O_3 -Mischungsverhältnisses zwischen 30 und 50 ppbv. Im Frühling und Sommer können bei kräftiger Einstrahlung auch Werte von über 100 ppbv auftreten.

Zu den kurzlebigen Gasen gehören auch die Stickstoffoxide NO und NO_2 . Da sich in der Atmosphäre tagsüber zwischen beiden Verbindungen sehr schnell ein (photochemisches) Gleichgewicht einstellt, werden die beiden Spurengase meist unter der Bezeichnung NO_x zusammengefaßt. Wegen der sehr kurzen Verweilzeit dieser Stickstoffoxide (ca. 1 Tag) einerseits und der komplexen Verteilung der Quellen und Senken andererseits, zeigen die troposphärischen NO_x -Konzentrationen sehr starke räumliche und zeitliche Variationen. In der freien Troposphäre oberhalb der Grenzschicht werden NO_x -Mischungsverhältnisse von unter 20 pptv in Reinluft und bis über 5 ppbv über dicht besiedelten Gebieten stark industrialisierter Länder gemessen.

Neben flüchtigen organischen Kohlenstoffverbindungen mit zum Teil äußerst kurzen Verweilzeiten (wenige Stunden) ist auch eine gewisse Klimarelevanz schwefelhaltiger Spurengase wie Schwefeldioxid (SO_2), Schwefelwasserstoff (H_2S), Carbonylsulfid (OCS) u.a. gegeben. Sie modifizieren den Strahlungshaushalt der Erde durch ihre Oxidation zu Schwefelsäure und die anschließende Bildung von Sulfat-Aerosolteilchen. Die schwefelhaltigen Spurengase werden an der Erdoberfläche durch verschiedene natürliche und anthropogene Prozesse gebildet und in die Atmosphäre emittiert. Abgesehen von Carbonylsulfid haben schwefelhaltige Verbindungen recht kurze troposphärische Verweilzeiten und daher ist ihre horizontale und vertikale Verteilung in der Troposphäre sehr inhomogen.

Langlebige Gase wie CO_2 , CH_4 , N_2O oder die Fluorchlorkohlenwasserstoffe (FCKW's) sind in der Troposphäre aufgrund der langen Verweilzeiten (viele Jahre bis Jahrhunderte) gut durchmischt. Die räumliche Variation in der Konzentration ist daher nur schwach ausgeprägt. Dasselbe gilt für die zeitliche Variation. Lediglich bei den Gasen CO_2 und CH_4 ist ein ausgeprägter Jahresgang der Konzentration in der Troposphäre mit einem Maximum im Frühjahr und einem Minimum im Herbst erkennbar. Der Jahresgang der Konzentration wird bestimmt durch die zeitlichen Schwankungen der Quell- und Senkenstärken. Die Gase CO_2 , CH_4 und N_2O besitzen sowohl anthropogene als auch natürliche Quellen. Momentan liegen die mittleren globalen troposphärischen Mischungsverhältnisse bei 355 ppmv für CO_2 , 1.74 ppmv für CH_4 , sowie 311 ppbv für N_2O . Das Mischungsverhältnis der Fluorchlorkohlenwasserstoffe liegt im sub-ppbv Bereich mit momentanen Werten von bis zu 280 pptv (FCKW-11) bzw. 484 pptv (FCKW-12). Die Fluorchlorkohlenwasserstoffe entstammen dabei ausschließlich künstlichen Quellen. Das Mischungsverhältnis dieser Stoffe in der Troposphäre nimmt dabei jährlich um mehrere Prozent zu.

Neben dem Zuwachs der Fluorchlorkohlenwasserstoffe in der Atmosphäre steigt auch die Konzentration der anderen klimawirksamen Spurengase laufend an. Die Zielsetzung, diese Veränderungen auf möglichst globaler Ebene kontinuierlich zu erfassen, läßt sich praktisch nur über den Einsatz von Satelliten als Meßgeräteträger verwirklichen. Dabei eignet sich eine vertikale Sondierungsgeometrie besonders dafür, auch Spurenstoffe in der unteren Troposphäre mit hoher räumlicher Auflösung zu erfassen.

Daher wurde zunächst eine Übersicht erarbeitet, welche Gase mittels der Nadirsondierung vom Satelliten aus gemessen werden können. Anschließend werden detailliert Einzelbeispiele diskutiert.

4.2 Meßbarkeit von Spurengasen unter Berücksichtigung verschiedener Fehlerquellen

4.2.1 Mit hoher Genauigkeit meßbare Spurengase

In Tabelle 2 auf Seite 31 sind die mittels Nadirsondierung vom Weltraum aus in der Troposphäre meßbaren Spurengase zusammengestellt. Dabei ist zu beachten, daß das ebenfalls meßbare Spurengas CO_2 hier nicht betrachtet wird. Wie eingangs dieses Kapitels erwähnt, ist Kohlendioxid aufgrund seiner langen Verweilzeiten in der Troposphäre gut durchmischt. Seine Konzentration wird an einer Vielzahl von Stationen kontinuierlich gemessen. CO_2 -Signaturen bzw. Banden werden deshalb im allgemeinen dazu benutzt, um daraus Information über das Temperaturprofil abzuleiten (siehe z.B. FISCHER 1975, PFISTER 1988).

Die Ergebnisse in Tabelle 2 beruhen mit Ausnahme der Rubrik "ungenau spektroskopische Daten" auf Inversionsrechnungen. Sie gelten für ausgewählte Signaturen in den angegebenen Spektralbereichen bei einer spektralen Auflösung von $\Delta\nu = 0.1 \text{ cm}^{-1}$. Dabei wurde nicht nur das Linienzentrum betrachtet, sondern es wurde auch der gesamte aus dem Spektrum hervortretende Linienflügelbereich von bis zu 0.5 cm^{-1} Abstand vom Linienzentrum in die Betrachtungen mit einbezogen. Um Signaturen im Spektrum zu separieren, würde in Einzelfällen zwar eine schlechtere Auflösung von bis zu $\Delta\nu = 0.4 \text{ cm}^{-1}$ genügen, jedoch ist es dann kaum noch möglich, Informationen über die vertikale Verteilung der Spurenstoffe aus dem Spektrum abzuleiten (vgl. Kap. 3.2).

Die zusammengestellten Ergebnisse zeigen, daß es bei einer genügend hohen spektralen Auflösung für die Spurengase H_2O , CH_4 , N_2O und CO möglich ist, neben der Information über den Gesamtgehalt der Gase in der Atmosphäre auch Informationen über deren Vertikalverteilung in der Troposphäre aus dem Spektrum abzuleiten. Diese vertikale Auflösung umfaßt dabei Schichten von mehreren Kilometern Dicke. Die Beitragsfunktionen (Gl. 2.7) der Signaturen dieser Gase besitzen Maxima in unterschiedlichen Höhenbereichen. Für die Gase H_2O und CH_4 findet man sogar Signaturen mit Beitragsfunktionsmaxima in der unteren Stratosphäre. Bei CCl_2F_2 (FCKW-12) dagegen ist eine derartige Höhengauflösung nicht möglich, da die CCl_2F_2 -Signaturen zu schwach sind. Dies ist aber kein Nachteil, denn aufgrund der sehr langen Verweilzeiten dieses Moleküls ist das CCl_2F_2 -Mischungsverhältnis in der gesamten Troposphäre ohnehin nahezu höhenkonstant. Anders sind die Verhältnisse bei Ozon. Aufgrund des stratosphärischen O_3 -Konzentrationsmaximums besitzen die Beitragsfunktionen der O_3 -Signaturen stets ein ausgeprägtes Maximum in der Stratosphäre. Oft weisen sie jedoch ein zweites Maximum in Bodennähe auf.

Tabelle 2. Satelliten-Nadirsondierung (1). Meßbarkeit von Spurengasen, spektrale Auflösung $\Delta\nu = 0.1 \text{ cm}^{-1}$. Gültig für ausgewählte Signaturen.

Gas	geeignete Spektralbereiche (cm^{-1})	vertikale Auflösung	Fehler bei der Konzentrationsbestimmung $\left(\frac{\Delta m_g}{m_g}\right)$ infolge				
			spektralem Rauschen (NESR ⁽¹⁾) (%)	ungenauer Eichung ⁽²⁾ (%)	ungenauer spektroskop. Daten ⁽³⁾ (%)	statistischem T – Fehler ⁽⁴⁾ (%)	systematischem T – Fehler ⁽⁵⁾ (%)
H ₂ O	780 - 920 1090 - 1200 1400 - 1600	3-4 Troposphärenschichten / Stratosphäre	0.1 - 0.6	4 - 7	6 - 12	2 - 7	5 - 9
CH ₄	1200 - 1350	2-3 Troposphärenschichten / Stratosphäre	0.1 - 0.6	2 - 5	3 - 10	1 - 6	3 - 8
N ₂ O	1140 - 1350	2-3 Troposphärenschichten	0.1 - 1	2 - 5	5 - 11	1 - 6	4 - 8
O ₃	980 - 1080	1 Troposphärenschicht / Stratosphäre	0.1 - 1	2 - 7	10 - 15	1 - 9	2 - 9
CO	2150 - 2170	2 Troposphärenschichten	0.1 - 0.8	4 - 5	5 - 10	2 - 10	4 - 14
CCl ₂ F ₂ (FCKW-12)	910 - 935 1157 - 1162	Troposphäre	0.1 - 2	ca. 15	10 - 20	1 - 3 ⁽⁶⁾	3 - 6 ⁽⁶⁾

Legende: (1) NESR frequenzabhängig, von $10^{-9} \text{ W}/(\text{cm}^2 \text{ sr cm}^{-1})$ bei $\nu = 2200 \text{ cm}^{-1}$ bis $1.5 \cdot 10^{-8} \text{ W}/(\text{cm}^2 \text{ sr cm}^{-1})$ bei $\nu = 800 \text{ cm}^{-1}$
(2) Eichfehler (Strahldichte) frequenzabhängig, von 1 % bei $\nu = 800 \text{ cm}^{-1}$ bis 3 % bei $\nu = 2200 \text{ cm}^{-1}$
(3) Fehler der spektroskopischen Parameter: H₂O [S: 5 – 10 %, α : 5 – 10 %]; CH₄ [S: 2 – 5 %, α : 2 – 10 %]; N₂O [S: 2 – 8 %, α : 5 – 10 %]; O₃ [S: 5 – 10 %, α : 10 – 15 %]; CO [S: 2 – 5 %, α : 5 – 10 %]; CCl₂F₂ [σ : 10 – 25 %]
(4) Fehler: T-RMS = 2 K, T₀ + 1.3 K
(5) Fehler: T + 0.5 K, T₀ + 1.0 K
(6) bei Elimination des T₀-Fehlers durch Anpassung des Kontinuums

Insofern läßt sich aus dem Spektrum in gewissen Grenzen auch Information über die Ozonverteilung in der unteren Troposphäre (Grenzschicht) ableiten (siehe Kap. 4.2.3.3). Bei sämtlichen Signaturen der zusammengestellten Gase spielt der Einfluß von Stör gasen im allgemeinen keine Rolle, solange deren Gesamtmasse auf wenigstens 50 % genau bekannt ist.

Tabelle 2 zeigt, mit welcher Genauigkeit die jeweiligen Gase unter der Annahme bestimmter Fehlerquellen gemessen werden können. Die angegebenen Fehler beziehen sich jeweils auf die Gesamtmasse der jeweiligen Gase entlang des optischen Weges.

Dabei wird zunächst ein spektrales Rauschen (NESR¹²), das unter anderem durch den Detektor im Meßgerät verursacht wird, vorausgesetzt. Das heißt, jeder Meßwert der spektralen Strahldichte $L_{\Delta\nu}$ ist mit einem statistischen Fehler behaftet. Diese Fehler sind gemäß der Gaußfunktion um den Erwartungswert verteilt. Die Frequenzabhängigkeit des spektralen Rauschens wurde dabei berücksichtigt. Im Rahmen des MIPAS-Weltraumexperimentes schwankt die NESR bezogen auf eine spektrale Auflösung von $\Delta\nu = 0.1 \text{ cm}^{-1}$ von ca. $10^{-9} \text{ W}/(\text{cm}^2 \text{ sr cm}^{-1})$ bei $\nu = 2200 \text{ cm}^{-1}$ bis ca. $1.5 \cdot 10^{-8} \text{ W}/(\text{cm}^2 \text{ sr cm}^{-1})$ bei $\nu = 800 \text{ cm}^{-1}$. Für die ausgewählten Gassignaturen gilt, daß das spektrale Rauschen im allgemeinen einen Fehler in der Gasmasse von kleiner als 1 % verursacht. Lediglich bei CCl_2F_2 kann der Fehler auf 2 % anwachsen. Die angegebenen Zahlenwerte schwanken zum einen infolge unterschiedlicher Signaturen und zum anderen auch infolge unterschiedlicher Anfangswerte des Zufallszahlengenerators (vgl. Kap. 2.4).

Eine größere Fehlerquelle stellt die Eichung der gemessenen Spektren von willkürlichen Einheiten in Strahldichteinheiten dar. Eine bei Nadirsondierungen verbreitete Methode ist, daß neben dem Atmosphärenspektrum zwei weitere Spektren zweier Schwarzkörperquellen mit unterschiedlicher Temperatur aufgenommen werden (z.B. HIS¹³-Experiment, REVERCOMB et al. 1988). Es wird dabei ein linearer Zusammenhang angenommen zwischen den Spektren in willkürlichen Einheiten ($C_{\Delta\nu}$) und Strahldichte einheiten ($L_{\Delta\nu}$). Die Schwarzkörperreferenzspektren bestimmen die Neigung und den Ordinatenabschnitt der Geraden in der $(C_{\Delta\nu}, L_{\Delta\nu})$ -Ebene. Für das kalibrierte Strahldichtespektrum $L_{\Delta\nu}$ gilt dann unter der Annahme idealer Schwarzkörper ($\epsilon_{\Delta\nu} = 1$):

$$L_{\Delta\nu} = B_{\Delta\nu}(T_k) + (B_{\Delta\nu}(T_w) - B_{\Delta\nu}(T_k)) \left(\frac{C_{\Delta\nu} - C_{\Delta\nu,k}}{C_{\Delta\nu,w} - C_{\Delta\nu,k}} \right) \quad (4.1)$$

¹² Noise Equivalent Spectral Radiance

¹³ High-Resolution Interferometer Sounder

mit	$B_{\Delta\nu}$	Planckfunktion
	T_k	Temperatur des kalten Schwarzkörpers
	T_w	Temperatur des warmen Schwarzkörpers
	$C_{\Delta\nu}$	unkalibriertes Atmosphärenspektrum
	$C_{\Delta\nu,k}$	unkalibriertes Spektrum des kalten Schwarzkörpers
	$C_{\Delta\nu,w}$	unkalibriertes Spektrum des warmen Schwarzkörpers

Die Bestimmung des Ordinatenabschnitts stellt eine erste Fehlerquelle dar. Dabei handelt es sich um einen additiven Fehler (Offset), d.h. das Spektrum ist um einen konstanten Betrag in der Strahldichte verschoben (absoluter Fehler). Bei einer Nadirsondierung kann die Bestimmung des Offsets auch durch den Vergleich mit berechneten Spektren in den Lücken zwischen den Linien außerhalb der Banden bei hinreichend bekannter Boden- und Kontinuumsemission (H_2O , Aerosole) überprüft werden (z.B. bei Sondierungen über dem Ozean).

Die größere Fehlerquelle ist im allgemeinen die Neigung der Geraden in der $(C_{\Delta\nu}, L_{\Delta\nu})$ -Ebene. Dieser Fehler wirkt sich multiplikativ in der Strahldichte aus (relativer Fehler) und stammt unter anderem aus der ungenauen Kenntnis des tatsächlichen Emissionsvermögens sowie der Temperatur der Schwarzkörper und der Messung von $C_{\Delta\nu,k}$ bzw. $C_{\Delta\nu,w}$. Im Rahmen des MIPAS-Weltraumprojektes werden wellenzahlabhängige radiometrische Genauigkeiten von 1 % (bei $\nu = 800 \text{ cm}^{-1}$) bis 3 % (bei $\nu = 2200 \text{ cm}^{-1}$) gefordert (POSSELT 1992). In Tabelle 2 auf Seite 31 ist dieser Fehler in Abhängigkeit des Spektralbereichs berücksichtigt. Wie stark sich dieser Fehler auswirkt, hängt von der Massensensitivität der Signaturen ab. Je höher die Massensensitivität einer Signatur ist, desto stärker ändert sich die Strahldichte mit der Masse, bzw. desto weniger wirkt sich eine radiometrische Ungenauigkeit als Fehler in der Masse aus. Bei den angenommenen radiometrischen Genauigkeiten liegt der Massenbestimmungsfehler in Abhängigkeit von der jeweiligen Signatur häufig unter 5 %, bei CCl_2F_2 jedoch bei etwa 15 %. Dieser große Fehler bei CCl_2F_2 kommt dadurch zustande, daß in diesem Spektralbereich das Bodensignal gegenüber dem Atmosphärensignal dominiert. CCl_2F_2 -Massenänderungen führen deshalb nur zu verhältnismäßig kleinen Strahldichteänderungen (siehe Kap. 4.2.4.2). Umgekehrt ist deshalb ein Fehler in der Strahldichte mit einem entsprechend hohen Fehler in der Masse korreliert.

Die für die Strahlungsübertragungsrechnungen benötigten spektroskopischen Daten sind ebenfalls mit Fehlern behaftet. Aus Gleichung (2.5), welche die Berechnung der Transmission aus der optischen Dicke ausdrückt, ist ersichtlich, daß der monochromatische Massenabsorptionskoeffizient $\sigma_{\nu,g}$ des Gases g linear gekoppelt ist mit der Masse m_g des Gases. Im folgenden wird abgeschätzt, in wieweit fehlerhafte spektroskopische Daten einen Fehler im Absorptionskoeffizienten und dadurch einen Fehler in der Massenbestimmung verursachen. Aus dem Ansatz

$$(m_g + \Delta m_g)(\sigma_{v,g} + \Delta \sigma_{v,g}) = m_g \sigma_{v,g} = \text{const.} \quad (4.2)$$

mit Δm_g Fehler der Masse des Gases g
 $\Delta \sigma_{v,g}$ Fehler des Massenabsorptionskoeffizienten des Gases g

folgt für den Massenfehler:

$$\frac{\Delta m_g}{m_g} = \frac{-\frac{\Delta \sigma_{v,g}}{\sigma_{v,g}}}{1 + \frac{\Delta \sigma_{v,g}}{\sigma_{v,g}}} \quad (4.3)$$

Der Absorptionskoeffizient $\sigma_{v,g}$ berechnet sich nach Gleichung (2.6) als Produkt aus der Linienstärke S_g und der Profilfunktion f . Im Rahmen dieser Abschätzung kann die Profilfunktion nach Lorentz benutzt werden, da diese die in der Troposphäre stark wirksame Druckverbreiterung der Linien beschreibt. Damit erhält man für den Massenabsorptionskoeffizienten:

$$\sigma_{v,g} = \frac{S_g}{\pi} \frac{\alpha_g}{(v - v_{0,g})^2 + \alpha_g^2} \quad (4.4)$$

mit S_g Linienintensität
 α_g Halbwertsbreite der Linien
 v Wellenzahl
 $v_{0,g}$ Wellenzahl des Linienzentrums

Mit Hilfe des Fehlerfortpflanzungsgesetzes nach Gauß

$$\Delta \sigma_{v,g} = \sqrt{\left(\frac{\partial \sigma_{v,g}}{\partial S_g} \Delta S_g\right)^2 + \left(\frac{\partial \sigma_{v,g}}{\partial \alpha_g} \Delta \alpha_g\right)^2} \quad (4.5)$$

ergibt sich der Fehler des Massenabsorptionskoeffizienten zu:

$$\frac{\Delta \sigma_{v,g}}{\sigma_{v,g}} = \sqrt{\left(\frac{\Delta S_g}{S_g}\right)^2 + \left(\frac{(v - v_{0,g})^2 - \alpha_g^2}{(v - v_{0,g})^2 + \alpha_g^2} \frac{\Delta \alpha_g}{\alpha_g}\right)^2} \quad (4.6)$$

Dabei wurde der Einzelfehler des Linienzentrums ($\Delta v_{0,g}$) gegenüber den Einzelfehlern der Linienstärke (ΔS_g) und der Halbwertsbreite ($\Delta \alpha_g$) vernachlässigt. Gleichung (4.6) eingesetzt in Gleichung (4.3) ergibt:

$$\frac{\Delta m_g}{m_g} = \frac{-\sqrt{\left(\frac{\Delta S_g}{S_g}\right)^2 + \left(\frac{(v - v_{0,g})^2 - \alpha_g^2}{(v - v_{0,g})^2 + \alpha_g^2} \frac{\Delta \alpha_g}{\alpha_g}\right)^2}}{1 + \sqrt{\left(\frac{\Delta S_g}{S_g}\right)^2 + \left(\frac{(v - v_{0,g})^2 - \alpha_g^2}{(v - v_{0,g})^2 + \alpha_g^2} \frac{\Delta \alpha_g}{\alpha_g}\right)^2}} \quad (4.7a)$$

Gleichung (4.7a) stellt den Zusammenhang dar zwischen einem relativen Fehler in der Bestimmung der Gesamtmasse eines Gases g, hervorgerufen durch die relativen Einzelfehler in der Linienintensität S_g und der Halbwertsbreite α_g , unter der Annahme eines Lorentz-Profiles. Gleichung (4.7a) zeigt, daß der Fehler an der Stelle $v - v_{0,g} = \alpha_g$ minimal und für das Linienzentrum ($v - v_{0,g} = 0$) bzw. für weit entfernte Flügelbereiche ($(v - v_{0,g}) \rightarrow \infty$) maximal wird. Gleichung (4.7a) nimmt im letzteren Fall die Form an:

$$\frac{\Delta m_g}{m_g} = \frac{-\sqrt{\left(\frac{\Delta S_g}{S_g}\right)^2 + \left(\frac{\Delta \alpha_g}{\alpha_g}\right)^2}}{1 + \sqrt{\left(\frac{\Delta S_g}{S_g}\right)^2 + \left(\frac{\Delta \alpha_g}{\alpha_g}\right)^2}} \quad (4.7b)$$

In Tabelle 2 auf Seite 31 ist ein derartiger Fehler abgeschätzt worden. Die angegebenen Fehlergrenzen sollten damit repräsentativ sein für die ausgewählten Gassignaturen. Die Schwierigkeit besteht darin, daß nicht für jede einzelne Linie Fehlerangaben bezüglich ihrer Intensität und Halbwertsbreite vorhanden sind. Im allgemeinen existieren diesbezügliche Angaben bestenfalls für einzelne Banden. Generell sind schwache Linien stärker fehlerbehaftet als starke Linien. Außerdem ist zu berücksichtigen, daß bei der Berechnung der Temperaturabhängigkeit der Linienstärke $S_g = S_g(T)$ bzw. Druck-Temperaturabhängigkeit der Halbwertsbreite $\alpha_g = \alpha_g(p,T)$ zusätzliche Fehler auftreten können. Im Rahmen dieser Studie wurden hauptsächlich stärkere Signaturen ausgewählt, die häufig von mehreren Linien eines Gases gebildet werden. Die in Tabelle 2 angegebenen Fehler für die Intensitäten und Halbwertsbreiten der Linien liegen im Bereich zwischen 2 - 10 bzw. 2 - 15 % (ROTHMAN et al. 1987, FLAUD 1992). Der Massenbestimmungsfehler, hervorgerufen durch ungenaue spektroskopische Daten, dürfte daher meist zwischen 5 und 10 % liegen. In Einzelfällen, insbesondere bei schwachen Linien, kann er aber auch Werte bis nahe 20 % annehmen. Im Fall von CCl_2F_2 beruht die Abschätzung auf Genauigkeitsangaben für Wirkungsquerschnitte. Durch die Auswertung

verschiedener Signaturen kann der Einfluß des spektroskopischen Fehlers reduziert werden.

Eine Fehlerquelle mit großen Auswirkungen auf die Genauigkeit der Konzentrationsbestimmung ist die Temperatur. In Tabelle 2 sind dafür Fehlergrenzen angegeben. Beim statistischen Temperaturfehler entsprechen die verrauschten Werte des Temperaturprofils einer Gaußverteilung. Die Bodentemperatur wurde dem untersten verrauschten Temperaturwert im Profil gleichgesetzt. Die angenommene Standardabweichung von $RMS^{14} = 2 \text{ K}$ ergibt sich aus dem Vergleich von vielen vom Satelliten aus und mit Radiosonden gemessenen Temperaturprofilen (z.B. SCOTT et al. 1986, REALE et al. 1990). Abb. 10 auf Seite 37 zeigt das verrauschte Temperaturprofil im Vergleich zum Standardprofil.

Als Gegensatz zu einem statistischen Temperaturfehler wurde auch eine systematische Abweichung simuliert. Dabei wird ein Temperatur-Bias, d.h. eine konstante Abweichung zwischen dem gemessenen und dem wahren Profil, von 0.5 K angenommen. Der Bias der Bodentemperatur beträgt dabei 1 K , was im Rahmen der erreichbaren Meßgenauigkeiten liegt (vgl. Kap. 2.3.1).

Der systematische Temperaturfehler verursacht trotz einer kleineren Standardabweichung von $RMS = 0.5 \text{ K}$ einen größeren Fehler in der Gasmassenbestimmung als der statistische Temperaturfehler ($RMS = 2 \text{ K}$). Der Grund dafür ist, daß sich beim statistischen Fehler die Einzelfehler der Stützstellen im Temperaturprofil teilweise kompensieren können. Häufig liegen aber sowohl beim statistischen als auch beim systematischen Temperaturfehler die Massenbestimmungsfehler im Bereich von 5% . Sie sind dabei in der Regel um so größer, je stärker der Einfluß der Bodenemission $\epsilon_{\Delta\nu} B_{\Delta\nu}(T_0)$ auf die ausgewählten Signaturen ist. Für schwache Signaturen kann dabei der Massenbestimmungsfehler auf über 20% anwachsen. Generell ist der Fehler im Linienzentrum am kleinsten, da hier der Einfluß der Bodenemission am geringsten ist. Der für das Molekül CO angegebene Fehlerschwankungsbereich ist relativ groß, da in diesem Wellenlängenbereich die Temperaturabhängigkeit der Planckfunktion vergleichsweise hoch ist. In Spektralbereichen mit wenig und zugleich schwachen Absorptionslinien kann der Einfluß der Bodenemission durch Anpassen des Kontinuums (in den Lücken zwischen den Linien) im berechneten Spektrum an dasjenige des gemessenen Spektrums weitgehend eliminiert werden. Der Massenbestimmungsfehler sinkt dann im allgemeinen auf Werte von deutlich unter 5% ab. Dies ist beispielsweise im Bereich der CCl_2F_2 -Banden bei 8.6 und $10.8 \mu\text{m}$ der Fall. Die hohen Genauigkeiten sind deshalb angegeben unter der Voraussetzung, daß der Fehlerbeitrag der Bodenemission eliminiert werden konnte.

¹⁴ **Root of Mean Squares**, Wurzel aus der mittleren quadratischen Abweichung

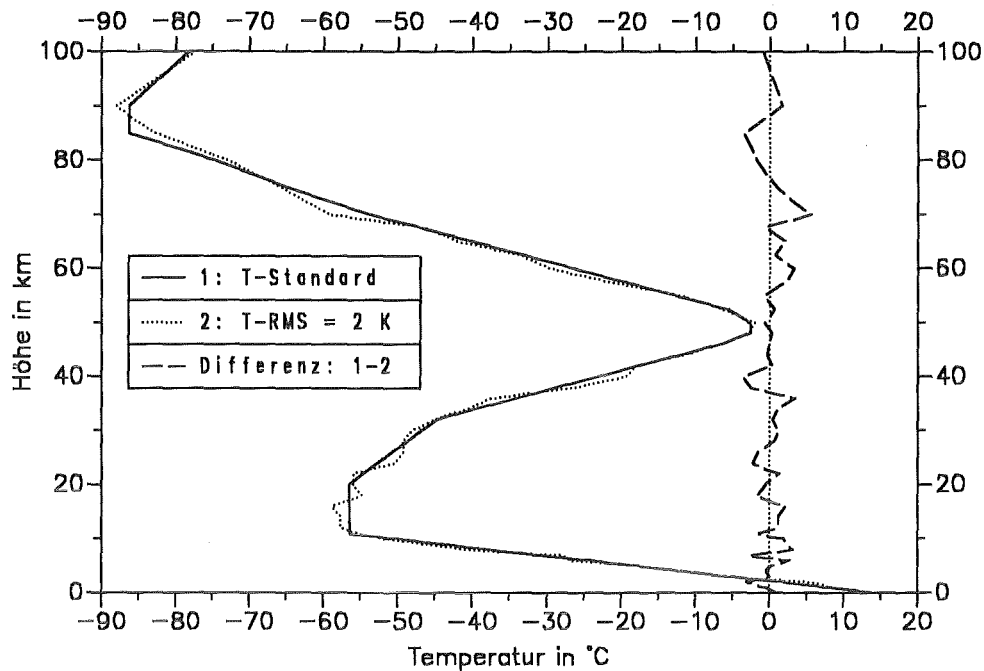


Abbildung 10. Temperaturprofile. Dargestellt ist das Standardprofil sowie ein mit $\text{RMS} = 2 \text{ K}$ verrauschtes Profil. Die gestrichelte Kurve zeigt die Differenz zwischen den Profilen.

Die aufgeführten Fehlerquellen können sich gegenseitig kompensieren. Außerdem ist es möglich, die Fehler durch den Vergleich mehrerer Signaturen eines bestimmten Gases zu erkennen und anschließend zu reduzieren. Daher sollte es möglich sein, den Säulengehalt der Gase H_2O , CH_4 , N_2O , O_3 und CO mit Genauigkeiten von 5 - 15 % zu bestimmen. Nicht zuletzt aufgrund der relativen Unzuverlässigkeit der spektroskopischen Daten dürften bei CCl_2F_2 lediglich Genauigkeiten von 10 - 20 % erreichbar sein. Bei diesen Genauigkeitsangaben ist zu beachten, daß diese unter der Annahme standardisierter Bedingungen abgeleitet wurden. Bei besonderen atmosphärischen Situationen (z.B. kräftige Temperaturinversionen) können sich diese Zahlenwerte ändern.

Bei den genannten Spurengasen ist es also möglich, die Gesamtmasse sowie Informationen über die Verteilung der Gase in der Troposphäre aus Nadirsondierungsspektren mit guter Genauigkeit abzuleiten.

4.2.2 Mit niedriger Genauigkeit meßbare Spurengase

Neben den Spurengasen, die mit hoher Genauigkeit meßbar sind, gibt es auch Moleküle, bei denen die Gesamtmasse entlang des optischen Weges nur mit größeren Unsicherheiten bestimmt werden kann. Dies liegt in erster Linie daran, daß diese Spurenstoffe in zum Teil deutlich geringeren Konzentrationen in der Atmosphäre vorkommen. Die Signaturen dieser Gase sind deshalb in Verbindung mit den verhältnismäßig kurzen optischen Wegen bei der Nadirsondierung nur schwach ausgeprägt und häufig durch Beiträge von Linien anderer Gase maskiert. Tabelle 3 auf Seite 39 zeigt eine Übersicht dieser Gase. Dabei handelt es sich sowohl um stratosphärische Gase (NO_2 , HNO_3) als auch um troposphärische Quellgase (OCS , CCl_3F). Die dargestellten Ergebnisse sind gültig für das Zentrum ausgewählter Signaturen. Für das Gas CCl_3F (FCKW-11) sind keine Signaturen separierbar, das Spektrum enthält lediglich schwach wellenlängenabhängige Beiträge dieses Moleküls. In der Übersicht ist die Massensensitivität der Gassignaturen im Verhältnis zum spektralen Rauschen (NESR) dargestellt. Dabei wurde die gesamte Masse m_g des jeweiligen Gases um 20 bzw. 50 % erhöht und der Quotient aus der daraus resultierenden Strahldichtedifferenz

$$\Delta L_{\Delta v} = L_{\Delta v}(m_{\text{ges}}, T, T_0) - L_{\Delta v}(m_{\text{ges}} + \Delta m_g, T, T_0) \quad (4.8)$$

mit m_{ges} Gesamtmasse der Gase längs des optischen Weges
 Δm_g zusätzliche Masse des gewünschten Gases g

und dem spektralen Rauschen gebildet.

Um das Strahldichtesignal $\Delta L_{\Delta v}$ auflösen zu können, sollte für das Signal-zu-Rausch-Verhältnis (SNR^{15}) gelten:

$$\text{SNR} = \frac{\Delta L_{\Delta v}}{\text{NESR}} \geq 2 \quad (4.9)$$

Für $\text{SNR} = 1$ ist das Strahldichtesignal $\Delta L_{\Delta v}$ nicht mehr vom Rauschen zu unterscheiden. Es muß betont werden, daß die NESR der einfachen Standardabweichung σ_s entspricht. Das bedeutet, daß bei der Grenzbedingung $\Delta L_{\Delta v} = 2 \text{ NESR}$ in etwa 95 % aller Fälle $\Delta L_{\Delta v}$ gerade noch vom Rauschen zu unterscheiden ist. Bei *gleichzeitiger* Betrachtung von n systematisch verteilten Stützstellen genügt ein um den Faktor $1/\sqrt{n}$ kleineres SNR, um dieses systematische Muster (z.B. HNO_3 -Signaturen, Abb. 13 auf Seite 42) vom statistischen Rauschen unterscheiden zu können.

¹⁵ Signal to Noise Ratio

Tabelle 3. Satelliten-Nadirsondierung (2). Messbarkeit von Spurengasen. Gültig für den zentralen Bereich ausgewählter Signaturen (sofern vorhanden).

Gas	geeignete Spektralbereiche (cm ⁻¹)	spektrale Auflösung (cm ⁻¹)	spektrales Rauschen (NESR) (W/(cm ² sr cm ⁻¹))	maximales $\frac{\Delta L_{\Delta\nu}}{\text{NESR}}$ bei Δm_g : + 20 % (Signatur in cm ⁻¹)	maximales $\frac{\Delta L_{\Delta\nu}}{\text{NESR}}$ bei Δm_g : + 50 % (Signatur in cm ⁻¹)
NO ₂	1580 - 1650	0.05	3.0•10 ⁻⁹	1.1 (1604.57)	2.8 (1604.57)
OCS	2040 - 2080	0.05	2.0•10 ⁻⁹	1.6 (2052.71)	3.9 (2052.71)
HNO ₃	850 - 920	0.10	1.5•10 ⁻⁸	2.6 (896.42)	6.5 (896.42)
CCl ₃ F (FCKW-11)	840 - 860 ⁽¹⁾	0.10 ⁽²⁾	1.5•10 ⁻⁸	1.6 (847 - 849 bzw. 850 - 851 ⁽¹⁾)	3.3 (847 - 849 bzw. 850 - 851 ⁽¹⁾)
Legende: (1) keine Signaturen separierbar, nur Kontinuumsbeiträge (2) diese hohe spektrale Auflösung ist wegen (1) nicht unbedingt erforderlich					

Aus Tabelle 3 ist zu ersehen, daß für alle aufgeführten Gase bei einer Massenerhöhung von 50 % das maximale Signal-zu-Rausch-Verhältnis groß genug ist um die Bedingung $SNR \geq 2$ zu erfüllen. Diese Bedingung wird für das Molekül HNO_3 bereits bei einer 20-prozentigen Massenerhöhung erfüllt. Temperaturfehler sowie Fehler infolge ungenauer Eichung oder fehlerhafter spektroskopischer Daten sind in Tabelle 3 nicht berücksichtigt. Im Normalfall sind diese jedoch deutlich kleiner.

Für das Gas NO_2 ist zu bemerken, daß die Bodenemission $\varepsilon_{\Delta\nu, B_{\Delta\nu}}(T_0)$ im Bereich der $6.2 \mu m$ -Bande praktisch keine Rolle spielt, da die Absorption in diesem Spektralbereich aufgrund der starken H_2O -Bande mit Zentrum bei $6.3 \mu m$ sehr groß ist. Die separierten NO_2 -Signaturen befinden sich in den Lücken zwischen den sehr starken H_2O -Signaturen (siehe Abb. 11). Die NO_2 -Signaturen sind somit lediglich durch Kontinuumsbeiträge entfernter H_2O -Linien und durch die Flügel benachbarter starker Linien gestört, nicht aber durch Fremdlinien, die sich unmittelbar im Bereich der NO_2 -Signaturen befinden. Dies bedeutet, daß kleinere Schwankungen der H_2O -Konzentration von einigen Prozent prak-

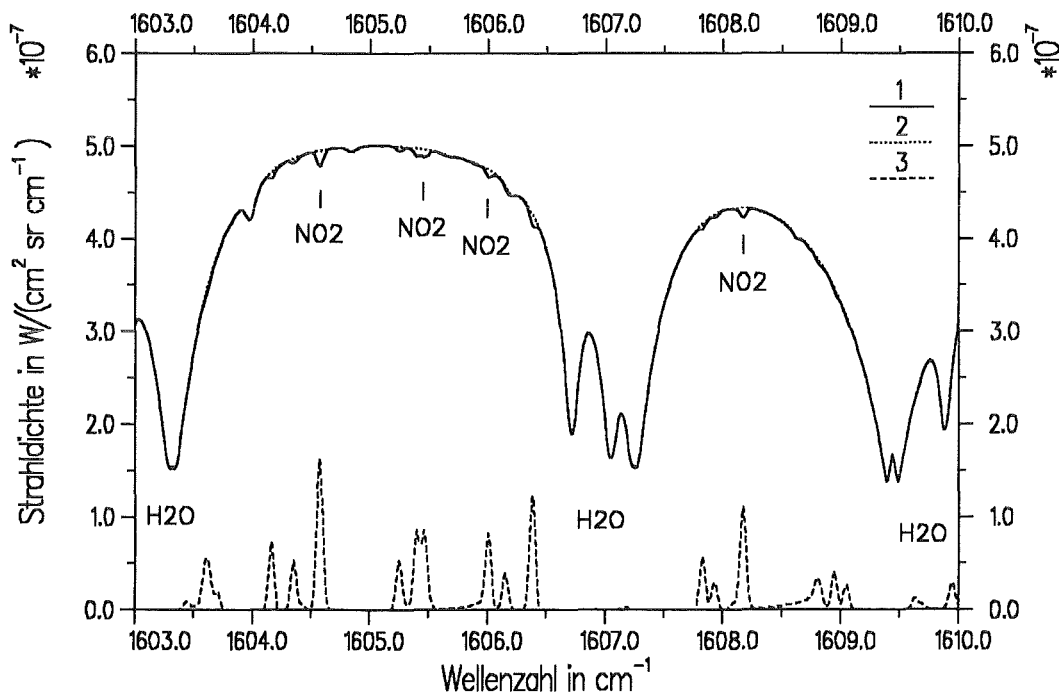


Abbildung 11. Strahldichtespektren im Bereich der $6.2 \mu m$ NO_2 -Bande ($\Delta\nu = 0.05 \text{ cm}^{-1}$).

$NESR = 3.0 \cdot 10^{-9} \text{ W}/(\text{cm}^2 \text{ sr cm}^{-1})$

1: alle Gase

2: alle Gase ohne NO_2

3: Differenz $(2 - 1) \cdot 10$

Die separierten NO_2 -Signaturen befinden sich in den Lücken zwischen den sehr starken H_2O -Signaturen.

tisch keinen Einfluß auf die Differenz der dargestellten Spektren in Abb. 11 hat und somit das Strahldichtesignal, das die Information über die NO_2 -Gesamtmasse enthält, davon nahezu unberührt bleibt. Ähnliche Verhältnisse findet man für das Gas OCS vor. Die OCS-Signaturen sind eingebettet zwischen starken CO_2 -Signaturen und schwächeren H_2O -Signaturen (siehe Abb. 12). Um sowohl NO_2 - als auch OCS-Signaturen im Spektrum noch gut separieren zu können, sollte die spektrale Auflösung mindestens $\Delta\nu = 0.05 \text{ cm}^{-1}$ betragen.

Die Absorptionslinien des Moleküls HNO_3 befinden sich in dem insgesamt gesehen schwach absorbierenden Bereich des atmosphärischen Fensters, eingebettet zwischen einzelnen H_2O -Signaturen (siehe Abb. 13 auf Seite 42). Dabei treten im wesentlichen nur die beiden Q-Zweige der $11.3 \mu\text{m}$ -Bande hervor. Der langwellige Q-Zweig bei 878.98 cm^{-1} wird zudem stark gestört von einer H_2O -Signatur. Separiert ist deshalb nur der Q-Zweig bei 896.42 cm^{-1} . Im Falle einer Auswertung des Spektrums hinsichtlich einer

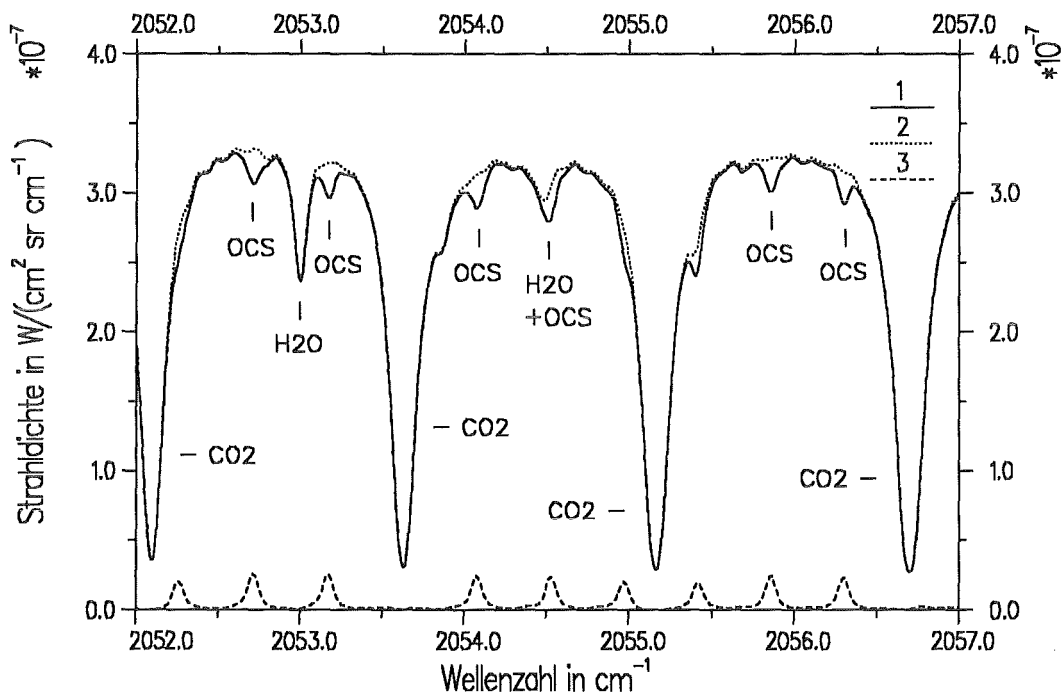


Abbildung 12. Nadirsondierung im Bereich der $4.85 \mu\text{m}$ OCS-Bande ($\Delta\nu = 0.05 \text{ cm}^{-1}$).

NESR = $2.0 \cdot 10^{-9} \text{ W}/(\text{cm}^2 \text{ sr cm}^{-1})$

- 1: alle Gase
- 2: alle Gase ohne OCS
- 3: Differenz 2 - 1

Die separierten OCS-Signaturen befinden sich in den Lücken zwischen den starken CO_2 -Signaturen.

HNO₃-Massenbestimmung läßt sich der Einfluß einer ungenauen Kenntnis der Bodenemission durch Anpassen des Kontinuums im Bereich zwischen den Linien im gerechneten Spektrum an dasjenige im gemessenen Spektrum reduzieren.

Schwieriger sind die Verhältnisse bei CCl₃F. Wie aus Abb. 14 auf Seite 43 zu ersehen, ist der Beitrag dieses Gases im Kontinuum enthalten. Um die Information über die CCl₃F-Masse in der Atmosphäre von der Information über die Bodenemission trennen zu können, muß letztgenannte schon als a priori Information vorliegen. Dies bedeutet, die Bodenemission muß zuvor in anderen Spektralbereichen mit möglichst schwacher (Kontinuums-) Absorption bestimmt werden. Dies setzt wiederum eine genaue Kenntnis des Offsets, also der absoluten radiometrischen Genauigkeit voraus.

Wie genau die Massen der Gase NO₂, OCS, HNO₃ und CCl₃F aus Nadirsondierungsspektren bestimmt werden können, hängt neben Temperaturfehlern und radiometrischen Ungenauigkeiten auch von der Genauigkeit der spektroskopischen Daten ab. Wie bereits erwähnt, ist dieser letztgenannte Fehler für einzelne Signaturen nur schwer abschätz-

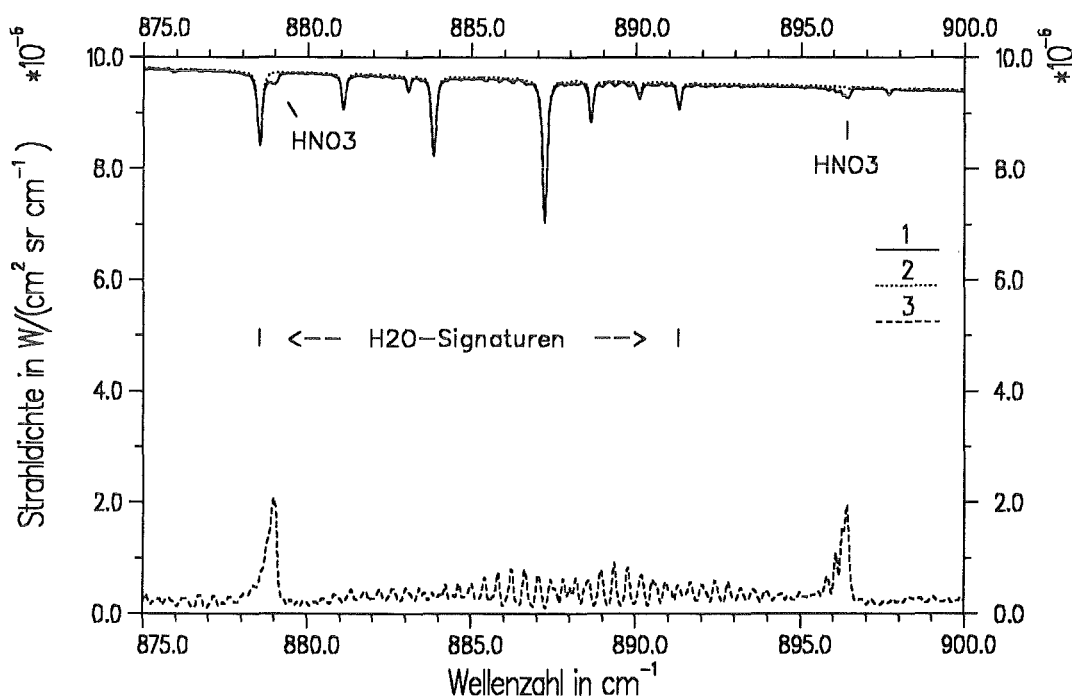


Abbildung 13. Strahldichtespektren im Bereich der 11.3 µm HNO₃-Bande ($\Delta\nu = 0.1 \text{ cm}^{-1}$).

$$\text{NESR} = 1.5 \cdot 10^{-8} \text{ W}/(\text{cm}^2 \text{ sr cm}^{-1})$$

1: alle Gase

2: alle Gase ohne HNO₃

3: Differenz (2 - 1) · 10

Die beiden HNO₃-Q-Zweige bei 878.98 cm⁻¹ und 896.42 cm⁻¹ sind markiert.

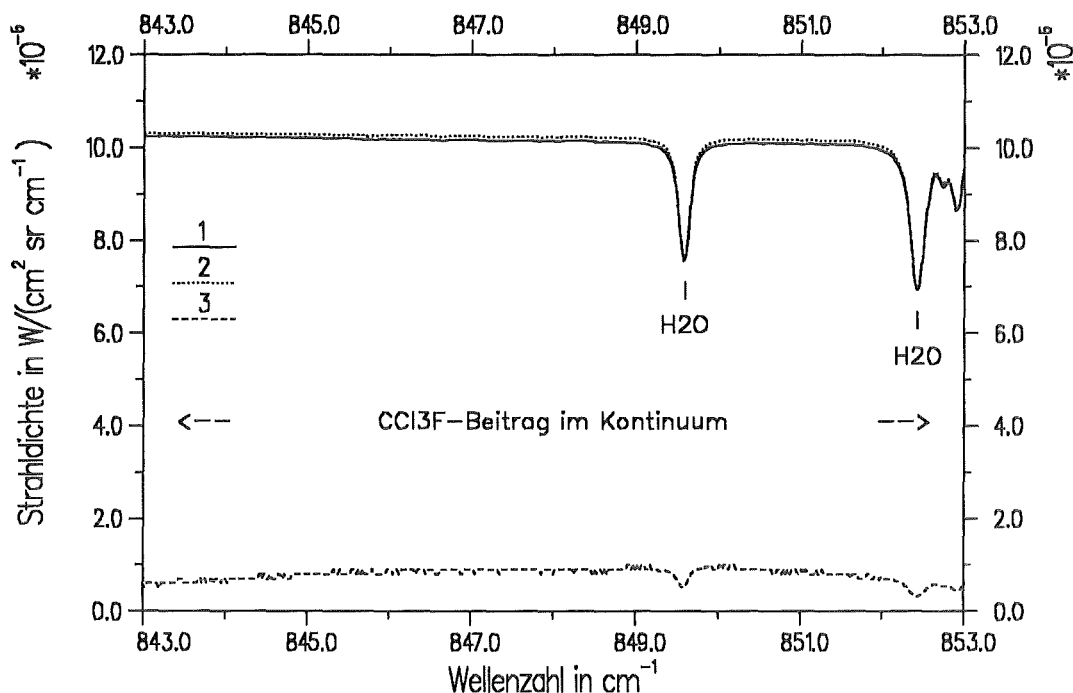


Abbildung 14. Strahldichtespektren im Bereich der 11.8 μm CCl_3F -Bande ($\Delta\nu = 0.1 \text{ cm}^{-1}$).

$$\text{NESR} = 1.5 \cdot 10^{-8} \text{ W}/(\text{cm}^2 \text{ sr cm}^{-1})$$

1: alle Gase

2: alle Gase ohne CCl_3F

3: Differenz $(2 - 1) \cdot 10$

Es sind keine CCl_3F -Signaturen separierbar. Im Spektrum sind lediglich CCl_3F -Kontinuumsbeiträge sichtbar. Die kleinen kurzperiodischen Schwankungen bei Kurve 3 sind numerisches Rauschen.

bar. Betrachtet man nur den Einfluß des spektralen Rauschens, so ist es nach den Aussagen von Tabelle 3 unter Berücksichtigung der Bedingung (4.9) möglich, die Gesamtmasse (Troposphäre + Stratosphäre) in Abhängigkeit der Gase auf bis zu 20 % (HNO_3) bzw. bis zu 50 % (NO_2 , OCS , CCl_3F) genau zu bestimmen.

Im Rahmen dieser Studie wurde die Meßbarkeit weiterer Spurengase untersucht. Die stärkste Bande des Gases SO_2 bei $7.3 \mu\text{m}$ befindet sich im Bereich der starken $6.3 \mu\text{m}$ H_2O -Bande. Daher verlieren sich bei einer Nadirsondierung selbst bei einem hohen bodennahen SO_2 -Mischungsverhältnis (400 ppbv) die im reinen SO_2 -Spektrum erkennbaren Strukturen im von H_2O geprägten Gesamtspektrum. Der SO_2 -Beitrag ist sehr klein, was im übrigen auch für die schwächeren Banden bei 19.3 und $8.7 \mu\text{m}$ gilt.

Nur wenig günstiger sind die Verhältnisse bei Stickstoffmonoxid. Die einzige NO -Bande im Spektralbereich des mittleren Infrarots befindet sich bei $5.33 \mu\text{m}$. Nur bei einem sehr

starken NO-Mischungsverhältnis (bis 1 ppmv am Boden) sind schwache NO-Signaturen, die auf dem starken H₂O-Kontinuum sitzen, erkennbar.

Nach den gewonnenen Erkenntnissen erscheint es daher nicht bzw. nur sehr schwer möglich zu sein, für diese zuletzt genannten Gase deren Konzentration in der Troposphäre oder wenigstens der gesamten Atmosphäre mittels einer Nadirsondierung zu bestimmen. Auch eine gesteigerte spektrale Auflösung von besser als 0.05 cm⁻¹ wird an diesem Gesichtspunkt nichts wesentliches ändern. Eine schräge Beobachtungsgeometrie bei der Nadirsondierung ($\Theta \neq 0^\circ$) erhöht nicht nur die Masse des gesuchten Gases entlang des optischen Weges, sondern auch die Masse sämtlicher maskierender Stör-gase und bringt in diesem Zusammenhang deshalb in der Regel keine Vorteile.

Für eine Reihe weiterer Spurenstoffe wurden Strahldichterechnungen durchgeführt (NH₃, HCl, CCl₄, CF₄, CHCl₂ (FCKW-21), CHF₂Cl (FCKW-22), H₂O₂, C₂H₂ und C₂H₆). Allerdings erscheint eine Nadirsondierung bestenfalls für HCl (und eventuell noch FCKW-22) bei der heutigen Zusammensetzung der Atmosphäre möglich. Bei HCl ist zu beachten, daß im Bereich der Bande bei 3.5 µm die solare Streustrahlung nicht mehr vernachlässigbar ist. Bei den Fluorchlorkohlenwasserstoffen ist in den kommenden Jahren mit einer generellen Verbesserung der Meßbedingungen zu rechnen, da deren Konzentration zur Zeit jährlich um mehrere Prozent anwächst. Detaillierte Angaben hierzu übersteigen den Rahmen dieser Studie.

Im zurückliegenden Kapitel wurde in einer Übersicht gezeigt, welche Gase mit welcher Genauigkeit unter Berücksichtigung gewisser Fehlerquellen meßbar sind. Im folgenden werden nun einige Einzelbeispiele diskutiert.

4.2.3 Detaillierte Untersuchungen kurzlebiger Gase in der Troposphäre

4.2.3.1 Wasserdampf (H₂O)

Wasserdampf ist das am stärksten absorbierende Spurengas in der Troposphäre. Von allen Spurengasen ist das H₂O-Volumenmischungsverhältnis in der unteren und mittleren Troposphäre am größten und erreicht bei der benutzten Standardatmosphäre einen Bodenwert von knapp 1 % (vgl. Abb. 2 auf Seite 8). Die räumliche und zeitliche Variabilität des Mischungsverhältnisses ist recht hoch. Daneben besitzt H₂O zahlreiche Absorptionsbanden unterschiedlicher Intensität im gesamten Spektralbereich des mittleren Infrarots. Das Zentrum der stärksten Bande befindet sich bei 6.3 μm . Über weite Spektralbereiche findet man sehr viele gut separierte H₂O-Signaturen, die dazu geeignet

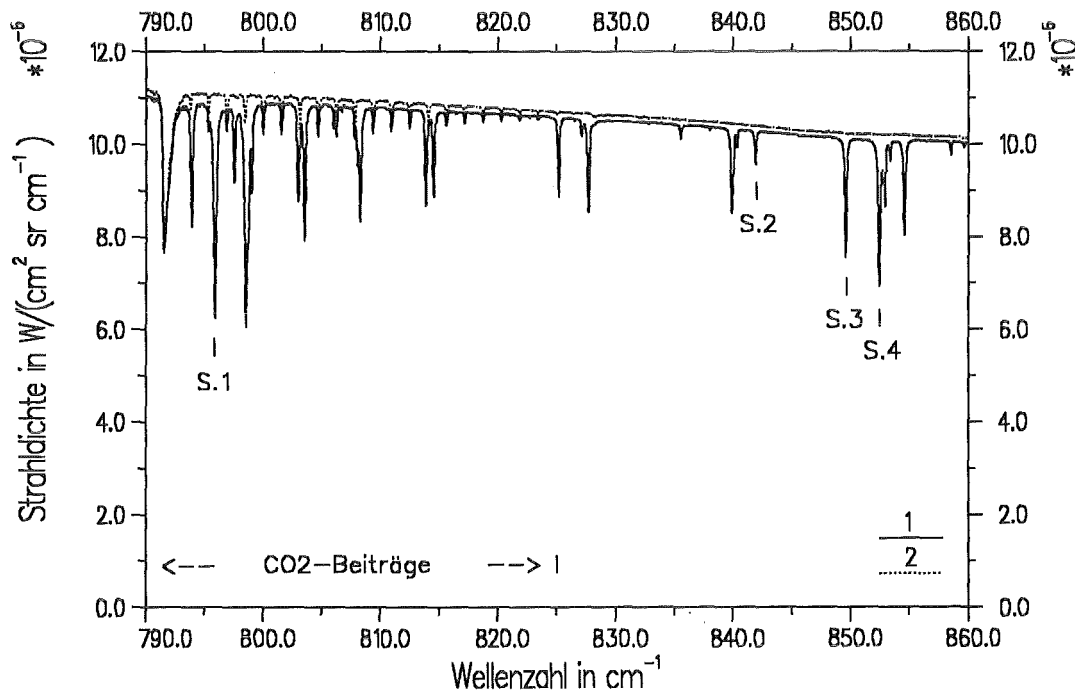


Abbildung 15. Strahldichtespektren im Bereich nahe $\lambda = 12 \mu\text{m}$.

NESR = $1.5 \cdot 10^{-8} \text{ W}/(\text{cm}^2 \text{ sr cm}^{-1})$, $\Delta\nu = 0.1 \text{ cm}^{-1}$

1: alle Gase

2: alle Gase ohne H₂O

H₂O-Signatur 1: 795.90 cm^{-1}

H₂O-Signatur 2: 841.90 cm^{-1}

H₂O-Signatur 3: 849.58 cm^{-1}

H₂O-Signatur 4: 852.43 cm^{-1}

Neben zahlreichen H₂O-Signaturen sind unterhalb von $\nu = 825 \text{ cm}^{-1}$ auch zumeist schwache CO₂-Signaturen vorhanden.

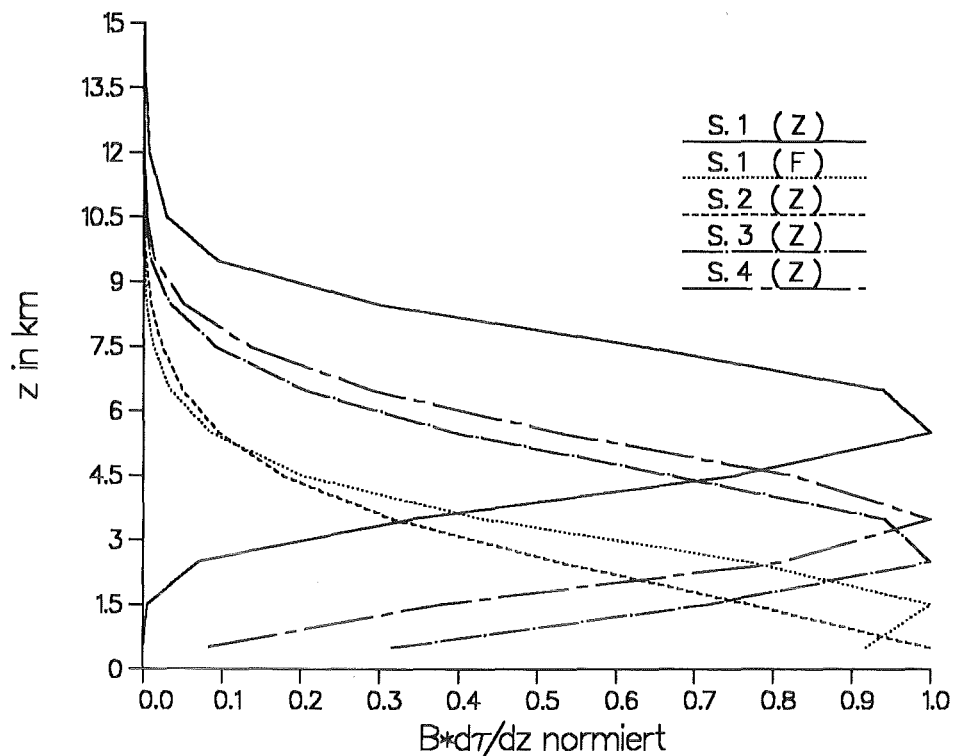


Abbildung 16. Beitragsfunktionen für H₂O-Signaturen. Dargestellt ist der zentrale Linienbereich (Z) sowie die massensensitivste Stelle (F) der Signatur 1 mit $\Delta\nu = 0.1 \text{ cm}^{-1}$.

sind, Rückschlüsse auf das Mischungsverhältnis dieses Gases in der Troposphäre zu ziehen.

Abb. 15 auf Seite 45 zeigt ein Spektrum im Wellenlängenbereich des atmosphärischen Fensters um $12 \mu\text{m}$. Die H₂O-Signaturen sind in der Darstellung gut zu erkennen. Darüberhinaus enthält das Spektrum noch Signaturen des Gases CO₂. Beiträge von Gasen wie CCl₃F sind in geringem Maße im Kontinuum enthalten und daher nicht relevant. Die vier markierten H₂O-Signaturen sind von unterschiedlicher Stärke. Ihre Beitragsfunktionen weisen Maxima in verschiedenen Höhen in der Troposphäre auf (siehe Abb. 16). Aufgrund der hohen troposphärischen H₂O-Konzentration ist der Bereich der stärksten Transmissionsänderung recht schmal und die Halbwertsbreiten der Funktionen sind deshalb mit rund 3 bis 4 km verhältnismäßig klein. Dargestellt sind die zentralen Linienbereiche (Z) sowie der massensensitivste Teil des Flügels der Signatur 1 mit einer spektralen Auflösung von $\Delta\nu = 0.1 \text{ cm}^{-1}$. Der Einfluß der Bodenemission $\varepsilon_{\Delta\nu} B_{\Delta\nu}(T_0)$ muß bei der Signatur 2 (841.90 cm^{-1}) in starkem Maße berücksichtigt werden, während er im Zentrum der Signatur 1 (795.90 cm^{-1}) praktisch gleich null ist. Dieser Effekt wird auch durch die Zahlenwerte in Tabelle 4 auf Seite 47 deutlich. Dort ist die Massensensitivität der Signaturen im Vergleich zur Temperatursensitivität dargestellt. In der dritten Spalte ist die absolute bzw. relative Strahldichteänderung ($\Delta L_{\Delta\nu,1}$) infolge einer 20-prozentigen

Erhöhung der troposphärischen H₂O-Masse eingetragen. Für die ausgewählten Signaturen ist das Signal-zu-Rausch-Verhältnis $\Delta L_{\Delta\nu,1}/\text{NESR} > 10$. Abgesehen von der Signatur 1 ist die Massenempfindlichkeit im Zentrum dieser ausgewählten Signaturen am größten.

Die Spalten vier und fünf enthalten Strahldichteänderungen, hervorgerufen durch eine systematische Veränderung der Atmosphärentemperatur um 0.5 K ($\Delta L_{\Delta\nu,2}$) sowie einer zusätzlichen Variation der Bodentemperatur von 1.0 K ($\Delta L_{\Delta\nu,3}$). Die Quotienten der Strahldichtedifferenzen $\Delta L_{\Delta\nu,1}/\Delta L_{\Delta\nu,2}$ bzw. $\Delta L_{\Delta\nu,1}/\Delta L_{\Delta\nu,3}$ beschreiben die Qualität Q_s einer Signatur entsprechend den Gleichungen (3.3a) und (3.3b), also das Verhältnis von Massen- zu Temperatursensitivität.

Signatur (cm ⁻¹)	$L_{\Delta\nu}$	$\Delta L_{\Delta\nu,1}$ $\Delta m_{\text{H}_2\text{O}, \text{Trop}}$ + 20 %	$\Delta L_{\Delta\nu,2}$ T-Profil: Bias = 0.5 K	$\Delta L_{\Delta\nu,3}$ T-Profil: Bias = 0.5 K T ₀ : Bias = 1.0 K	$\frac{\Delta L_{\Delta\nu,1}}{\Delta L_{\Delta\nu,2}}$	$\frac{\Delta L_{\Delta\nu,1}}{\Delta L_{\Delta\nu,3}}$
1: 795.90 (Z) 795.70 (F)	0.6247 0.9460	0.0161 (2.6) 0.0228 (2.4)	0.0050 (0.8) 0.0056 (0.6)	0.0050 (0.8) 0.0078 (0.8)	3.2 4.1	3.2 2.9
2: 841.90 (Z)	0.9570	0.0152 (1.6)	0.0032 (0.3)	0.0119 (1.2)	4.8	1.3
3: 849.58 (Z)	0.7568	0.0205 (2.7)	0.0052 (0.7)	0.0059 (0.8)	3.9	3.5
4: 852.43 (Z)	0.6934	0.0211 (3.0)	0.0051 (0.7)	0.0052 (0.7)	4.1	4.1
$L_{\Delta\nu}, \Delta L_{\Delta\nu}$ in $10^{-5} \text{ W}/(\text{cm}^2 \text{ sr cm}^{-1})$, bzw. in Klammern: $\Delta L_{\Delta\nu}/L_{\Delta\nu}$ in %, $\text{NESR} = 1.5 \cdot 10^{-8} \text{ W}/(\text{cm}^2 \text{ sr cm}^{-1})$						

Tabelle 4. Nadirsondierung von troposphärischem H₂O. Massen- und Temperatursensitivität im Zentrum (Z) sowie im Flügelbereich (F) ausgewählter Signaturen, $\Delta\nu = 0.1 \text{ cm}^{-1}$.

Die Zahlenwerte in Tabelle 4 bestätigen die Aussagen der Beitragsfunktionen. Im Zentrum der Signatur 1 (795.90 cm⁻¹) ist kein Einfluß der Bodentemperatur zu erkennen. Die Strahldichtedifferenzen $\Delta L_{\Delta\nu,2}$ und $\Delta L_{\Delta\nu,3}$ sind gleich groß und deshalb auch die Quotienten $\Delta L_{\Delta\nu,1}/\Delta L_{\Delta\nu,2}$ sowie $\Delta L_{\Delta\nu,1}/\Delta L_{\Delta\nu,3}$. Hier spielen also praktisch nur Fehler im Temperaturprofil eine Rolle. Dies gilt allerdings nicht für die ausgewählte Stützstelle im massensensitivsten Teil ($\Delta L_{\Delta\nu,1}$ maximal) der Flanke. Dort unterscheiden sich die beiden Quotienten deutlich. Für das Zentrum der Signatur 4 (852.43 cm⁻¹) gilt im wesentlichen dasselbe wie für das Zentrum der Signatur 1, da sich $\Delta L_{\Delta\nu,2}$ sowie $\Delta L_{\Delta\nu,3}$ nur geringfügig unterscheiden. Der schwache Einfluß der Bodenemission spiegelt sich im Verlauf der Beitragsfunktion wider (vgl. Abb. 16 auf Seite 46). Bei der Signatur 3 (849.58 cm⁻¹) macht sich der Bodenterm leicht, bei der Signatur 2 (841.90 cm⁻¹) dagegen stark bemerkbar. Deshalb ist hier $\Delta L_{\Delta\nu,1}/\Delta L_{\Delta\nu,2}$ wesentlich größer als $\Delta L_{\Delta\nu,1}/\Delta L_{\Delta\nu,3}$.

Bei der folgenden Betrachtung soll mit einem einfachen Verfahren gezeigt werden, wie aus einem gemessenen Spektrum Information über das Vertikalprofil von Wasserdampf

abgeleitet werden kann. Dazu wird ein "gemessenes" Spektrum simuliert, dessen zugehöriges Atmosphärenmodell (Referenzmodell) der Wahrheit entsprechen soll. Desweiteren wird ein zweites Spektrum berechnet, wobei hier die H₂O-Masse systematisch in allen Schichten um 5 % zu hoch angenommen wird. Entsprechend den Beitragsfunktionen wird nun die H₂O-Konzentration in einem bestimmten Höhenintervall im Wellenzahlbereich des Zentrums der jeweiligen Signatur solange variiert, bis eine bestmögliche Anpassung zwischen berechnetem und "gemessenem" Spektrum möglich ist. Das Höhenintervall wird dadurch festgelegt, daß die von der Beitragsfunktion eingeschlossene Fläche zwischen den Begrenzungshöhen 50 % der Gesamtfläche beträgt, wobei sich die Höhe des Funktionsmaximums in der Mitte zwischen den Begrenzungshöhen befindet.

H ₂ O-Signatur	Wellenzahlbereich (cm ⁻¹)	Variation der H ₂ O-Masse im Höhenbereich (km)	Fehler in der H ₂ O-Massenbestimmung (im betr. Höhenbereich) (%)
1	795.85 - 795.95	4.0 - 6.5	3.0
2	841.85 - 841.95	0.5 - 3.0	4.3
3	849.53 - 849.63	1.0 - 3.5	3.7
4	852.38 - 852.48	2.0 - 4.5	3.1

Tabelle 5. Ableitung von Information über die vertikale Verteilung von H₂O in der Troposphäre.

Anpassung des gerechneten Spektrums an das "gemessene" Spektrum über die Variation der H₂O-Masse in bestimmten Höhenbereichen, die entsprechend der Beitragsfunktionen der betrachteten Signaturen ausgewählt sind (spektrale Auflösung $\Delta\nu = 0.1 \text{ cm}^{-1}$).

Tabelle 5 zeigt als Ergebnis für die ausgewählten Signaturen, daß der Fehler in der Massenbestimmung im variierten Höhenbereich lediglich zwischen 3.0 und 4.3 % liegt. Der zur Signatur 2 gehörende Höhenbereich liefert das schlechteste Ergebnis, da der Anteil des Bodensignals am Gesamtsignal vergleichsweise groß ist (vgl. Abb. 16 auf Seite 46). Dabei handelt es sich um voneinander unabhängige Informationen über die Qualität einzelner Atmosphärenschichten in den angegebenen Höhenbereichen hinsichtlich der Bestimmung des Gasprofiles. Mit Hilfe geeigneter Inversionsmethoden ist es möglich, bei der Auswertung der aktuellen Schicht die Ergebnisse der zuvor ausgewerteten Schichten als a priori Information einfließen zu lassen. Damit kann die Genauigkeit des Gasprofiles gesteigert werden. Da sich die in Tabelle 5 gezeigten Schichten vertikal überlappen, ist die Höhengauflösung nicht gleich der Anzahl der Schichten sondern kleiner. Unter Berücksichtigung der Tatsache, daß man im Bereich der starken 6.3 μm -Bande Signaturen findet, deren Beitragsfunktionen Maxima in der oberen Tropo-

sphäre (bzw. unteren Stratosphäre) besitzen, ist in Tabelle 2 auf Seite 31 eine Höhenauflösung von 3 - 4 Schichten für den Bereich der Troposphäre angegeben.

Die betrachtete Fallstudie zeigt, daß es möglich ist, brauchbare Information über die vertikale Verteilung von Wasserdampf in der Troposphäre aus einem gemessenen Spektrum abzuleiten. Da sich längs eines vertikalen optischen Weges durch die Atmosphäre etwa 99.9 % der H₂O-Masse in der Troposphäre befindet, ist der Fehler in der H₂O-Gesamtmassenbestimmung in der Troposphäre praktisch identisch mit dem Fehler für die Gesamtmasse in der Atmosphäre und kann daher mit 5 - 15 % angegeben werden (vgl. Kap. 4.2.1).

4.2.3.2 Kohlenmonoxid (CO)

Die einzige Absorptionsbande von CO im Spektralbereich des mittleren Infrarots befindet sich in dessen kurzwelligem Teil nahe 4.6 µm. Ein Teil des P-Zweiges der CO-Bande unterhalb von 2130 cm⁻¹ ist dabei durch die Gase O₃ und CO₂ ebenso gestört wie der kurzwellige Teil des R-Zweiges, insbesondere oberhalb von 2170 cm⁻¹ durch das Gas N₂O. Außerdem ist die CO-Bande in weiten Bereichen durch H₂O-Absorptionslinien überlagert. Ein durch Fremdgase vergleichsweise wenig beeinflusster Spektralbereich ist der R-Zweig zwischen 2150 und 2160 cm⁻¹. Die Stärke der in diesem Bereich enthaltenen CO-Signaturen ist nicht sehr unterschiedlich (siehe Abb. 17 auf Seite 50). Die Signaturen enthalten im Bereich der Flanken schwächere Beiträge der Gase H₂O bzw. N₂O.

Signatur (cm ⁻¹)	L _{Δv}	ΔL _{Δv,1} Δm _{CO,Trop:} + 20 %	ΔL _{Δv,2} T-Profil: Bias = 0.5 K	ΔL _{Δv,3} T-Profil: Bias = 0.5 K T ₀ : Bias = 1.0 K	$\frac{\Delta L_{\Delta v,1}}{\Delta L_{\Delta v,2}}$	$\frac{\Delta L_{\Delta v,1}}{\Delta L_{\Delta v,3}}$
1: 2150.85 (Z) 2150.80 (F)	0.7782 1.1490	0.0887 (11.4) 0.0940 (8.2)	0.0125 (1.6) 0.0150 (1.3)	0.0242 (3.1) 0.0360 (3.1)	7.1 6.3	3.7 2.6
2: 2154.60 (Z) 2154.50 (F)	0.5520 1.3790	0.0673 (12.2) 0.0920 (6.7)	0.0126 (2.3) 0.0160 (1.2)	0.0175 (3.2) 0.0430 (3.1)	5.3 5.8	3.8 2.1
3: 2158.30 (Z) 2158.40 (F)	0.4639 1.3330	0.0596 (12.8) 0.0950 (7.1)	0.0101 (2.2) 0.0150 (1.1)	0.0141 (3.0) 0.0450 (3.4)	5.9 6.3	4.2 2.1
L _{Δv} , ΔL _{Δv} in 10 ⁻⁷ W/(cm ² sr cm ⁻¹), bzw. in Klammern: ΔL _{Δv} /L _{Δv} in %, NESR = 10 ⁻⁹ W/(cm ² sr cm ⁻¹)						

Tabelle 6. Nadirsondierung von troposphärischem CO. Massen- und Temperatursensitivität ausgewählter Signaturen im Zentrum (Z) sowie an der massensensitivsten Stelle im Flügel (F), Δv = 0.1 cm⁻¹.

In Tabelle 6 ist die Massensensitivität der Signaturen im Vergleich zu deren Temperatursensitivität dargestellt. Da die CO-Signaturen recht stark sind, befindet sich der massensensitivste Teil nicht in deren Zentrum, sondern etwas davon entfernt im Flügelbereich. Diese spektrale Stützstelle wurde neben dem Linienzentrum in Tabelle 6 aufgenommen. Die absolute Strahldichteänderung $\Delta L_{\Delta\nu,1}$ ist dort am größten. Für alle betrachteten Stützstellen ist das Signal-zu-Rausch-Verhältnis $\Delta L_{\Delta\nu,1}/\text{NESR} > 5$. In Abb. 18 auf Seite 51 ist diese durch eine CO-Massenänderung hervorgerufene Strahldichtedifferenz $\Delta L_{\Delta\nu,1}$ neben den durch Temperaturvariationen hervorgerufenen Differenzen $\Delta L_{\Delta\nu,2}$ und $\Delta L_{\Delta\nu,3}$ sowie der NESR aufgetragen. Deutlich ist das zentrale Nebenminimum der Massensensitivität zu erkennen. Die Transmission sinkt im Zentrum der betrachteten Signatur bei einer spektralen Auflösung von $\Delta\nu = 0.1 \text{ cm}^{-1}$ auf $\tau \approx 0.04$ ab, d.h. die Atmosphäre ist im Zentrum der hochaufgelösten Linie optisch dicht. Die Temperatursensitivi-

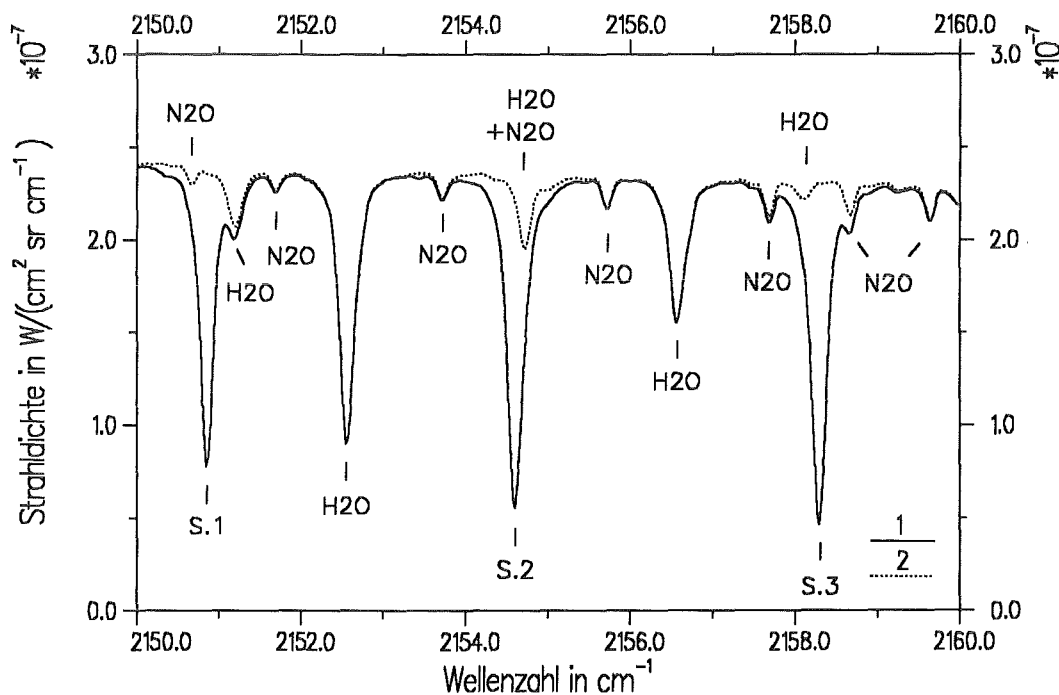


Abbildung 17. Strahldichtespektren im Bereich der $4.6 \mu\text{m}$ CO-Bande.

$\text{NESR} = 10^{-9} \text{ W}/(\text{cm}^2 \text{ sr cm}^{-1})$, $\Delta\nu = 0.1 \text{ cm}^{-1}$

1: alle Gase

2: alle Gase ohne CO

CO-Signatur 1: 2150.85 cm^{-1}

CO-Signatur 2: 2154.60 cm^{-1}

CO-Signatur 3: 2158.30 cm^{-1}

Das Spektrum ist geprägt von CO-Signaturen, sowie einigen H_2O - bzw. schwächeren N_2O -Signaturen.

tät, insbesondere die Abhängigkeit von der Bodentemperatur ist deshalb im Zentrum der Spektrallinie am kleinsten. Bei einer Signatur von derartige Stärke würde man allerdings eine viel geringere Abhängigkeit von der Bodenemission erwarten. Als Begründung für diesen Aspekt kann angegeben werden, daß die Planckfunktion bei den atmosphärischen Temperaturverhältnissen in diesem Spektralbereich eine recht große Temperaturabhängigkeit aufweist.

Dies spiegelt sich auch in den Zahlenwerten in Tabelle 6 wider und zwar bei allen ausgewählten Signaturen. Die Quotienten $\Delta L_{\Delta\nu,1}/\Delta L_{\Delta\nu,2}$ und $\Delta L_{\Delta\nu,1}/\Delta L_{\Delta\nu,3}$ sind ziemlich unterschiedlich. Vergleicht man die Quotienten hinsichtlich des Unterschiedes zwischen Zentrum und Flanke der Signaturen, so läßt sich daraus schließen, daß, je größer der ange-

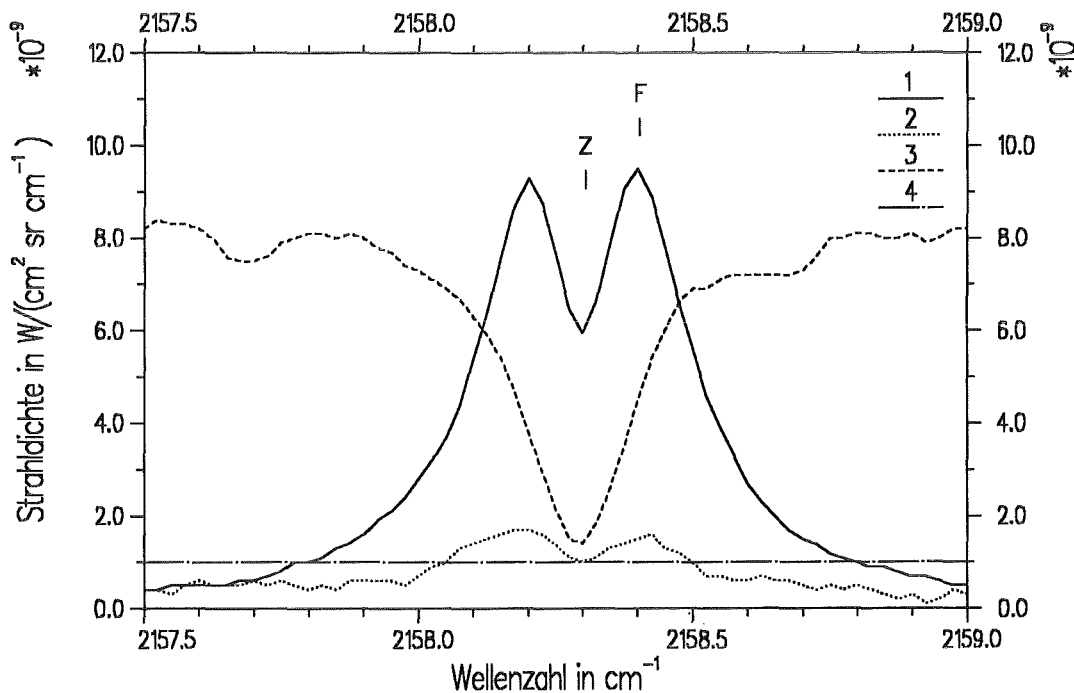


Abbildung 18. Differenzspektren im Bereich der CO-Signatur bei $\nu = 2158.30 \text{ cm}^{-1}$.

Z = Signaturzentrum, F = Bereich stärkster Massensensitivität, $\Delta\nu = 0.1 \text{ cm}^{-1}$

$$1: \Delta L_{\Delta\nu,1} = L_{\Delta\nu}(m_{\text{ges}}, T, T_0) - L_{\Delta\nu}(m_{\text{ges}} + 0.2 m_{\text{CO,Trop}}, T, T_0)$$

$$2: \Delta L_{\Delta\nu,2} = L_{\Delta\nu}(m_{\text{ges}}, T + 0.5 \text{ K}, T_0) - L_{\Delta\nu}(m_{\text{ges}}, T, T_0)$$

$$3: \Delta L_{\Delta\nu,3} = L_{\Delta\nu}(m_{\text{ges}}, T + 0.5 \text{ K}, T_0 + 1.0 \text{ K}) - L_{\Delta\nu}(m_{\text{ges}}, T, T_0)$$

$$4: \text{NESR} = 10^{-9} \text{ W}/(\text{cm}^2 \text{ sr cm}^{-1})$$

Die Massenempfindlichkeit der Signatur (Kurve 1) ist näherungsweise korreliert mit der Sensitivität gegenüber Änderungen der Atmosphärentemperatur T (Kurve 2). Die Sensitivität gegenüber Änderungen der Bodentemperatur T_0 (Kurve 3) ist im Signaturzentrum am kleinsten.

S. 1 (Z)
S. 2 (Z)
S. 3 (Z)
S. 3 (F)

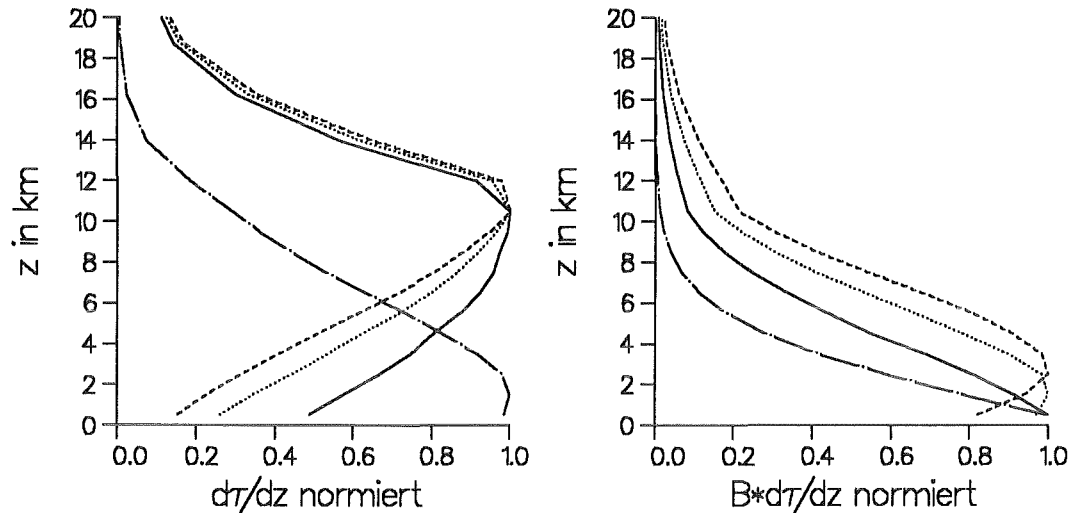


Abbildung 19. Gewichts- (links) sowie Beitragsfunktionen (rechts) für die ausgewählten CO-Signaturen. Dargestellt ist der zentrale Linienbereich (Z) sowie exemplarisch die massensensitivste Stelle (F) der Signatur 3 mit $\Delta\nu = 0.1 \text{ cm}^{-1}$.

nommene Fehler in der Bodentemperatur wird, desto günstiger das Verhältnis Massen- zu Temperatursensitivität im Zentrum der separierten Signaturen wird.

Die in diesem Spektralbereich recht hohe Temperaturabhängigkeit der Planckfunktion wird auch an anderer Stelle deutlich. Abb. 19 zeigt die Gewichts- (links) bzw. Beitragsfunktionen (rechts) für das Zentrum sowie für die massensensitivste Stelle der ausgewählten Signaturen. Dabei wurde für den Bereich der größten Massensensitivität aus Gründen der Übersichtlichkeit lediglich die Beitragsfunktion der Signatur 3 bei 2158.40 cm^{-1} eingezeichnet, da die entsprechenden Funktionen der anderen Signaturen dieser qualitativ ähnlich sind.

Bei allen dargestellten Signaturen ist die Transmissionsänderung $\partial\tau/\partial z$ in der hohen Troposphäre am größten. Die große Temperaturabhängigkeit der Planckfunktion führt in Verbindung mit dem troposphärischen Temperaturgradienten dazu, daß die Maxima der entsprechenden Beitragsfunktionen in der unteren Troposphäre liegen. Der größte Beitrag zum gemessenen Signal stammt also aus tieferen Atmosphärenschichten. Erhöht man die CO-Masse in der Atmosphäre, so verschiebt sich das Funktionsmaximum ebenso in höhere Troposphärenschichten wie bei einer Erhöhung der spektralen Auflösung (siehe Abb. 20 auf Seite 53). Im rechten Teil von Abb. 20 stammt bei einer Auflö-

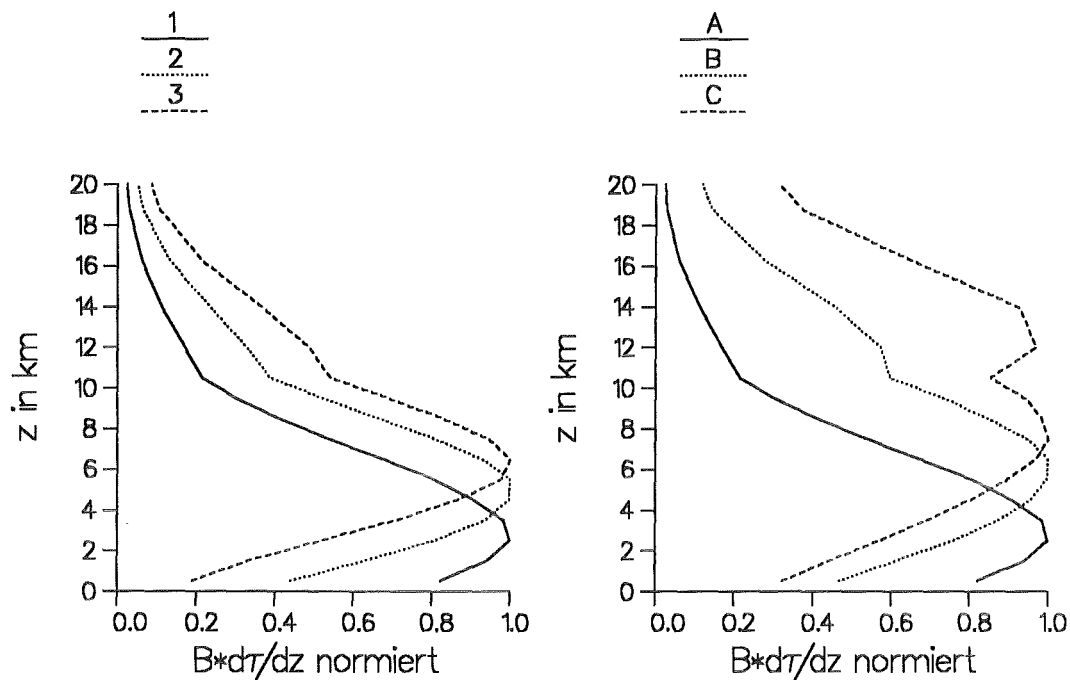


Abbildung 20. Beitragsfunktionen für das Zentrum der CO-Signatur bei $\Delta\nu = 2158.30 \text{ cm}^{-1}$.

Links: Variation der CO-Gesamtmasse ($\Delta\nu = 0.1 \text{ cm}^{-1}$)

1: $1.0 \cdot m_{\text{CO,ges}}$

2: $1.5 \cdot m_{\text{CO,ges}}$

3: $2.0 \cdot m_{\text{CO,ges}}$

Rechts: Variation der spektralen Auflösung ($1.0 \cdot m_{\text{CO,ges}}$)

A: $\Delta\nu = 0.10 \text{ cm}^{-1}$

B: $\Delta\nu = 0.05 \text{ cm}^{-1}$

C: $\Delta\nu = 0.03 \text{ cm}^{-1}$

Die Lage der Funktionsmaxima ist sowohl abhängig von der CO-Masse als auch von der spektralen Auflösung.

sung von $\Delta\nu = 0.03 \text{ cm}^{-1}$ bereits ein großer Anteil des Signals aus der unteren Stratosphäre.

REICHLE et al. (1986) haben aus breitbandigen Satellitenmessungen mit einem Gasfilter-Radiometer CO-Mischungsverhältnisse abgeleitet. Die Daten wurden über niederen bis mittleren Breiten gemessen und sind repräsentativ für die mittlere und obere Troposphäre. Dabei können durch die Gasfiltertechnik die Flügelbereiche der CO-Linien in Abhängigkeit des Filtergrades unterschiedlich stark ausgeblendet werden. Die gemessene Information stammt deshalb nur noch aus dem unmittelbaren Bereich des Linienzentrums. Mit dieser Meßmethode ist damit eine höhere "spektrale Auflösung" zu erreichen als die bei den Sensitivitätsstudien angenommene Auflösung von $\Delta\nu = 0.1 \text{ cm}^{-1}$. Bei dieser Methode liegt daher der Bereich des maximalen Beitrags zum gemessenen

Signal in der höheren Troposphäre. Die Höhengauflösung ist an eine Variation der "spektralen Auflösung" gekoppelt.

Interferometermessungen werden üblicherweise mit konstanter spektraler Auflösung durchgeführt. Die vertikale Auflösung kann mit einer erhöhten spektralen Auflösung von $\Delta\nu < 0.1 \text{ cm}^{-1}$ verbessert werden. Dabei ist es zweckmäßig, neben dem Zentrum einer Signatur auch Bereiche der zentrumsnahen Flanke in die Betrachtungen mit einzubeziehen (vgl. Abb. 7 auf Seite 21 in Kap. 3).

Insgesamt bleibt festzuhalten, daß das CO-Mischungsverhältnis in der Troposphäre in 2 ($\Delta\nu = 0.1 \text{ cm}^{-1}$), bzw. bei höherer spektraler Auflösung ($\Delta\nu = 0.05 \text{ cm}^{-1}$) 3 dicken Schichten bestimmt werden kann. Da sich längs eines vertikalen optischen Weges durch die Atmosphäre mehr als 90 % der CO-Masse in der Troposphäre befindet, ist der Fehler in der Gesamtmassenbestimmung in der Troposphäre grob vergleichbar mit dem Fehler für die Gesamtmasse in der Atmosphäre und kann daher mit 5 – 15 % angegeben werden (vgl. Kap. 4.2.1).

Darüberhinaus wurde untersucht, ob es möglich ist, kleinräumige horizontale CO-Konzentrationsunterschiede, wie sie beispielsweise in der stark verschmutzten Grenzschicht über Industriegebieten im Vergleich zum Umland auftreten können, aufzulösen. In der Simulation wurde ein bodennahes CO-Mischungsverhältnis ($c_{v,CO}$) von 0.2 ppmv für das Umland angenommen. Dieser Wert wurde, repräsentativ für das Industriegebiet, auf $c_{v,CO} = 5.0 \text{ ppmv}$ erhöht. Im Spektrum führt diese Massenerhöhung zu einer Änderung der Strahldichte von ca. 3 % im Zentrum und ca. 6 % im massensensitivsten Teil der ausgewählten CO-Signaturen. Im Zentrum der Signaturen beträgt das Signal-zu-Rausch-Verhältnis $\Delta L_{\Delta\nu}/NESR \approx 1 - 2$ und ist damit nur noch bedingt vom spektralen Rauschen zu unterscheiden. Dagegen steigt das SNR an der massensensitivsten Stelle im Spektrum auf $\Delta L_{\Delta\nu}/NESR \approx 4 - 5$ an. Bei diesen Berechnungen wurde ein Standard-Temperaturprofil für winterliche Bedingungen in mittleren Breiten zugrunde gelegt. Diese großen horizontalen Gradienten in der CO-Konzentration treten teilweise in Verbindung mit ausgeprägten Temperaturinversionen in der unteren Troposphäre auf. Eine Simulation mit einem derartigen Temperaturprofil hat gezeigt, daß in diesem Fall bei einer entsprechenden Massenerhöhung nur noch geringe, nicht meßbare Änderungen in der Strahldichte auftreten. Das Maximum der Beitragsfunktion verschiebt sich zwar entsprechend der Massenänderung nach unten, jedoch ist der Temperaturkontrast aufgrund des speziellen Temperaturprofils zu klein um eine deutliche Änderung im Strahldichtesignal hervorzurufen.

4.2.3.3 Ozon (O₃)

Von den zahlreichen O₃-Absorptionsbanden im mittleren Infrarotbereich ist insbesondere die stärkste Bande mit ihrem Zentrum bei 9.6 μm zur Ozonsondierung geeignet. Aufgrund ihrer Lage im Bereich des atmosphärischen Fensters ist der Einfluß von Stör gasen gering. Lediglich die Moleküle H₂O und CO₂ besitzen im Bereich dieser O₃-Bande einige relevante Absorptionslinien. Das Spektrum setzt sich deshalb im wesentlichen aus Beiträgen des Gases O₃ zusammen (siehe Abb. 21).

Während eine Bestimmung der O₃-Gesamtmasse vom Weltraum aus mit guter Genauigkeit (5 - 15 %, vgl. Kap. 4.2.1) möglich ist, gestaltet sich die Nadirsondierung von troposphärischem Ozon aufgrund des stratosphärischen O₃-Konzentrationsmaximums deutlich schwieriger. So befinden sich entlang des optischen Weges lediglich rund 7 % der

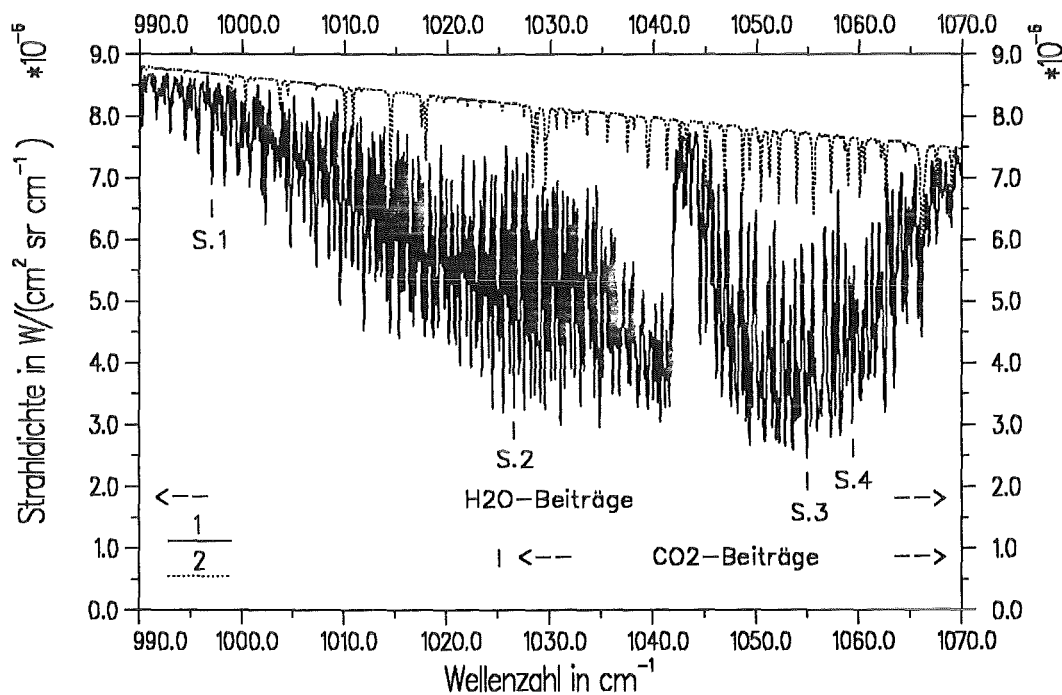


Abbildung 21. Strahldichtespektren im Bereich der 9.6 μm O₃-Bande.

$$\text{NESR} = 5.0 \cdot 10^{-9} \text{ W}/(\text{cm}^2 \text{ sr cm}^{-1}), \Delta\nu = 0.1 \text{ cm}^{-1}$$

1: alle Gase

2: alle Gase ohne O₃

O₃-Signatur 1: 997.02 cm⁻¹

O₃-Signatur 2: 1026.50 cm⁻¹

O₃-Signatur 3: 1054.95 cm⁻¹

Neben zahlreichen dominanten O₃-Signaturen sind auch H₂O- sowie, oberhalb $\nu = 1025 \text{ cm}^{-1}$, CO₂-Beiträge enthalten.

O₃-Moleküle in der Troposphäre zwischen 0 und 11 km. Bei einer für sommerliche Verhältnisse repräsentativen Atmosphäre steigt dieser Anteil auf 11.5 %. Bei den folgenden Simulationsrechnungen wurde eine derartige Atmosphäre zugrunde gelegt, da insbesondere Smogsituationen von besonderem Interesse sind.

Daß die Troposphäre verhältnismäßig wenig Beitrag zum Strahldichtesignal liefert, wird deutlich in Abb. 22. Dort sind Beitragsfunktionen für unterschiedlich starke Signaturen aufgetragen. Dabei ist neben dem Linienzentrum (Z) auch der jeweils massensensitivste Bereich im Flügel (F) dargestellt. Diese Stelle der größten Massensensitivität schwankt mit der Art der Massenänderung. Die hier ausgewählten Stützstellen sind repräsentativ bei Massenänderungen in der unteren Troposphäre. Bei der schwachen Signatur 1 (vgl. Abb. 21 auf Seite 55) ist die Massenempfindlichkeit am größten im Zentrum und nimmt mit zunehmender Entfernung davon stark ab.

In Abb. 22 fällt auf, daß die Beitragsfunktionen in den Zentren der starken Signaturen 2 und 3 ein ausgeprägtes Maximum in der Stratosphäre in ungefähr 25 km Höhe aufweisen. Das sekundäre Maximum in der oberen Stratosphäre (Signatur 3) ist ein Temperatureffekt, der durch die warme Stratopause hervorgerufen wird. Im Flügelbereich dieser Signaturen, genauer gesagt im Lückenbereich zweier benachbarter O₃-Signaturen, sind die Verhältnisse anders. Das Stratosphärenmaximum der Beitragsfunktionen

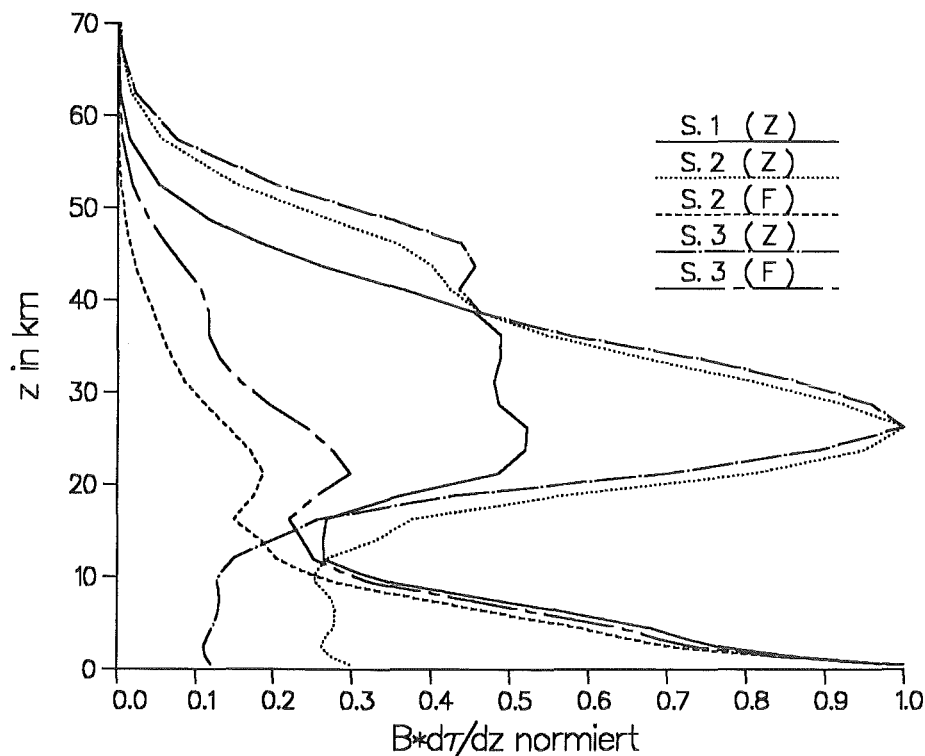


Abbildung 22. Beitragsfunktionen für O₃-Signaturen. Dargestellt ist der zentrale Linienbereich (Z) sowie die massensensitivste Stelle (F) einiger Signaturen mit $\Delta\nu = 0.1 \text{ cm}^{-1}$.

wird stark reduziert zugunsten eines bodennahen troposphärischen Maximums. Allerdings ist zu beachten, daß trotz des ausgeprägten Funktionsmaximums, die den Beitrag der Atmosphäre zum Strahldichtesignal darstellende Fläche unter der jeweiligen Kurve in der Troposphäre (0 - 11 km), nur rund die Hälfte der Gesamtfläche beträgt. Die Beitragsfunktionen der Signatur 4 sind vergleichbar mit denjenigen der Signaturen 2 und 3, weshalb auf eine Darstellung in Abb. 22 aus Gründen der Übersichtlichkeit verzichtet wurde. Das Funktionsmaximum der Signatur 1 befindet sich ebenfalls in der unteren Troposphäre. Ein breites sekundäres Maximum überdeckt dabei allerdings den Bereich der Stratosphäre. Damit läßt sich festhalten, daß insbesondere im Spektralbereich zwischen benachbarten Signaturen die Troposphäre einen vergleichsweise großen Beitrag zum Strahldichtesignal leistet.

Im folgenden soll untersucht werden, ob es möglich ist, starke räumliche Konzentrationsunterschiede in der Grenzschicht aufzulösen. Dazu wurde das bodennahe O₃-Mischungsverhältnis entsprechend einer sommerlichen photochemischen Smogsituation von 32 auf 160 ppbv erhöht (siehe Abb. 23). Anschließend wurde die Differenz der Strahldichten

$$\Delta L_{\Delta v} = L_{\Delta v}(m_{\text{ges}}, T, T_0) - L_{\Delta v}(m_{\text{ges}} + \Delta m_{\text{O}_3, \text{GS}}, T, T_0) \quad (4.10)$$

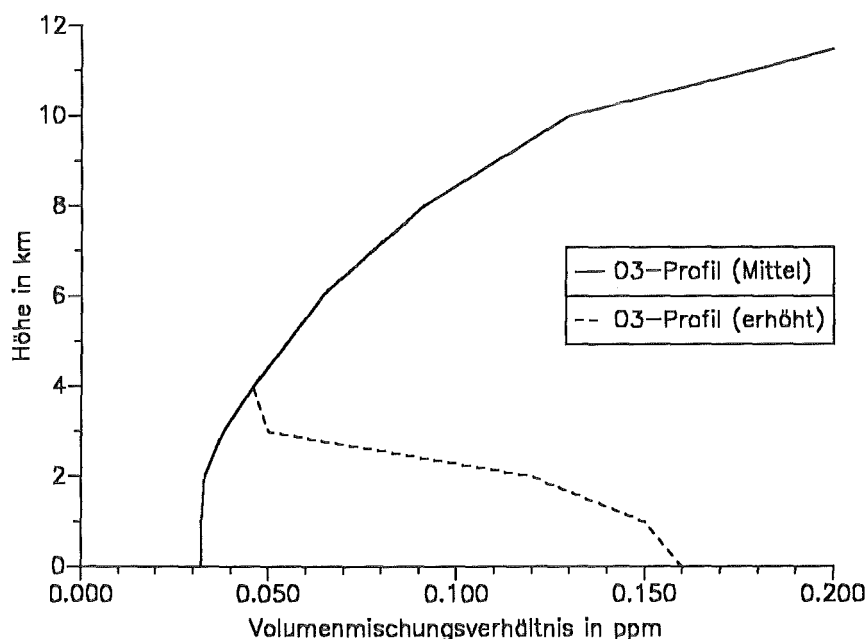


Abbildung 23. Ozonprofile (Sommer, mittlere Breiten) mit durchschnittlichen bzw. erhöhten Werten in der Grenzschicht.

mit $\Delta m_{O_3,GS}$ zusätzliche O_3 -Masse in der Grenzschicht

gebildet.

Abb. 24 zeigt das Differenzspektrum im Spektralbereich der stärksten Strahldichteänderungen. Die Signaturen 3 und 4 sind markiert, nämlich die Zentren (Z) sowie der stark massensensitive Teil im Flügelbereich (F). Abb. 24 zeigt deutlich, daß die Strahldichtedifferenz im Zentrum der starken Signaturen am kleinsten und in den Lücken dazwischen am größten ist. An beiden markierten Stellen (F) ist das Signal-zu-Rausch-Verhältnis $\Delta L_{\Delta\nu,1}/NESR > 10$. Aus Abb. 25 auf Seite 60 ist zu ersehen, daß im Zentrum der Signatur 4 bei 1059.40 cm^{-1} unter Standardbedingungen ein großer Beitrag zum gemessenen Signal aus der Stratosphäre stammt (Kurve Z(1)). Bei einer angenommenen Smogsituation bildet sich aufgrund der höheren troposphärischen O_3 -Konzentrationen ein zweites Maximum in der unteren Troposphäre aus (Kurve Z(2)). In der Lücke zwi-

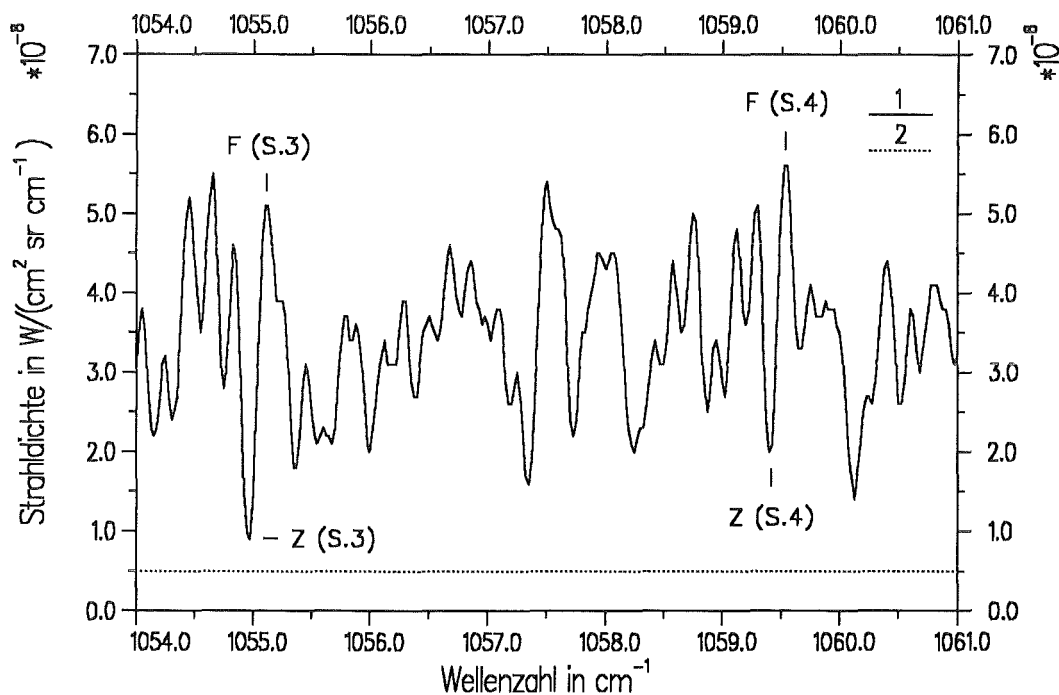


Abbildung 24. Differenzspektrum im Bereich der O_3 -Signaturen bei $\nu = 1054.95 \text{ cm}^{-1}$ bzw. 1059.40 cm^{-1} .

Z = Signaturzentrum, F = Bereich stärkster troposphärischer Massensensitivität, $\Delta\nu = 0.1 \text{ cm}^{-1}$

$$1: \Delta L_{\Delta\nu} = L_{\Delta\nu}(m_{ges}, T, T_0) - L_{\Delta\nu}(m_{ges} + \Delta m_{O_3,GS}, T, T_0)$$

$$2: NESR = 5.0 \cdot 10^{-9} W/(cm^2 \text{ sr } cm^{-1})$$

Die Empfindlichkeit gegenüber O_3 -Massenänderungen in der Grenzschicht ist in diesem Spektralbereich besonders stark.

schen den Signaturen wird der Effekt der stärkeren Betonung der bodennächsten Schichten bei der Smogatmosphäre im Vergleich zur Standardatmosphäre ebenfalls deutlich (Kurven F(1) und F(2)). Ohnehin ist hier der Beitrag der Stratosphäre zum Meßsignal verhältnismäßig klein.

Signatur (cm^{-1})	$L_{\Delta v}$	$\Delta L_{\Delta v,1}$ $\Delta m_{\text{O}_3, \text{GS}}$ erhöht	$\frac{\Delta L_{\Delta v,1}}{\text{NESR}}$	$\Delta L_{\Delta v,2}$ T-Profil: Bias = 0.5 K	$\Delta L_{\Delta v,3}$ T-Profil: Bias = 0.5 K T_0 : Bias = 1.0 K	$\frac{\Delta L_{\Delta v,1}}{\Delta L_{\Delta v,2}}$	$\frac{\Delta L_{\Delta v,1}}{\Delta L_{\Delta v,3}}$
1: 997.02 (Z)	0.6901	0.0021 (0.3)	4.2	0.0015 (0.2)	0.0097 (1.4)	1.4	0.2
2: 1026.50 (Z) 1026.63 (F)	0.3289 0.6478	0.0019 (0.6) 0.0041 (0.6)	3.8 8.2	0.0031 (0.9) 0.0021 (0.3)	0.0049 (1.5) 0.0105 (1.6)	0.6 2.0	0.4 0.4
3: 1054.95 (Z) 1055.13 (F)	0.2463 0.4519	0.0010 (0.4) 0.0051 (1.1)	2.0 10.2	0.0030 (1.2) 0.0029 (0.6)	0.0035 (1.4) 0.0074 (1.6)	0.3 1.8	0.3 0.7
4: 1059.40 (Z) 1059.55 (F)	0.3023 0.5563	0.0020 (0.7) 0.0056 (1.0)	4.0 11.2	0.0029 (1.0) 0.0023 (0.4)	0.0044 (1.5) 0.0089 (1.6)	0.7 2.4	0.5 0.6
$L_{\Delta v}, \Delta L_{\Delta v}$ in $10^{-5} \text{ W}/(\text{cm}^2 \text{ sr cm}^{-1})$, bzw. in Klammern: $\Delta L_{\Delta v}/L_{\Delta v}$ in %, NESR = $5.0 \cdot 10^{-9} \text{ W}/(\text{cm}^2 \text{ sr cm}^{-1})$							

Tabelle 7. Nadirsondierung von O_3 in der Grenzschicht. Massen- und Temperatursensitivität ausgewählter Signaturen im Zentrum (Z) sowie an der massensensitivsten Stelle im Flügel (F), $\Delta v = 0.1 \text{ cm}^{-1}$. Das O_3 -Mischungsverhältnis wurde in Bodennähe von 32 auf 160 ppbv erhöht.

Somit ist es verständlich, daß sich die simulierte Massenänderung in den Lücken um bis zu einem Faktor 5 (Signatur 3) stärker bemerkbar macht als in den Zentren. Die relative Strahldichteänderung ($\Delta L_{\Delta v,1}/L_{\Delta v}$) beträgt dabei ungefähr 1 %. In Tabelle 7 sind die Zahlenwerte der Sensitivitätsstudie eingetragen. Der Einfluß der Bodenemission ist üblicherweise im Flügelbereich der Signaturen hoch und in den Zentren niedrig. Dies wird anhand der stark bzw. wenig unterschiedlichen Quotienten $\Delta L_{\Delta v,1}/\Delta L_{\Delta v,2}$ bzw. $\Delta L_{\Delta v,1}/\Delta L_{\Delta v,3}$ in Tabelle 7 deutlich. Das bedeutet, daß eine hohe Sensitivität gegenüber troposphärischen Massenänderungen gekoppelt ist mit einer hohen Sensitivität gegenüber Änderungen der Bodenemission und umgekehrt. Um lokal erhöhte O_3 -Konzentrationen in der unteren Troposphäre messen zu können, muß also die Bodenemission genau genug bestimmt werden, um massenspezifische und temperaturspezifische Informationen im Spektrum trennen zu können. Im schwach absorbierenden Spektralbereich unterhalb von 990 cm^{-1} besteht die Möglichkeit durch Anpassen des Kontinuums im gerechneten Spektrum an dasjenige des gemessenen Spektrums, den Einfluß der Bodenemission zu berücksichtigen, sofern eine Wellenlängenabhängigkeit von $\varepsilon_{\Delta v} B_{\Delta v}(T_0)$ vernachlässigt werden kann.

Bei den bisherigen Betrachtungen wurde vorausgesetzt, daß sich die O_3 -Masse in der Stratosphäre nicht ändert. Bei horizontal kleinräumigen Messungen dürfte diese Annahme in den meisten Fällen richtig sein. Im übrigen führen stratosphärische O_3 -Massenänderungen von wenigen Prozent zu betragsmäßig ähnlich starken Strahldichteänderungen wie die angenommene troposphärische Massenvariation. Diese stratosphärischen Konzentrationsänderungen führen aber im Vergleich zu den troposphärischen Variationen zu spektral unterschiedlichen Änderungen in der Strahldichte (siehe Abb. 26 auf Seite 61). Somit ist es in einem hochaufgelösten Spektrum möglich, troposphärische und stratosphärische Informationen voneinander zu trennen. Diese Aussage beweisen auch die Beitragsfunktionen in Abb. 22 auf Seite 56.

Die Verteilung von Ozon in der Stratosphäre ($m_{O_3, \text{Strat}}$) läßt sich mit guter Höhengauflösung mittels Horizontsondierung vom Satelliten aus bestimmen. Mit der mittels einer Nadirsondierung gewonnenen Gesamtmasse ($m_{O_3, \text{ges}}$) ließe sich dann durch Differenzbildung

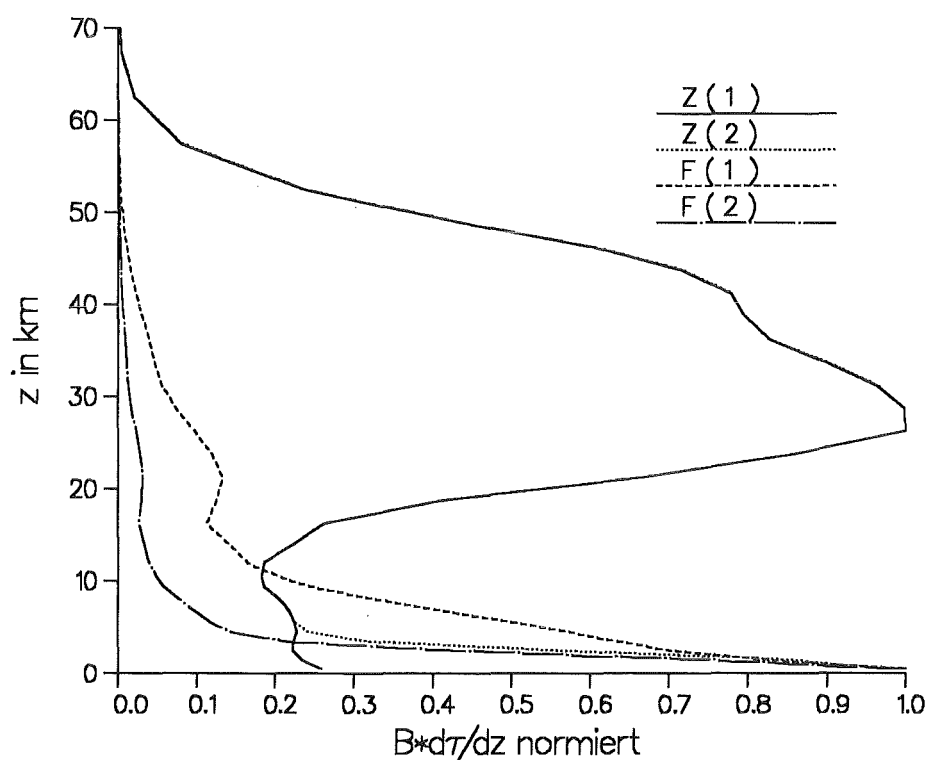


Abbildung 25. Beitragsfunktionen der O_3 -Signatur bei $\nu = 1059.40 \text{ cm}^{-1}$. Dargestellt ist der zentrale Linienbereich (Z) sowie die massensensitivste Stelle (F) für unterschiedliche O_3 -Konzentrationen ($\Delta\nu = 0.1 \text{ cm}^{-1}$).

Z (1): $\nu = 1059.40 \text{ cm}^{-1}$, O_3 -Standardprofil (Sommer, mittlere Breiten)

Z (2): dto., mit erhöhter O_3 -Konzentration in der Grenzschicht

F (1): $\nu = 1059.55 \text{ cm}^{-1}$, O_3 -Standardprofil (Sommer, mittlere Breiten)

F (2): dto., mit erhöhter O_3 -Konzentration in der Grenzschicht

Die Beitragsfunktionen ändern sich mit den benutzten O_3 -Profilen deutlich.

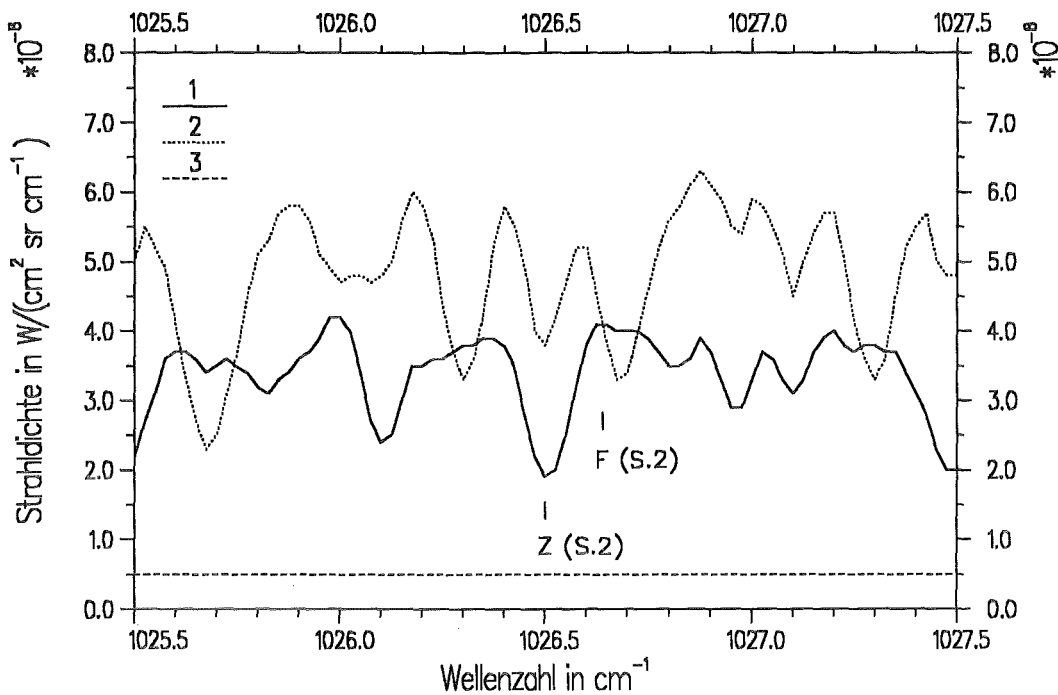


Abbildung 26. Differenzspektren im Bereich der O₃-Signatur bei $\nu = 1026.50 \text{ cm}^{-1}$.

Vergleich von troposphärischer zu stratosphärischer Massensensitivität.

Z = Signaturzentrum, F = Bereich stärkster troposphärischer Massensensitivität,
 $\Delta\nu = 0.1 \text{ cm}^{-1}$

$$1: \Delta L_{\Delta\nu} = L_{\Delta\nu}(m_{\text{ges}}, T, T_0) - L_{\Delta\nu}(m_{\text{ges}} + \Delta m_{\text{O}_3, \text{GS}}, T, T_0)$$

$$2: \Delta L_{\Delta\nu} = L_{\Delta\nu}(m_{\text{ges}}, T, T_0) - L_{\Delta\nu}(m_{\text{ges}} + 0.05 m_{\text{O}_3, \text{Strat}}, T, T_0)$$

$$3: \text{NESR} = 5.0 \cdot 10^{-9} \text{ W}/(\text{cm}^2 \text{ sr cm}^{-1})$$

Troposphärische Konzentrationsänderungen führen im Vergleich zu stratosphärischen Konzentrationsänderungen zu spektral unterschiedlichen Änderungen in der Strahlendichte.

$$m_{\text{O}_3, \text{Trop}} = m_{\text{O}_3, \text{ges}} - m_{\text{O}_3, \text{Strat}} \quad (4.11)$$

auch der Säulengehalt der Troposphäre bestimmen. Nach Kap. 4.2.1 läßt sich die O₃-Gesamtkonzentration auf etwa 5 - 15 % genau bestimmen. Die O₃-Masse oberhalb der Troposphäre läßt sich beispielsweise aus einer Nadirsondierung in Spektralbereichen mit schwachem Troposphärenanteil am Gesamtsignal (vgl. Abb. 22 auf Seite 56) ableiten. Eine hierfür geeignetere Meßmethode ist die Horizontsondierung, da bei dieser Geometrie die stratosphärische O₃-Konzentration mit guter vertikaler Auflösung auf rund 10 % genau meßbar ist (ECHLE et al. 1992). Damit kann die Troposphärenkonzentration auf bis zu einen Faktor 2 genau bestimmt werden. Bei mehreren Messungen über Gebieten mit konstanter stratosphärischer Masse, bei denen Gesamtmassenänderungen gekop-

pelt sind mit Massenänderungen in der Troposphäre, sollte sich die troposphärische Genauigkeit steigern lassen.

4.2.4 Detaillierte Untersuchungen langlebiger Gase in der Troposphäre

4.2.4.1 Methan (CH₄) und Distickstoffoxid (N₂O)

Für eine Nadirsondierung von CH₄ ist vor allem die starke Bande mit Zentrum bei 7.7 μm geeignet. Im Bereich der Bande bei 3.4 μm liefern die um einige Größenordnungen niedrigeren Werte der Planckfunktion eine erheblich schwächere Intensität des Strahlungssignals. Darüberhinaus ist in diesem kurzwelligeren Spektralbereich der Anteil an reflektierter solarer Strahlung nicht mehr vernachlässigbar. Im Gegensatz zu CH₄ besitzt N₂O zahlreiche Absorptionsbanden unterschiedlicher Intensität im mittleren Infrarotbereich. Die stärksten Banden liegen im Wellenlängenbereich nahe 7.8 und 4.5 μm . Die Bande bei 4.5 μm hat aber den Nachteil, daß in diesem Spektralbereich die Temperatur-

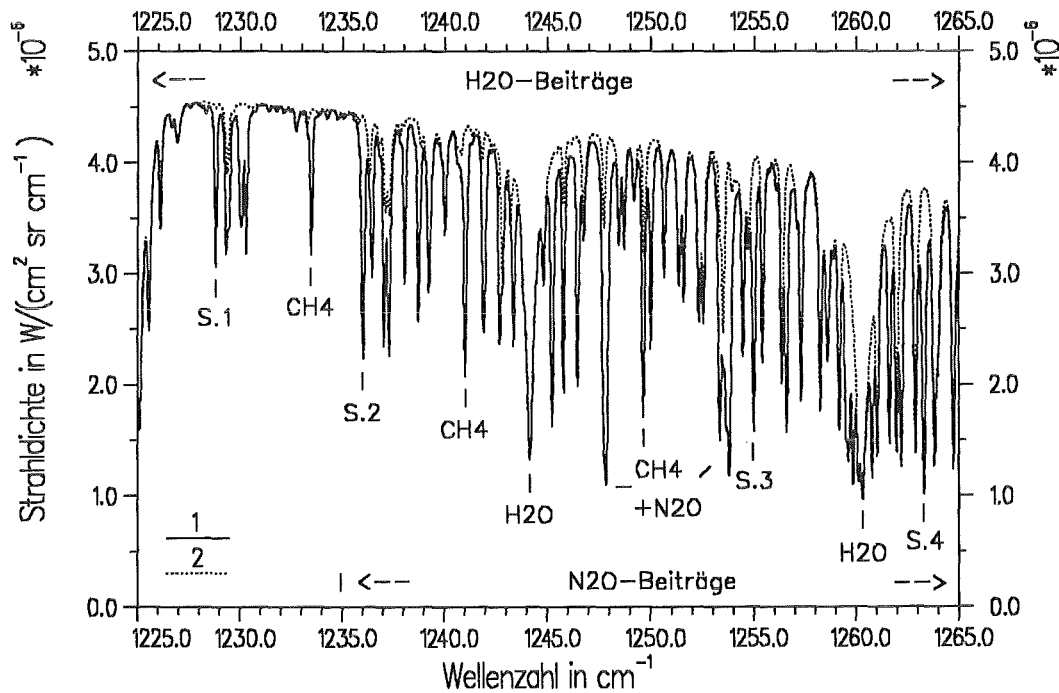


Abbildung 27. Strahldichtespektren im Bereich der 7.7 μm CH₄- sowie 7.8 μm N₂O-Bande.

NESR = $3.0 \cdot 10^{-9} \text{ W}/(\text{cm}^2 \text{ sr cm}^{-1})$, $\Delta\nu = 0.1 \text{ cm}^{-1}$

1: alle Gase

2: alle Gase ohne CH₄

CH₄-Signatur 1: 1228.80 cm^{-1}

CH₄-Signatur 2: 1236.00 cm^{-1}

CH₄-Signatur 3: 1255.00 cm^{-1}

CH₄-Signatur 4: 1263.33 cm^{-1}

Neben zahlreichen CH₄-Signaturen sind auch H₂O- sowie, oberhalb $\nu = 1235 \text{ cm}^{-1}$, N₂O-Signaturen vorhanden.

abhängigkeit der Planckfunktion bereits recht hoch ist. Die etwas schwächere Bande bei $8.55 \mu\text{m}$ liegt im Bereich des atmosphärischen Fensters. Dadurch kommt es zu verhältnismäßig wenig störenden Interferenzen durch andere Spurengase. Die übrigen N_2O -Absorptionsbanden im mittleren Infrarotbereich sind meist zu schwach und bzw. oder stark maskiert durch die Banden anderer Gase und daher für eine Sondierung ungeeignet.

Abb. 27 auf Seite 63 zeigt ein Intervall innerhalb der $7.7 \mu\text{m}$ CH_4 -Bande sowie der $7.8 \mu\text{m}$ N_2O -Bande. Neben zahlreichen CH_4 - und N_2O -Signaturen enthält das Spektrum auch Beiträge des Gases H_2O . Vier ausgewählte CH_4 -Signaturen unterschiedlicher Stärke sind markiert. Im Zentrum dieser Signaturen stammt der größte Beitrag zum Strahldichtesignal aus verschiedenen Höhenbereichen der Troposphäre (siehe Abb. 28). Die massensensitivste Stelle der Signaturen 1 und 2 befindet sich in deren Zentrum. Im Gegensatz dazu befindet sich die massensensitivste Stelle der Signaturen 3 und 4 aufgrund deren Stärke im Flügelbereich (siehe Tabelle 8 auf Seite 65). Exemplarisch in Abb. 28 eingezeichnet ist auch die Beitragsfunktion an der massensensitivsten Stelle (F) der Signatur 4 mit einem Maximum in Bodennähe. Entsprechend dem Verlauf der Beitragsfunktion muß der Einfluß der Emission der Bodenoberfläche hier in besonderem Maße berücksichtig-

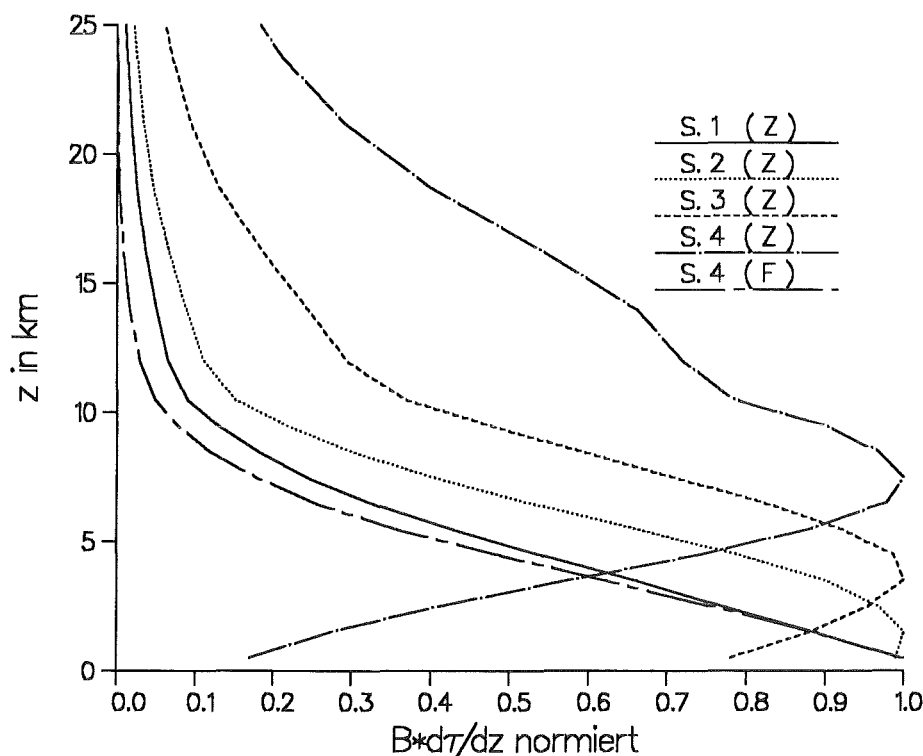


Abbildung 28. Beitragsfunktionen für CH_4 -Signaturen. Dargestellt ist jeweils der zentrale Linienbereich (Z) sowie die massensensitivste Stelle (F) der Signatur 4 (siehe Tabelle 8 auf Seite 65), $\Delta\nu = 0.1 \text{ cm}^{-1}$.

sichtigt werden. Diese Aussage wird bestätigt durch die Zahlenwerte in Tabelle 8. Die Quotienten $\Delta L_{\Delta\nu,1}/\Delta L_{\Delta\nu,2}$ und $\Delta L_{\Delta\nu,1}/\Delta L_{\Delta\nu,3}$ sind dann unterschiedlich groß, wenn der (insbesondere von der Oberflächentemperatur bestimmte) Beitrag der Bodenemission hoch ist. Allgemein gesehen trifft dies nicht nur für die Flügelbereiche der Signaturen, sondern generell auch für die Zentren schwächerer Signaturen zu (vgl. z.B. Signatur 1).

Signatur (cm^{-1})	$L_{\Delta\nu}$	$\Delta L_{\Delta\nu,1}$ $\Delta m_{\text{CH}_4, \text{Trop.}}$ + 20 %	$\Delta L_{\Delta\nu,2}$ T-Profil: Bias = 0.5 K	$\Delta L_{\Delta\nu,3}$ T-Profil: Bias = 0.5 K T_0 : Bias = 1.0 K	$\frac{\Delta L_{\Delta\nu,1}}{\Delta L_{\Delta\nu,2}}$	$\frac{\Delta L_{\Delta\nu,1}}{\Delta L_{\Delta\nu,3}}$
1: 1228.80 (Z)	0.3066	0.0124 (4.0)	0.0016 (0.5)	0.0052 (1.7)	7.8	2.4
2: 1236.00 (Z)	0.2233	0.0145 (6.5)	0.0017 (0.8)	0.0031 (1.4)	8.5	4.7
3: 1255.00 (Z) 1255.07 (F)	0.1582 0.2641	0.0096 (6.1) 0.0109 (4.1)	0.0021 (1.3) 0.0024 (0.9)	0.0027 (1.7) 0.0049 (1.9)	4.6 4.5	3.6 2.2
4: 1263.33 (Z) 1263.45 (F)	0.1020 0.2575	0.0054 (5.3) 0.0124 (4.8)	0.0017 (1.7) 0.0024 (0.9)	0.0018 (1.8) 0.0041 (1.6)	3.2 5.2	3.0 3.0
$L_{\Delta\nu}, \Delta L_{\Delta\nu}$ in $10^{-5} \text{ W}/(\text{cm}^2 \text{ sr cm}^{-1})$, bzw. in Klammern: $\Delta L_{\Delta\nu}/L_{\Delta\nu}$ in %, NESR = $3.0 \cdot 10^{-9} \text{ W}/(\text{cm}^2 \text{ sr cm}^{-1})$						

Tabelle 8. Nadirsondierung von troposphärischem CH_4 . Massen- und Temperatursensitivität ausgewählter Signaturen im Zentrum (Z) sowie an der massensensitivsten Stelle im Flügel (F), $\Delta\nu = 0.1 \text{ cm}^{-1}$.

Aus den Zahlenwerten in Tabelle 8 wird deutlich, daß die Massensensitivität bei einer angenommenen Erhöhung der troposphärischen CH_4 -Konzentration die Variation infolge eines Fehlers in den Parametern T und T_0 deutlich überwiegt. Das Signal-zu-Rausch-Verhältnis bei einer 20-prozentigen Erhöhung der Troposphärenmasse ($\Delta L_{\Delta\nu,1}/\text{NESR}$) ist für alle ausgewählten Stützstellen deutlich größer als 10.

In Kap. 4.2.3.1 wurde gezeigt, inwieweit es möglich ist, aus einem gemessenen Spektrum Information über die vertikale Verteilung von Wasserdampf zu gewinnen. Die dargestellte Vorgehensweise läßt sich in denjenigen Fällen anwenden, in denen Beitragsfunktionen mit Maxima in unterschiedlichen Höhen vorliegen. Aufgrund des im Vergleich zu H_2O kleineren CH_4 -Konzentrationsgradienten in der Troposphäre, besitzen die Beitragsfunktionen der CH_4 -Signaturen größere Halbwertsbreiten ($\geq 10 \text{ km}$) als die Beitragsfunktionen der H_2O -Signaturen. Das betrachtete Höhenintervall wurde entsprechend der Vorgehensweise in Kap. 4.2.3.1 im Bereich des Funktionsmaximums festgelegt.

CH ₄ - Signatur	Wellenzahlbereich (cm ⁻¹)	Variation der CH ₄ -Masse im Höhenbereich (km)	Fehler in der CH ₄ - Massenbestimmung (im betr. Höhenbe- reich) (%)
1	1228.75 - 1228.85	0.5 - 4.0	16.6
2	1235.95 - 1236.05	0.5 - 4.5	11.8
3	1254.95 - 1255.05	0.5 - 6.5	5.6
4	1263.28 - 1263.38	3.0 - 12.0	1.0

Tabelle 9. Ableitung von Information über die vertikale Verteilung von CH₄ in der Troposphäre.

Anpassung des gerechneten Spektrums an das "gemessene" Spektrum über die Variation der CH₄-Masse in bestimmten Höhenbereichen, die entsprechend der Beitragsfunktionen der betrachteten Signaturen ausgewählt sind (spektrale Auflösung $\Delta\nu = 0.1 \text{ cm}^{-1}$). Das Startprofil beinhaltet gegenüber dem Referenzprofil einen systematischen Fehler von 5 %.

Tabelle 9 zeigt das Ergebnis der jeweiligen bestmöglichen Anpassung des berechneten an das "gemessene" Spektrum. Der Fehler in der Massenbestimmung im betrachteten Höhenbereich liegt zwischen 1.0 und 16.6 %. Die Form der Beitragsfunktionen sowie der Anteil des Bodensignals am Gesamtsignal spielen dabei eine wichtige Rolle. Der zur Signatur 1 gehörende Höhenbereich liefert das schlechteste Ergebnis, da sich das Maximum der Beitragsfunktion am Boden befindet und daher die Atmosphäre vergleichsweise wenig zum Strahldichtesignal beiträgt. Das beste Ergebnis liefert dagegen erwartungsgemäß das zur Signatur 4 gehörende große Höhenintervall. Bei dieser starken Signatur trägt die Bodenemission nur wenig zum Gesamtsignal bei. Da es sich um voneinander unabhängige Informationen über die Qualität der angegebenen Schichten hinsichtlich der Bestimmung der Gasmasse handelt, kann die Genauigkeit unter Verwendung geeigneter Inversionsmethoden, die bei der Auswertung der aktuellen Schicht die Ergebnisse der zuvor ausgewerteten Schichten als a priori Information nutzen, gesteigert werden. Da sich die in Tabelle 9 gezeigten vier Schichten vertikal überlappen, wurde in Tabelle 2 auf Seite 31 eine Höhenauflösung von lediglich 2 - 3 Schichten angegeben. Insgesamt gesehen ist damit die vertikale Auflösung bei CH₄ schlechter als bei H₂O.

Die in Kap. 4.2.1 dargestellten Untersuchungen haben gezeigt, daß die CH₄-Gesamtkonzentration in der Atmosphäre auf 5 - 15 % genau bestimmbar ist. Aufgrund der Tatsache, daß sich in einer vertikalen Säule rund 80 % des atmosphärischen Methans in der Troposphäre befindet, sind troposphärische Konzentrationen mit um nur wenige Prozentpunkte schlechterer Genauigkeit bestimmbar. Wegen des guten Signal-zu-Rausch-Verhältnisses ist zu erwarten, daß kleinräumigere Konzentrationsunterschiede, wie sie beispielsweise in tropischen und subtropischen Gebieten mit Naßreisanaubau auftreten,

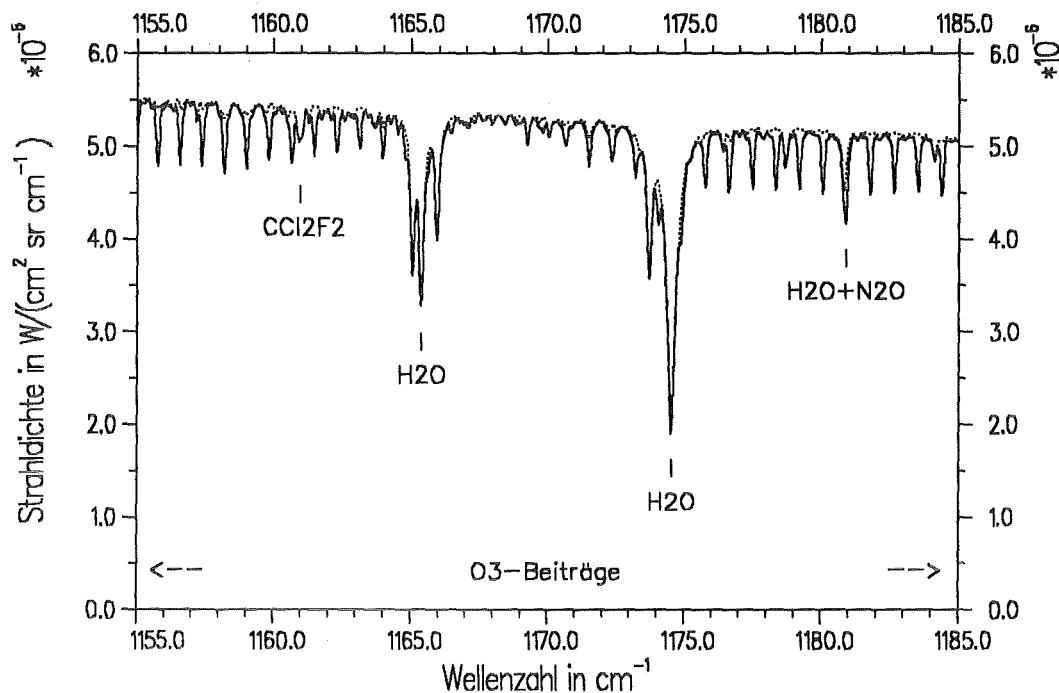


Abbildung 29. Strahlendichtespektren im Bereich der 8.55 μm N_2O -Bande.

$$\text{NESR} = 5.0 \cdot 10^{-9} \text{ W}/(\text{cm}^2 \text{ sr cm}^{-1}), \Delta\nu = 0.1 \text{ cm}^{-1}$$

1: alle Gase

2: alle Gase ohne N_2O

Neben zahlreichen N_2O -Signaturen sind noch H_2O -Signaturen sowie schwache Beiträge von O_3 enthalten. Bei $\nu = 1161 \text{ cm}^{-1}$ tritt der Q-Zweig der 8.6 μm CCl_2F_2 -Bande hervor.

gemessen werden können. So liefert eine Erhöhung der CH_4 -Konzentration um 50 % in der Grenzschicht zwischen 0 und 2 km ein SNR von $\Delta L_{\Delta\nu}/\text{NESR}$ bis zu ≈ 10 .

Die für das Gas CH_4 getroffenen Aussagen bezüglich der Genauigkeit troposphärischer Massenbestimmungen einschließlich einer möglichen vertikalen Auflösung gelten weitgehend auch für das Gas N_2O . In Kap. 3 wurde bereits die Vorgehensweise bei der Auswahl der Signaturen mit den daran anschließenden Sensitivitätsstudien am Beispiel von N_2O erläutert. Dabei zeigt Abb. 5 auf Seite 19 separierte N_2O -Signaturen im Bereich der 7.8 μm -Bande. Anhand von Abb. 8 auf Seite 22 wird deutlich, daß es möglich ist, Information über die vertikale Verteilung dieses Spurengases aus dem Spektrum abzuleiten. Wie bereits erwähnt, ist die etwas schwächere N_2O -Bande bei 8.55 μm verhältnismäßig wenig gestört durch andere Spurengase (siehe Abb. 29). Die N_2O -Signaturen sind im wesentlichen eingebettet zwischen stärkeren H_2O -Signaturen. Eine Übersicht der Mas-

sen- und Temperatursensitivität ausgewählter Signaturen im Bereich der Banden bei 7.8 und 8.55 μm ist in Tabelle 10 gegeben.

Signatur (cm^{-1})	$L_{\Delta\nu}$	$\Delta L_{\Delta\nu,1}$ $\Delta m_{\text{N}_2\text{O},\text{Trop.}}$ + 20 %	$\Delta L_{\Delta\nu,2}$ T-Profil: Bias = 0.5 K	$\Delta L_{\Delta\nu,3}$ T-Profil: Bias = 0.5 K T_0 : Bias = 1.0 K	$\frac{\Delta L_{\Delta\nu,1}}{\Delta L_{\Delta\nu,2}}$	$\frac{\Delta L_{\Delta\nu,1}}{\Delta L_{\Delta\nu,3}}$
1: 1155.75 (Z)	0.4780	0.0065 (1.4)	0.0011 (0.2)	0.0094 (2.0)	5.9	0.7
2: 1264.75 (Z) 1264.85 (F)	0.1243 0.2447	0.0078 (6.3) 0.0114 (4.7)	0.0018 (1.4) 0.0027 (1.1)	0.0021 (1.7) 0.0039 (1.6)	4.3 4.2	3.7 2.9
3: 1291.47 (Z) 1291.58 (F)	0.0963 0.2064	0.0059 (6.1) 0.0110 (5.3)	0.0017 (1.8) 0.0025 (1.2)	0.0018 (1.9) 0.0037 (1.8)	3.5 4.4	3.3 3.0
4: 1309.12 (Z)	0.1290	0.0076 (5.9)	0.0017 (1.3)	0.0018 (1.4)	4.5	4.2
$L_{\Delta\nu}, \Delta L_{\Delta\nu}$ in $10^{-5} \text{ W}/(\text{cm}^2 \text{ sr cm}^{-1})$, bzw. in Klammern: $\Delta L_{\Delta\nu}/L_{\Delta\nu}$ in %, $\text{NESR} = 3.0 \cdot 10^{-9} \text{ W}/(\text{cm}^2 \text{ sr cm}^{-1})$						

Tabelle 10. Nadirsondierung von troposphärischem N_2O . Massen- und Temperatursensitivität ausgewählter Signaturen im Zentrum (Z) sowie an der massensensitivsten Stelle im Flügel (F), $\Delta\nu = 0.1 \text{ cm}^{-1}$. SNR der Stützstellen: $\Delta L_{\Delta\nu,1}/\text{NESR} > 10$.

4.2.4.2 FCKW-12 (CCl_2F_2)

Im Spektralbereich des mittleren Infrarots liegen die stärksten Banden dieses Fluorchlorkohlenwasserstoffs bei 8.6 bzw. 10.8 μm . Die Bereiche der stärksten Absorption der 10.8 μm -Bande bei 921.7 bzw. 923.1 cm^{-1} sind maskiert durch Beiträge der Gase H_2O bzw. CO_2 . Im Spektrum in Abb. 30 auf Seite 69 sind diese beiden schwachen CCl_2F_2 -Signaturen markiert. Im übrigen Teil dieses Spektrums sind von FCKW-12 praktisch nur Kontinuumsbeiträge enthalten, was am gleichmäßigen Verlauf der Kurve 3, die den Beitrag von FCKW-12 zum Gesamtspektrum darstellt, deutlich wird. Eine Erhöhung der spektralen Auflösung ($\Delta\nu < 0.1 \text{ cm}^{-1}$) ändert an diesen Gesichtspunkten nichts wesentliches.

Eine 20-prozentige Erhöhung der CCl_2F_2 -Masse in der Troposphäre liefert ein maximales Signal-zu-Rausch-Verhältnis $\Delta L_{\Delta\nu,1}/\text{NESR}$ von 2.1 im Bereich der beiden sehr schwachen Signaturen und ist daher gerade noch auflösbar (siehe Tabelle 11 auf Seite 69).

Signatur (cm^{-1})	$L_{\Delta v}$	$\Delta L_{\Delta v,1}$ $\Delta m_{\text{CCl}_2\text{F}_2, \text{Trop:}}$ + 20 %	$\frac{\Delta L_{\Delta v,1}}{\text{NESR}}$	$\Delta L_{\Delta v,2}$ T-Profil: Bias = 0.5 K	$\Delta L_{\Delta v,3}$ T-Profil: Bias = 0.5 K T_0 : Bias = 1.0 K	$\frac{\Delta L_{\Delta v,1}}{\Delta L_{\Delta v,2}}$	$\frac{\Delta L_{\Delta v,1}}{\Delta L_{\Delta v,3}}$
1: 921.70 ^x	0.8815	0.0031 (0.4)	2.1	0.0009 (0.1)	0.0139 (1.6)	3.4	0.2
2: 923.10 ^x	0.8816	0.0031 (0.4)	2.1	0.0007 (0.1)	0.0135 (1.5)	4.4	0.2
3a: 1161.00 ⁺	0.5087	0.0042 (0.8)	8.4	0.0007 (0.1)	0.0099 (1.9)	6.0	0.4
3b: 1161.04 [#]	0.5049	0.0045 (0.9)	4.5	0.0009 (0.2)	0.0100 (2.0)	5.0	0.5

$L_{\Delta v}, \Delta L_{\Delta v}$ in $10^{-5} \text{ W}/(\text{cm}^2 \text{ sr cm}^{-1})$, bzw. in Klammern: $\Delta L_{\Delta v}/L_{\Delta v}$ in %,
^x $\Delta v = 0.10 \text{ cm}^{-1}$, NESR = $1.5 \cdot 10^{-8} \text{ W}/(\text{cm}^2 \text{ sr cm}^{-1})$
⁺ $\Delta v = 0.10 \text{ cm}^{-1}$, NESR = $5.0 \cdot 10^{-9} \text{ W}/(\text{cm}^2 \text{ sr cm}^{-1})$
[#] $\Delta v = 0.05 \text{ cm}^{-1}$, NESR = $1.0 \cdot 10^{-8} \text{ W}/(\text{cm}^2 \text{ sr cm}^{-1})$

Tabelle 11. Nadirsondierung von troposphärischem CCl_2F_2 . Massen- und Temperatursensitivität im Zentrum ausgewählter Signaturen.

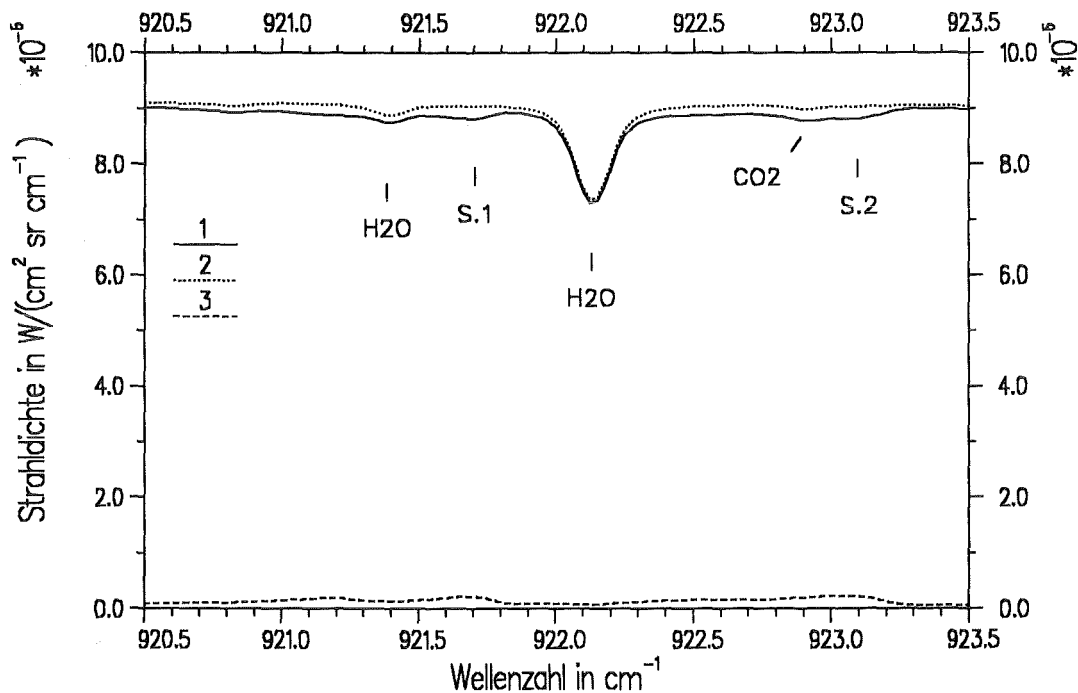


Abbildung 30. Strahldichtespektren im Bereich der $10.8 \mu\text{m}$ CCl_2F_2 -Bande.

NESR = $1.5 \cdot 10^{-8} \text{ W}/(\text{cm}^2 \text{ sr cm}^{-1})$, $\Delta v = 0.1 \text{ cm}^{-1}$

1: alle Gase

2: alle Gase ohne CCl_2F_2

3: Differenz 2 - 1, entspricht dem Beitrag von CCl_2F_2

Der CCl_2F_2 -Beitrag ist im wesentlichen im Kontinuum enthalten. Die sehr schwachen (markierten) CCl_2F_2 -Signaturen sind durch Fremdgase maskiert.

Günstiger sind die Verhältnisse im Bereich des Q-Zweiges der 8.6 μm -Bande. Abb. 31 zeigt eine breite CCl_2F_2 -Signatur mit Zentrum bei 1161.0 cm^{-1} , eingebettet zwischen schwachen N_2O - und O_3 -Signaturen. Dabei ist zu beachten, daß im Bereich von 1160.9 cm^{-1} schwache Beiträge des Gases O_3 enthalten sind. Das Signal-zu-Rausch-Verhältnis einer 20-prozentigen troposphärischen Massenerhöhung ist hier deutlich höher als im Bereich der Bande bei $10.8\text{ }\mu\text{m}$. Das Differenzsignal ($\Delta L_{\Delta\nu,1}$) ist dargestellt in Abb. 32 auf Seite 71 (Kurve 1). Es ist im Zentrum der Signatur am größten. Die Kurve 2 stellt die Strahldichtedifferenz dar bei einer Erhöhung der Troposphärenmasse um 50 %. Dabei besteht ein näherungsweise linearer Zusammenhang zwischen der Massenzunahme und der Strahldichtedifferenz. Die Kurven 3 und 4 repräsentieren den Temperatureffekt. Kurve 3 berücksichtigt die Strahldichtedifferenz ($\Delta L_{\Delta\nu,2}$) infolge eines Fehlers in der Atmosphärentemperatur (T -Bias = 0.5 K). In Kurve 4 ($\Delta L_{\Delta\nu,3}$) ist zusätzlich ein Fehler in der Bodentemperatur (T_0 -Bias = 1.0 K) enthalten. Insbesondere eine Variation der Bodentemperatur T_0 (und damit der Bodenemission $\varepsilon_{\Delta\nu} B_{\Delta\nu}(T_0)$) ist betragsmäßig vergleichs-

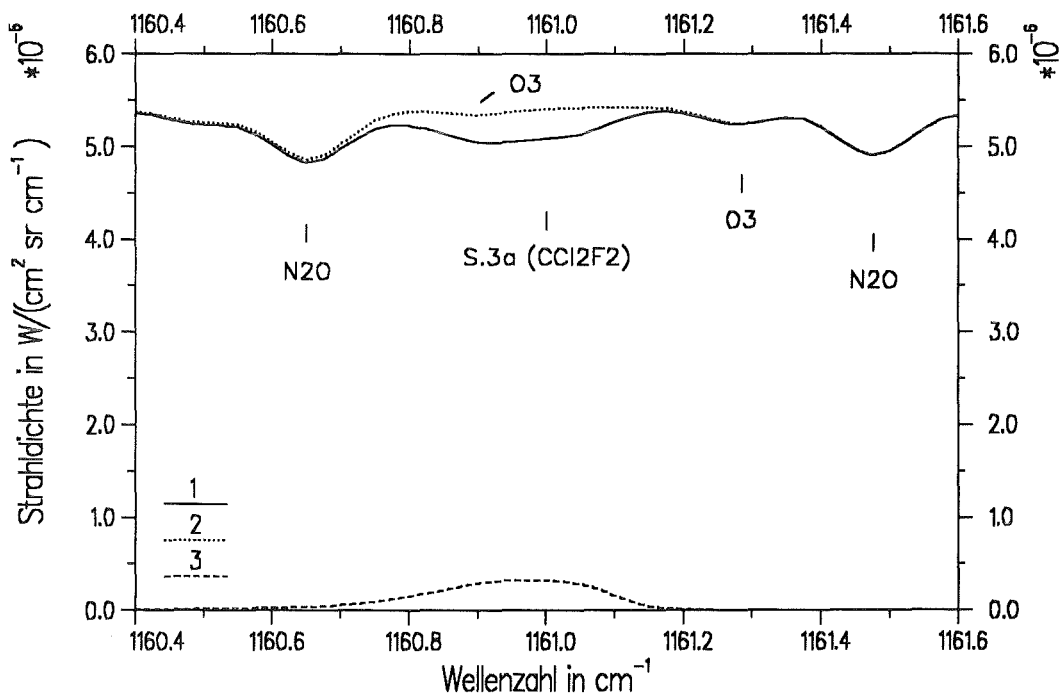


Abbildung 31. Strahldichtespektren im Bereich der 8.6 μm CCl_2F_2 -Bande.

$$\text{NESR} = 5.0 \cdot 10^{-9} \text{ W}/(\text{cm}^2 \text{ sr cm}^{-1}), \Delta\nu = 0.1 \text{ cm}^{-1}$$

1: alle Gase

2: alle Gase ohne CCl_2F_2

3: Differenz 2 - 1, entspricht dem Beitrag von CCl_2F_2

Der markierte CCl_2F_2 -Q-Zweig der 8.6 μm -Bande tritt sichtbar aus dem Spektrum hervor.

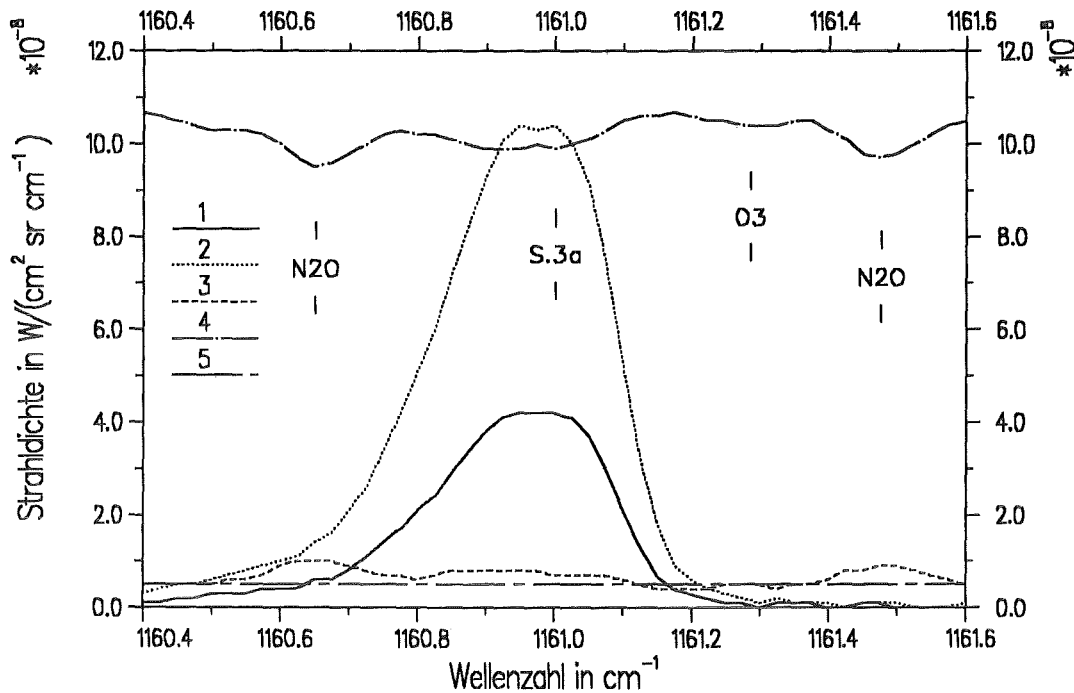


Abbildung 32. Differenzspektren im Bereich der 8.6 μm CCl_2F_2 -Bande ($\Delta\nu = 0.1 \text{ cm}^{-1}$).

- 1: $\Delta L_{\Delta\nu,1} = L_{\Delta\nu}(m_{\text{ges}}, T, T_0) - L_{\Delta\nu}(m_{\text{ges}} + 0.2 m_{\text{CCl}_2\text{F}_2, \text{Trop}}, T, T_0)$
- 2: $\Delta L_{\Delta\nu,2} = L_{\Delta\nu}(m_{\text{ges}}, T, T_0) - L_{\Delta\nu}(m_{\text{ges}} + 0.5 m_{\text{CCl}_2\text{F}_2, \text{Trop}}, T, T_0)$
- 3: $\Delta L_{\Delta\nu,3} = L_{\Delta\nu}(m_{\text{ges}}, T + 0.5 \text{ K}, T_0) - L_{\Delta\nu}(m_{\text{ges}}, T, T_0)$
- 4: $\Delta L_{\Delta\nu,4} = L_{\Delta\nu}(m_{\text{ges}}, T + 0.5 \text{ K}, T_0 + 1.0 \text{ K}) - L_{\Delta\nu}(m_{\text{ges}}, T, T_0)$
- 5: NESR = $5.0 \cdot 10^{-9} \text{ W}/(\text{cm}^2 \text{ sr cm}^{-1})$

Im Gegensatz zu den Strahllichteänderungen, hervorgerufen durch eine CCl_2F_2 -Massenvariation, ist die durch eine Temperaturvariation verursachte Strahllichteänderung praktisch wellenlängenunabhängig.

weise groß (vgl. Tabelle 11 auf Seite 69), da der größte Beitrag zum gemessenen Signal aufgrund der schwachen Absorption aus den bodennächsten Schichten sowie vom Boden stammt (siehe Abb. 33 auf Seite 72). Die Dominanz des Bodensignals gegenüber dem Atmosphärensignal ist verantwortlich für die verhältnismäßig schwache Massensensitivität der CCl_2F_2 -Signatur. Im Gegensatz zur Strahllichteänderung, hervorgerufen durch eine Massenvariation, ist die durch eine Temperaturvariation verursachte Strahllichteänderung im gesamten Spektrum praktisch wellenlängenunabhängig. Somit ist es möglich, durch Variation der Bodentemperatur ein gemessenes an ein berechnetes Spektrum im Bereich des Kontinuums zwischen den Spektrallinien anzupassen und den Einfluß von T_0 (und damit auch $\varepsilon_{\Delta\nu} B_{\Delta\nu}(T_0)$) weitgehend zu eliminieren.

Bei einer Steigerung der spektralen Auflösung auf $\Delta\nu = 0.05 \text{ cm}^{-1}$ läßt sich eine nur noch geringfügig von O_3 beeinflusste CCl_2F_2 -Signatur separieren (siehe Abb. 34 auf

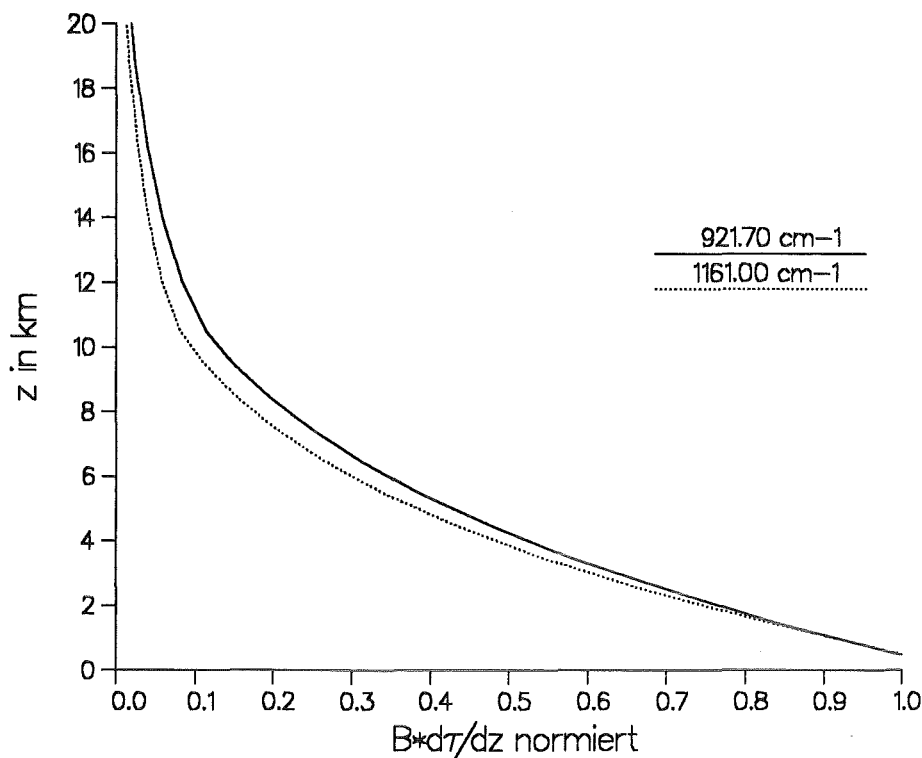


Abbildung 33. Beitragsfunktionen für CCl_2F_2 -Signaturen. Dargestellt ist der zentrale Bereich der Signatur 1 ($\nu = 921.70 \text{ cm}^{-1}$) sowie der Signatur 3a ($\nu = 1161.00 \text{ cm}^{-1}$) mit $\Delta\nu = 0.1 \text{ cm}^{-1}$. Der größte Beitrag zum Strahldichtesignal stammt aus den bodennächsten Schichten. Die Funktionsverläufe der Signaturen 2 und 3b sind qualitativ ähnlich und deshalb aus Gründen der Übersichtlichkeit nicht dargestellt.

Seite 73). Bezüglich der Massensensitivität bringt dies jedoch kaum Vorteile, denn $\Delta L_{\Delta\nu,1}$ ist nur wenig größer als im Fall von $\Delta\nu = 0.1 \text{ cm}^{-1}$. Dagegen nimmt das spektrale Rauschen um einen Faktor 2 zu, wodurch ein schlechteres Signal-zu-Rausch-Verhältnis bedingt ist. Daher genügt für eine CCl_2F_2 -Sondierung im allgemeinen eine Auflösung von $\Delta\nu = 0.1 \text{ cm}^{-1}$.

Die Genauigkeit zur Bestimmung der CCl_2F_2 -Gesamtmasse wurde in Kap. 4.2.1 mit 10 – 20 % angegeben. Da sich in einer vertikalen Säule durch die Atmosphäre etwas mehr als 80 % der Moleküle in der Troposphäre befinden, ist die CCl_2F_2 -Troposphärenkonzentration mit um nur wenige Prozentpunkte schlechterer Genauigkeit bestimmbar. Aufgrund der Zunahme der FCKW-12-Konzentration von zur Zeit rund 4 % pro Jahr werden die CCl_2F_2 -Signaturen längerfristig gesehen stärker aus dem Spektrum hervortreten. Da in den kommenden Jahren auch mit einer Verbesserung der momentan noch recht unzuverlässigen spektroskopischen Daten dieses Moleküls zu rechnen ist, wird sich die Meßgenauigkeit künftig noch verbessern.

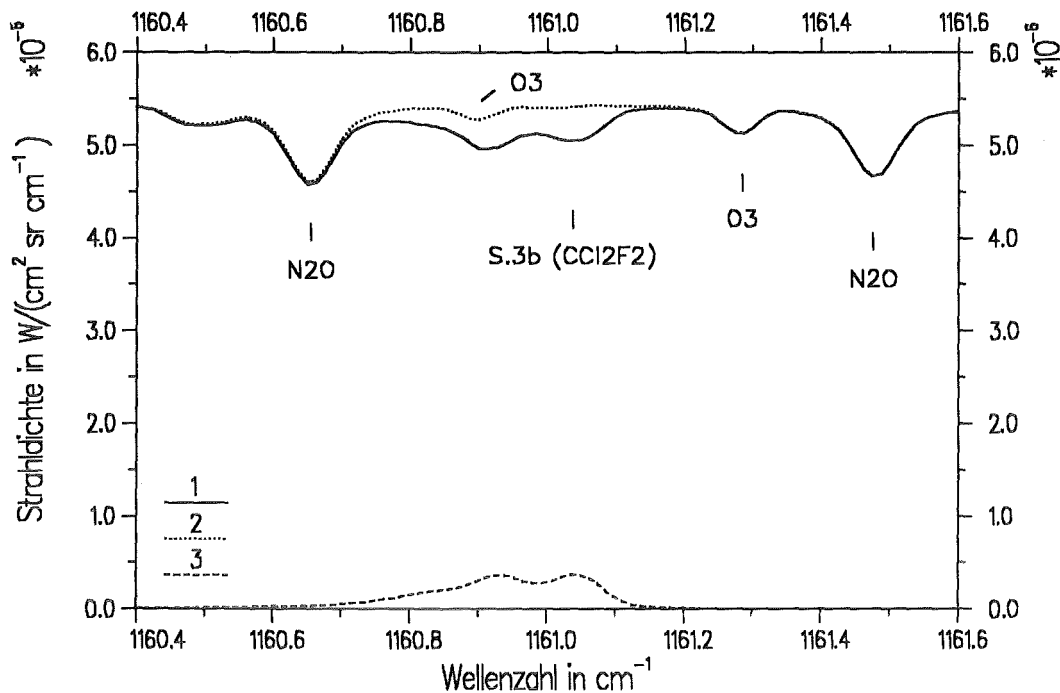


Abbildung 34. Nadirsondierung im Bereich der 8.6 μm CCl_2F_2 -Bande ($\Delta\nu = 0.05 \text{ cm}^{-1}$).

$$\text{NESR} = 1.0 \cdot 10^{-8} \text{ W}/(\text{cm}^2 \text{ sr cm}^{-1})$$

1: alle Gase

2: alle Gase ohne CCl_2F_2

3: Differenz 2 - 1, entspricht dem Beitrag von CCl_2F_2

Bei einer gesteigerten spektralen Auflösung von $\Delta\nu = 0.05 \text{ cm}^{-1}$ läßt sich eine nur noch geringfügig von O_3 beeinflusste CCl_2F_2 -Signatur separieren.

4.2.5 Der Einfluß von Cirruswolken auf die Strahllichtespektren

Sämtliche Wolkenstudien wurden mit dem in Kap. 2.2 beschriebenen Strahlungsübertragungsalgorithmus FASCOD2 durchgeführt. Dabei können Extinktionen durch Wolken näherungsweise simuliert werden. Explizite Streuprozesse werden allerdings nicht betrachtet. Der für Cirren berechnete Extinktionskoeffizient ist dabei proportional der Wolkendicke und wird im mittleren infraroten Spektralbereich als wellenlängenunabhängig angesehen.

In der Troposphäre kommen eine Vielzahl von Wolkenarten unterschiedlicher Form und Aggregatzustände vor. Während sich im wolkenlosen Fall der Erdboden als Hintergrundquelle im Spektrum auswirkt, kann diese Funktion auch von einer im infraroten Spektralbereich optisch dichten Wolke (z.B. Cumulus, Stratus) übernommen werden. Eine Sondierung der atmosphärischen Schichten hinter diesen Wolken ist nicht möglich. Aus einem solchen Spektrum können damit Atmosphärenparameter im Bereich zwi-

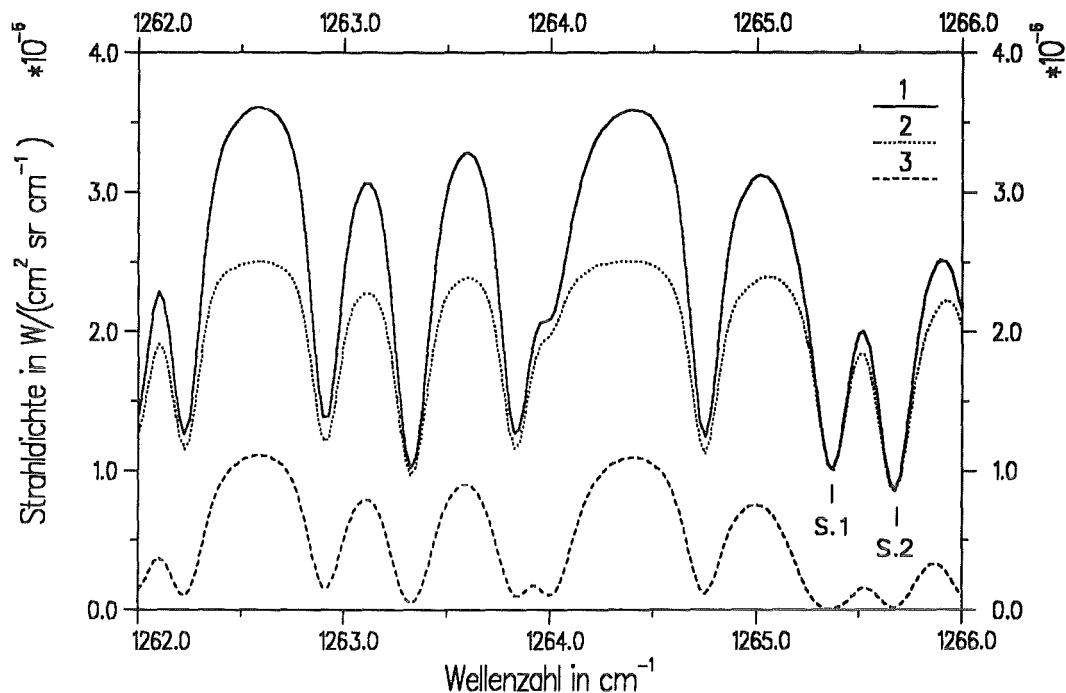


Abbildung 35. Nadirsondierung mit bzw. ohne Wolken.

$$\text{NESR} = 3.0 \cdot 10^{-9} \text{ W}/(\text{cm}^2 \text{ sr cm}^{-1}), \Delta\nu = 0.1 \text{ cm}^{-1}$$

1: wolkenlos

2: Cumuluswolke, Untergrenze: 0.7 km, Obergrenze: 2.7 km

3: Differenz 1 - 2

Eine optisch dichte Cumuluswolke absorbiert die gesamte von unten kommende Strahlung. Das Spektrum enthält daher lediglich Informationen aus dem Bereich zwischen Wolkenobergrenze und Sensor.

schen Sensor und Wolkenobergrenze abgeleitet werden; beispielsweise lassen sich die Wolkenoberflächentemperatur und damit, bei gleichzeitiger Kenntnis des Temperaturprofils, auch die Höhe der Wolkenobergrenze bestimmen. Abb. 35 zeigt die typischen Unterschiede eines Spektrums, gerechnet unter der Annahme wolkenloser Bedingungen, und eines Spektrums, gerechnet unter der Annahme einer Cumuluswolke in der unteren Troposphäre. In den Lücken zwischen den Signaturen entspricht die gemessene Information annähernd der Hintergrundstrahlung des Erdbodens (Kurve 1) bzw. der Wolke (Kurve 2). Deshalb ist die Strahlendichtedifferenz (Kurve 3) dort besonders groß. In den Zentren der starken Signaturen 1 ($\text{CH}_4 + \text{H}_2\text{O}$) bzw. 2 ($\text{N}_2\text{O} + \text{CH}_4$) ist die Strahlendichtedifferenz dagegen nur gering, da hier in beiden Fällen der größte Beitrag zum Signal aus höheren Troposphärenschichten stammt.

In der hohen Troposphäre findet man häufig Cirruswolken. Sie bestehen aus Eiskristallen. Ihre Transparenz hängt ab von der Beobachtungsrichtung, der räumlichen Aus-

dehnung, sowie der Dichte und Größenverteilung der Eiskristalle. Da es sich bei Cirren um hohe Schichtwolken mit in der Regel geringer vertikaler Mächtigkeit handelt, ist die Durchlässigkeit der Wolken bei der Nadirsondierung häufig noch recht groß.

Abb. 36 zeigt ein Spektrum für eine simulierte Nadirsondierung im Bereich der starken CH_4 - und N_2O -Banden mit Zentren bei 7.7 bzw. $7.8 \mu\text{m}$ unter der Annahme einer Standardatmosphäre für mittlere Breiten. Dargestellt ist ein Spektrum unter wolkenlosen Meßbedingungen (Kurve 1) sowie zwei Fälle, bei denen sich ein Cirrus in 9 km Basishöhe mit unterschiedlicher Dicke (0.5 und 1.0 km) befindet (Kurven 2 und 3). Aus der Betrachtung verschiedener Messungen der Dicke von Cirren ergab sich, daß die vertikale Ausdehnung der Eiskwolken in den meisten Fällen im Bereich zwischen 0 und 1 km lag

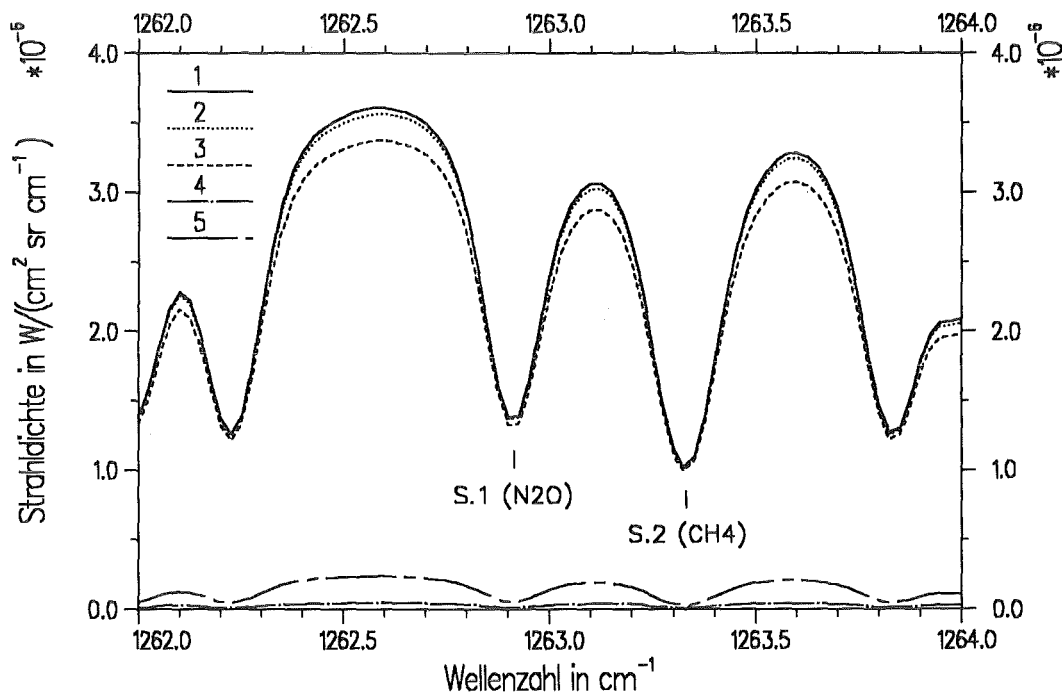


Abbildung 36. Strahldichtespektren ohne bzw. mit Cirruswolken unterschiedlicher Dicke bei gleicher Basishöhe.

$$\text{NESR} = 3.0 \cdot 10^{-9} \text{ W}/(\text{cm}^2 \text{ sr cm}^{-1}), \Delta\nu = 0.1 \text{ cm}^{-1}$$

- 1: wolkenlos
- 2: Cirruswolke, Basishöhe: 9 km , Dicke: 0.5 km
- 3: Cirruswolke, Basishöhe: 9 km , Dicke: 1.0 km
- 4: Differenz 1 - 2
- 5: Differenz 1 - 3

Der Einfluß von Cirren auf das Spektrum ist im Bereich des Kontinuums am größten. In den Zentren starker Signaturen macht sich der Einfluß dagegen nur wenig bemerkbar.

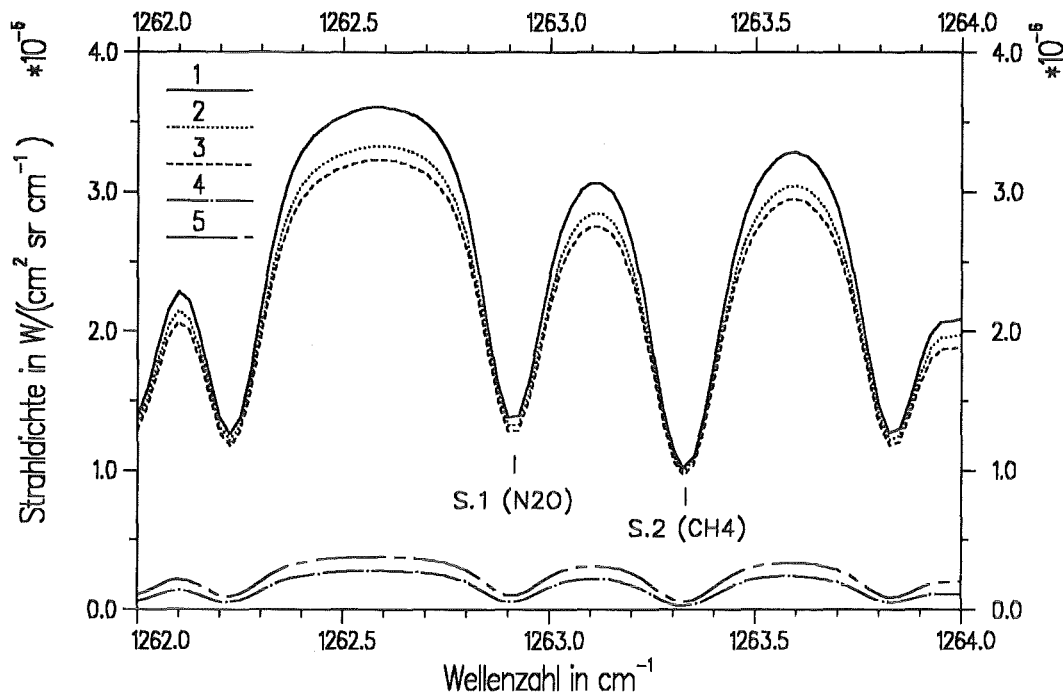


Abbildung 37. Strahllichtespektren ohne bzw. mit Cirruswolken gleicher Dicke in unterschiedlichen Höhen.

$NESR = 3.0 \cdot 10^{-9} W / (cm^2 sr cm^{-1})$, $\Delta v = 0.1 cm^{-1}$

1: wolkenlos

2: Cirruswolke, Basishöhe: 7 km, Dicke: 1.0 km

3: Cirruswolke, Basishöhe: 11 km, Dicke: 1.0 km

4: Differenz 1 - 2

5: Differenz 1 - 3

Der Einfluß von Cirren auf das Spektrum ist abhängig von ihrer Emissionstemperatur und damit von der Wolkenhöhe.

(KNEIZYS et al. 1983). Die Kurven 4 und 5 stellen die jeweilige Differenz der Spektren ohne bzw. mit Cirrus dar. Der Einfluß der Cirren auf das Spektrum ist abhängig von der Transmission der Wolken und damit hauptsächlich von der Wolkendicke. Er äußert sich am stärksten im Bereich des Kontinuums zwischen den Linien und am wenigsten in den Zentren starker Linien. Im Bereich des Kontinuums wird unter wolkenlosen Bedingungen von der Atmosphäre nur relativ wenig der vom Erdboden emittierten Hintergrundstrahlung absorbiert. Eine Cirruswolke dagegen absorbiert einen Teil dieser Hintergrundstrahlung. Die von der Wolke emittierte Strahlung ist aufgrund der niedrigeren Strahlungstemperatur wesentlich schwächer als die vom warmen Erdboden emittierte. Deshalb nimmt die am Sensor gemessene Strahllichte stark ab. Im Zentrum starker Signaturen (siehe S. 1 und insbesondere S. 2 in Abb. 36) wird dagegen bereits unter

wolkenlosen Verhältnissen der größte Teil der Hintergrundstrahlung in der mittleren und hohen Troposphäre absorbiert und bei niedrigen Temperaturen wieder emittiert. Ein zusätzlicher Absorber wie eine Cirruswolke in der oberen Troposphäre verändert die Lage des Hauptemissionsniveaus deshalb nur wenig. Daher ist die resultierende Strahldichtedifferenz sehr klein.

Wie stark der Einfluß einer Cirruswolke auf das Strahldichtespektrum ist, hängt also auch von ihrer Emissionstemperatur und damit von ihrer Höhe in der Atmosphäre ab. In Abb. 37 auf Seite 76 ist dieser Einfluß dargestellt. Die Strahldichteänderung gegenüber dem Spektrum unter wolkenlosen Bedingungen ist im Falle der hohen (kalten) Wolke mit einer Basishöhe von 11 km (Kurve 5) größer als im Falle der tiefer gelegenen (wärmeren) Wolke mit einer Basishöhe von 7 km (Kurve 4). Die Transmission beider Wolken ist dabei gleich groß und beträgt $\tau = 0.87$. Aufgrund von unterschiedlichen mittleren

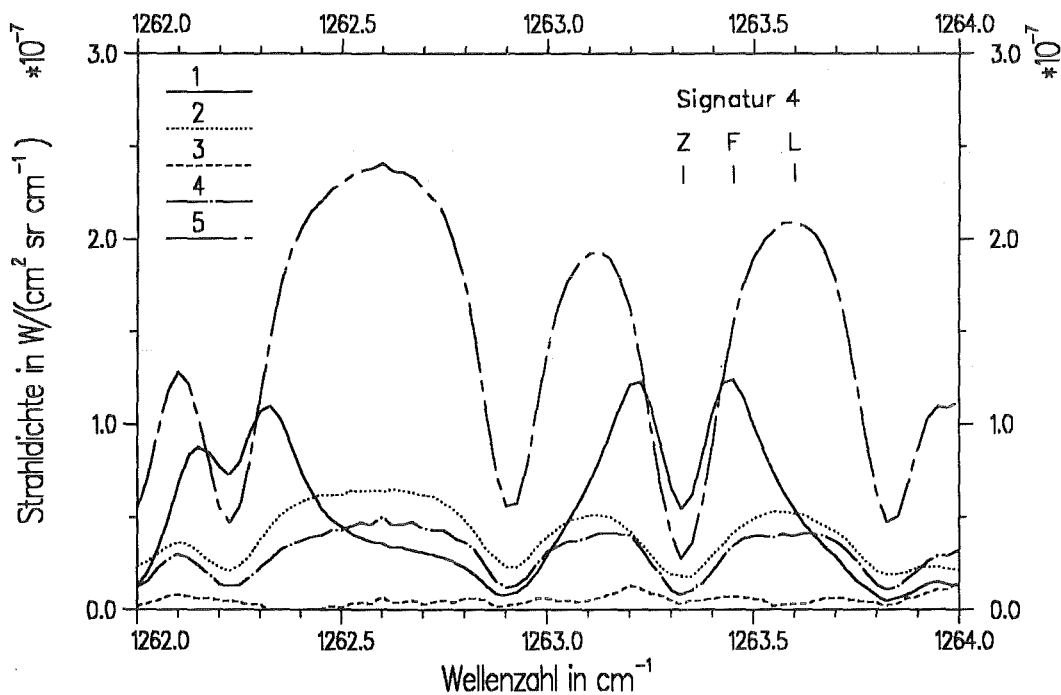


Abbildung 38. Differenzspektren im Bereich der CH₄-Signatur bei $\nu = 1263.33 \text{ cm}^{-1}$.

$$\text{NESR} = 3.0 \cdot 10^{-9} \text{ W}/(\text{cm}^2 \text{ sr cm}^{-1}), \Delta\nu = 0.1 \text{ cm}^{-1}$$

$$1: \Delta L_{\Delta\nu} = L_{\Delta\nu}(m_{\text{ges}}, T, T_0) - L_{\Delta\nu}(m_{\text{ges}} + 0.2 m_{\text{CH}_4, \text{Trop}}, T, T_0), \text{ wolkenlos}$$

$$2: \Delta L_{\Delta\nu} = L_{\Delta\nu}(m_{\text{ges}}, T + 0.5 \text{ K}, T_0 + 1.0 \text{ K}) - L_{\Delta\nu}(m_{\text{ges}}, T, T_0), \text{ wolkenlos}$$

$$3: \Delta L_{\Delta\nu} = L_{\Delta\nu}(\text{wolkenlos}) - L_{\Delta\nu}(\text{Cirruswolke, Basishöhe: 9 km, Dicke: 0.3 km})$$

$$4: \Delta L_{\Delta\nu} = L_{\Delta\nu}(\text{wolkenlos}) - L_{\Delta\nu}(\text{Cirruswolke, Basishöhe: 9 km, Dicke: 0.5 km})$$

$$5: \Delta L_{\Delta\nu} = L_{\Delta\nu}(\text{wolkenlos}) - L_{\Delta\nu}(\text{Cirruswolke, Basishöhe: 9 km, Dicke: 1.0 km})$$

Dargestellt ist der Einfluß von Massen- und Temperaturänderungen auf das Spektrum im Vergleich zum Einfluß von Cirren (in Abhängigkeit von der Wolkendicke).

Teilchengrößen- und Teilchendichteverteilungen in verschiedenen Höhen, können im allgemeinen Fall bei einer modellierten Wolkendicke von 1 km höhenabhängige Variationen der Wolkentransmission auftreten, die um bis zu 5 % von diesem mittleren Wert abweichen.

Signatur (cm^{-1})	$L_{\Delta v}$ (wolkenlos)	$\Delta L_{\Delta v,1}$ $\Delta m_{\text{CH}_4, \text{Trop}}$ + 20 %	$\Delta L_{\Delta v,2}$ T-Profil: Bias = 0.5 K T_0 : Bias = 1.0 K	$\Delta L_{\Delta v,3}$ Cirrusdicke: 0.3 km	$\Delta L_{\Delta v,4}$ Cirrusdicke: 0.5 km	$\Delta L_{\Delta v,5}$ Cirrusdicke: 1.0 km
1: 1228.80 (Z)	0.3066	0.0124 (4.0)	0.0052 (1.7)	0.0016 (0.5)	0.0049 (1.6)	0.0195 (6.4)
2: 1236.00 (Z)	0.2233	0.0145 (6.5)	0.0031 (1.4)	0.0011 (0.5)	0.0032 (1.4)	0.0123 (5.5)
3: 1255.00 (Z) 1255.07 (F)	0.1582 0.2641	0.0096 (6.1) 0.0109 (4.1)	0.0027 (1.7) 0.0049 (1.9)	0.0005 (0.3) 0.0008 (0.3)	0.0017 (1.1) 0.0036 (1.4)	0.0071 (4.5) 0.0159 (6.0)
4: 1263.33 (Z) 1263.45 (F) 1263.60 (L)	0.1020 0.2575 0.3288	0.0054 (5.3) 0.0124 (4.8) 0.0054 (1.6)	0.0018 (1.8) 0.0041 (1.6) 0.0052 (1.6)	0.0003 (0.3) 0.0007 (0.3) 0.0003 (0.1)	0.0008 (0.8) 0.0034 (1.3) 0.0040 (1.2)	0.0028 (2.7) 0.0153 (5.9) 0.0209 (6.4)
$L_{\Delta v}, \Delta L_{\Delta v}$ in $10^{-5} \text{ W}/(\text{cm}^2 \text{ sr cm}^{-1})$, bzw. in Klammern: $\Delta L_{\Delta v}/L_{\Delta v}$ in %, $\text{NESR} = 3.0 \cdot 10^{-9} \text{ W}/(\text{cm}^2 \text{ sr cm}^{-1})$						

Tabelle 12. Nadirsondierung ohne bzw. mit Cirruswolken. Massen- und Temperatursensitivität sowie Strahldichteänderungen infolge Cirren (Basishöhe: 9 km) im Bereich der angegebenen CH_4 -Signaturen (Z = Signaturzentrum, F = massensensitivste Stelle im Flügel, L = Lücke zur benachbarten Signatur), $\Delta v = 0.1 \text{ cm}^{-1}$.

Ein Größenvergleich zwischen spektralen Strahldichteänderungen, hervorgerufen durch Cirren bzw. durch Variationen der Masse eines bestimmten Gases oder der Temperatur, ist dargestellt in Abb. 38 auf Seite 77. Markiert sind dabei das Zentrum (Z) der CH_4 -Signatur bei 1263.33 cm^{-1} , sowie deren massensensitivster Teil im Flügel (F) und die Lücke (L) zur benachbarten Signatur. Die dazugehörigen Zahlenwerte, sowie die Daten der bereits in Kap. 4.2.4.1 diskutierten CH_4 -Signaturen sind in Tabelle 12 eingetragen. Zunächst ist auffallend, daß eine Cirruswolke von 0.3 km Dicke das Spektrum noch verhältnismäßig wenig beeinflusst (Kurve 3). Es ist auch keine eindeutige Systematik im Kurvenverlauf erkennbar. Ein Grund dafür kann numerisches Rauschen bei diesen kleinen Strahldichtedifferenzen sein. Im betrachteten Beispiel der CH_4 -Signaturen werden derartig kleine Strahldichteänderungen bereits durch geringfügige troposphärische Massenänderungen von 1 - 2 % verursacht (siehe Tabelle 13 auf Seite 79). Die Vernachlässigung einer solchen Cirruswolke führt demnach zu einem entsprechend großen Fehler bei der Gasmasse.

Signatur (cm ⁻¹)	$\Delta L_{\Delta v}(\text{Cirrus}) = \Delta L_{\Delta v}(m_{g,\text{Trop}} + \Delta m_{g,\text{Trop}})$ für $\left(\frac{\Delta m_{g,\text{Trop}}}{m_{g,\text{Trop}}}\right)$ in %		
	Cirrusdicke: 0.3 km	Cirrusdicke: 0.5 km	Cirrusdicke: 1.0 km
1: 1228.80 (Z)	2.2	7.3	33.1
2: 1236.00 (Z)	1.3	3.7	16.5
3: 1255.00 (Z)	0.8	3.1	14.1
1255.07 (F)	1.3	6.3	30.0
4: 1263.33 (Z)	0.9	2.4	8.9
1263.45 (F)	1.0	4.7	25.3
1263.60 (L)	1.0	13.8	113.2

Tabelle 13. Wolkensensitivität der CH₄-Signaturen im Vergleich zu deren Massensensitivität. Die Strahldichteänderungen, hervorgerufen durch Cirren (Basishöhe: 9 km), werden in Beziehung gesetzt zu Strahldichteänderungen, hervorgerufen durch die angegebene troposphärische Massenerhöhung (Z = Signaturzentrum, F = massensensitivste Stelle im Flügel, L = Lücke zur benachbarten Signatur), $\Delta v = 0.1 \text{ cm}^{-1}$.

Dickere Cirren maskieren das Spektrum in erheblich stärkerem Maße (Kurven 4 und 5 in Abb. 38). So steigt der Massenbestimmungsfehler bei Unkenntnis der Cirren deutlich an und erreicht bei schwachen Signaturen (Signatur 1 in Tabelle 13) sowie insbesondere im Kontinuumsbereich zwischen den Signaturen die größten Werte, während er im Signaturzentrum am kleinsten ist. Bei einem Cirrus von 0.5 km Dicke liegt der Fehler je nach Stützstelle im Bereich unterschiedlich starker Signaturen zwischen 2 und 7 %. Aufgrund der im Spektralbereich des mittleren Infrarots wellenlängenunabhängigen Modellierung der Cirrustransmission, erhält man für sämtliche in diesem Spektralbereich relevanten Gase übereinstimmende Ergebnisse. Die Wellenlängenunabhängigkeit der Cirrustransmission stellt eine grobe Näherung dar. In Wirklichkeit beeinflussen Cirren das Spektrum in Abhängigkeit von der Wellenlänge in unterschiedlich starker Weise (SMITH et al. 1992). Diese spektrale Charakteristik sollte prinzipiell ausgenutzt werden, um den Einfluß der Cirren auf das Spektrum zu quantifizieren.

Da das Absorptions- und Emissionsverhalten der Wolken hauptsächlich von der Wolkentemperatur (abhängig von der Wolkenhöhe) und der Wolkendicke abhängt, ist es erforderlich, diese Wolkenparameter zu bestimmen, um Spurengaskonzentrationen aus Spektren ableiten zu können, die relevante Beiträge von Cirren enthalten. Dazu ist die Kenntnis des Temperaturprofils erforderlich, das aus Spektren im Bereich der 15 μm CO₂-Bande bzw. aus Radiosondendaten ermittelt werden kann. Darüberhinaus können auch weitere a priori Informationen über Wolkenparameter, z.B. aus Radiometermes-

sungen in anderen Spektralbereichen (visueller Bereich und nahes Infrarot) und verschiedenen Kanälen (WAHICHE et al. 1986) dazu genutzt werden, den Einfluß der Wolken aus den Infrarotspektren herauszufiltern.

5. Andere Meßgeometrien

5.1 Horizontsondierung vom Satelliten aus

Die Leistungsfähigkeit der Infrarotspektroskopie zur Messung stratosphärischer Spurenstoffe hat sich in den vergangenen Jahren bereits bewährt (FISCHER 1992). Insbesondere die Horizontsondierung vom Satelliten bietet die Möglichkeit, die Verteilung einer Vielzahl von stratosphärischen Spurengasen mit guter vertikaler Auflösung zu erfassen (OELHAF und FISCHER 1983, ECHLE et al. 1992). In der Troposphäre werden die Möglichkeiten der Horizontsondierung erheblich eingeschränkt durch die kräftige Absorption des Wasserdampfs in Verbindung mit den stark druckverbreiterten Spektrallinien, sowie durch die hohe Wahrscheinlichkeit des Vorhandenseins von Wolken entlang des langen optischen Weges durch die Troposphäre (vgl. Kap. 2.3). Daher ist eine Fernerkundung von Spurengasen nur in der oberen bis mittleren Troposphäre in spektralen Fensterbereichen möglich.

In Abb. 39 auf Seite 82 ist eine Sequenz von simulierten Strahldichtespektren im verhältnismäßig schwach absorbierenden Spektralbereich des atmosphärischen Fensters dargestellt. Verändert wurde dabei der kleinste Abstand des optischen Weges zur Erdoberfläche, die Tangentenhöhe z_{\min} . In allen Spektren treten die Linienzentren als Strahldichtemaxima hervor, da die Hintergrundstrahlung aus dem kalten Weltraum vernachlässigbar gering ist. Bei der größten Tangentenhöhe ($z_{\min} = 15$ km, Abb. 39 oben) sind kräftige Beiträge des in der Stratosphäre bedeutenden Gases HNO_3 im Spektrum enthalten, speziell die beiden Q-Zweige bei 879 bzw. 896 cm^{-1} treten deutlich hervor. Die Beiträge der Fluorchlorkohlenwasserstoffe CCl_3F (FCKW-11, von 835 bis 860 cm^{-1}) und CCl_2F_2 (FCKW-12, von 905 bis 935 cm^{-1}) sind hier nur schwach ausgeprägt, da das Mischungsverhältnis dieser Gase in diesen Höhen noch klein ist. Mit abnehmender Tangentenhöhe nimmt der Beitrag dieser Moleküle rasch zu. Dasselbe gilt auch für den Wasserdampf. Je kleiner die Tangentenhöhe ist, desto deutlicher treten zum Teil kräftige H_2O -Signaturen aus dem Spektrum hervor. Bei $z_{\min} = 5$ km sind im Spektrum neben CO_2 -Signaturen (oberhalb 920 cm^{-1}) im wesentlichen nur noch H_2O -Signaturen separierbar. Da ein beträchtlicher Teil des optischen Weges durch tiefe, massenreiche und verhältnismäßig warme Atmosphärenschichten führt, wird die Emission auch zwischen den Linien immer stärker und der Beitrag des Kontinuums zum Gesamtspektrum nimmt zu. Die HNO_3 -Linien sind daher weitgehend von H_2O -Emissionen überdeckt.

Abb. 40 auf Seite 83 zeigt das Strahldichtespektrum im Bereich der CCl_3F -Bande mit Zentrum nahe 11.8 μm bei einer Tangentenhöhe von $z_{\min} = 8$ km. Der Beitrag des Gases CCl_3F ist in diesem Spektralbereich unter den gegebenen Geometrieverhältnissen dominant. Es sind jedoch keine einzelnen CCl_3F -Signaturen separierbar, im Gegensatz

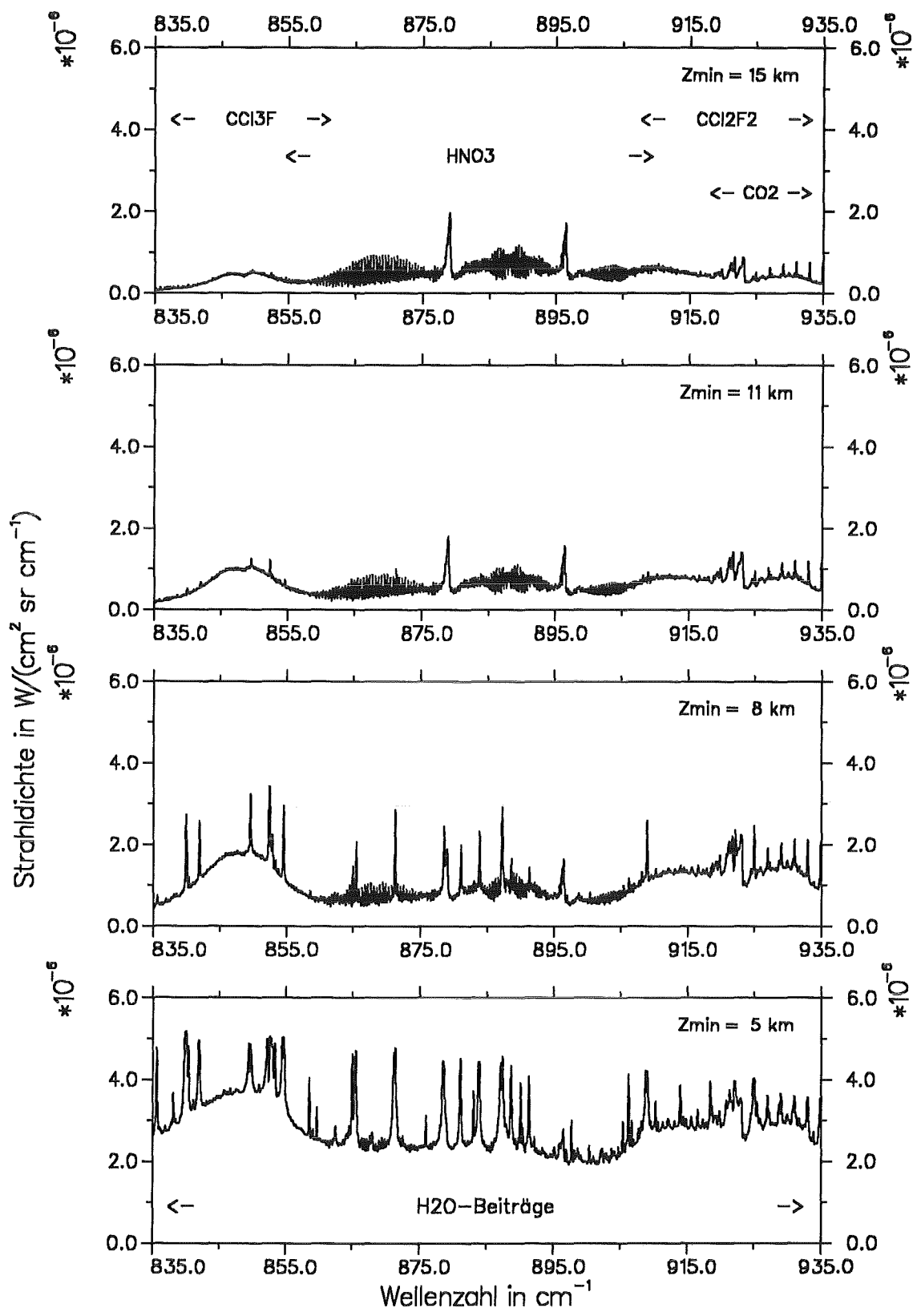


Abbildung 39. Horizontsondierung mit unterschiedlichen Tangentenhöhen.

$$\text{NESR} = 1.5 \cdot 10^{-8} \text{ W}/(\text{cm}^2 \text{sr cm}^{-1}), \Delta\nu = 0.1 \text{ cm}^{-1}$$

zu den deutlich hervortretenden, kräftigen H₂O-Signaturen. Desweiteren ist das Spektrum noch durch schwache Beiträge von Gasen wie HNO₃, CO₂ und O₃ maskiert.

Der Einfluß einer 20-prozentigen Erhöhung der CCl₃F-Masse in der Atmosphäre ist in Abb. 41 auf Seite 84 dargestellt (Kurve 1). Die Strahllichteänderung ($\Delta L_{\Delta\nu,1}$) ist im zentralen Bereich der CCl₃F-Bande am größten und überwiegt dort die infolge einer Erhöhung der Atmosphärentemperatur um 0.5 K hervorgerufene Strahllichteänderung ($\Delta L_{\Delta\nu,2}$) um etwas mehr als einen Faktor 10. Die Strahllichtedifferenz $\Delta L_{\Delta\nu,2}$ ist üblicherweise in den Zentren der Banden bzw. Linien am größten, da dort die Emission am stärksten ist. Dies spiegelt sich im Funktionsverlauf von Kurve 2 wider. Dabei liegt dieses Signal im ausgewählten Spektralbereich größenordnungsmäßig im Bereich des spektralen Rauschens (Kurve 3). Ein systematischer Temperaturfehler von $\Delta T = 0.5$ K verursacht betragsmäßig dieselbe Strahllichteänderung an der betrachteten Stützstelle (846.50 cm⁻¹) wie eine CCl₃F-Gesamtmassenänderung von rund 2 % (siehe Tabelle 14

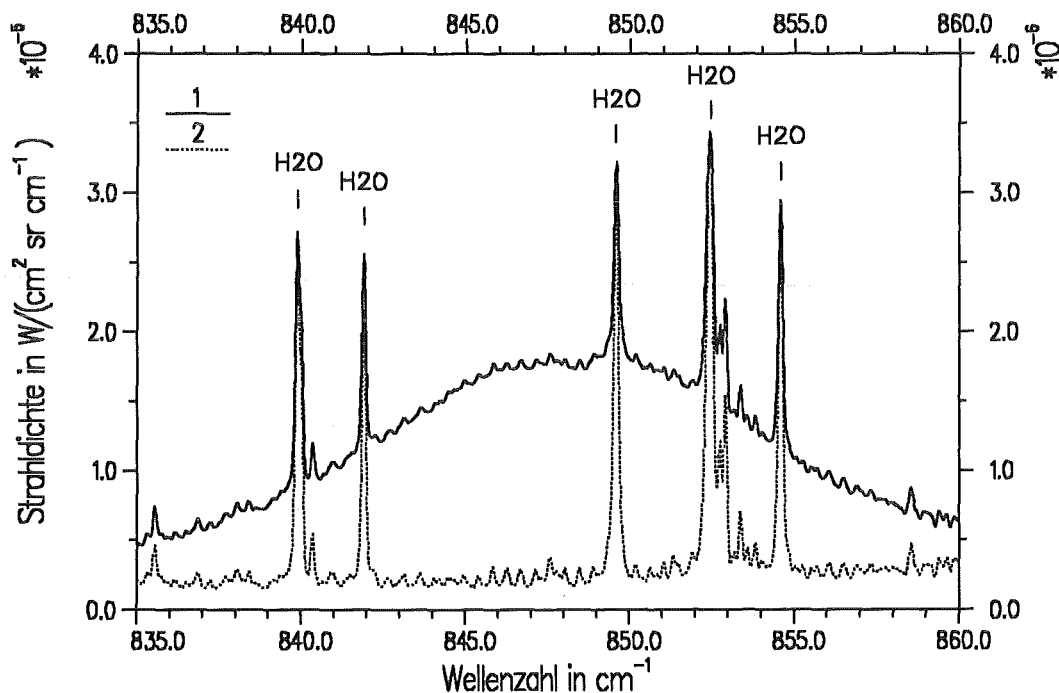


Abbildung 40. Strahllichtespektren im Bereich der 11.8 µm CCl₃F-Bande, $z_{\min} = 8$ km.

NESR = $1.5 \cdot 10^{-8}$ W/(cm² sr cm⁻¹), $\Delta\nu = 0.1$ cm⁻¹

1: alle Gase

2: alle Gase ohne CCl₃F

Das Spektrum enthält kräftige CCl₃F-Beiträge. Es sind jedoch keine einzelnen CCl₃F-Signaturen separierbar. Daneben sind einige H₂O-Signaturen, sowie schwache Beiträge von Gasen wie HNO₃, CO₂ und O₃ enthalten.

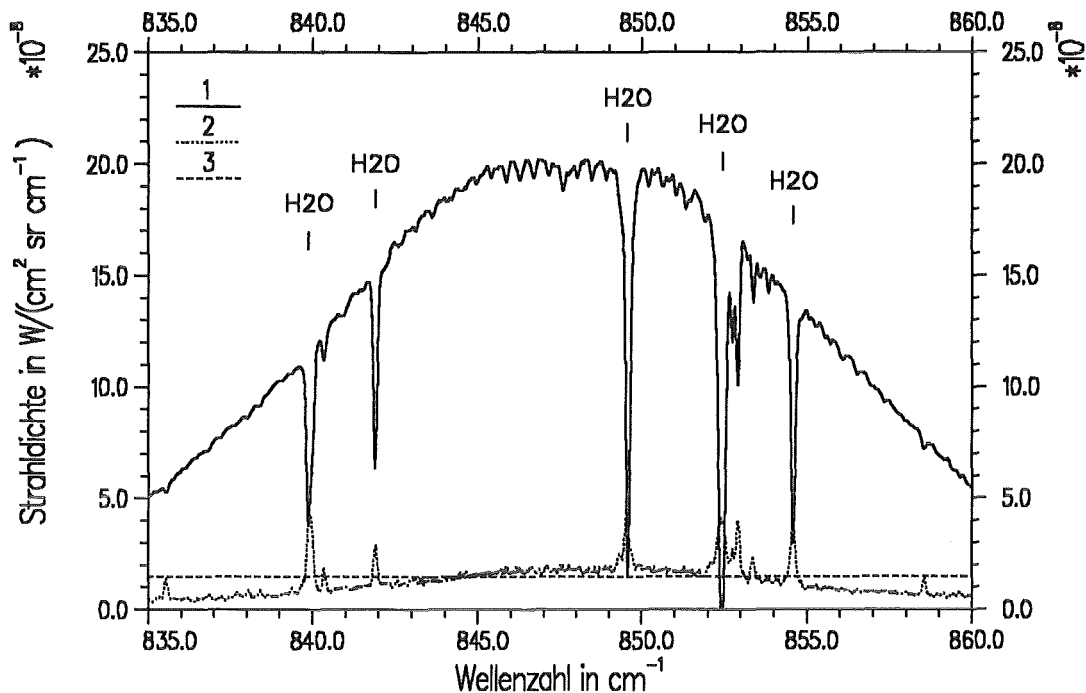


Abbildung 41. Differenzspektren im Bereich der 11.8 μm CCl_3F -Bande, $z_{\text{min}} = 8$ km.

$$\Delta\nu = 0.1 \text{ cm}^{-1}$$

$$1: \Delta L_{\Delta\nu,1} = L_{\Delta\nu}(m_{\text{ges}} + 0.2 m_{\text{CCl}_3\text{F}}, T) - L_{\Delta\nu}(m_{\text{ges}}, T)$$

$$2: \Delta L_{\Delta\nu,2} = L_{\Delta\nu}(m_{\text{ges}}, T + 0.5 \text{ K}) - L_{\Delta\nu}(m_{\text{ges}}, T)$$

$$3: \text{NESR} = 1.5 \cdot 10^{-8} \text{ W}/(\text{cm}^2 \text{ sr cm}^{-1})$$

Die durch eine 20-prozentige CCl_3F -Massenänderung hervorgerufene Strahllichtedifferenz überwiegt deutlich die durch eine Temperaturänderung von 0.5 K hervorgerufene Differenz.

auf Seite 86, rechte Spalte). Tabelle 14 zeigt die Ergebnisse der entsprechenden Sensitivitätsstudien für drei weitere Tangentenhöhen. Das Signal-zu-Rausch-Verhältnis ($\Delta L_{\Delta\nu,1}/\text{NESR}$) ist auch bei der 15 km Tangentenhöhe noch groß genug, um Strahllichtedifferenzen, hervorgerufen durch 20-prozentige CCl_3F -Massenänderungen, auflösen zu können. Dort ist die relative Strahllichteänderung mit 16 % am größten.

Der größte Beitrag zum Strahllichtesignal stammt dabei - geometrisch bedingt - aus dem Bereich der Tangentenhöhe. Dies zeigt Abb. 42 auf Seite 85 exemplarisch anhand der Beitragsfunktion für $z_{\text{min}} = 8$ km. Die Funktionen für die anderen Tangentenhöhen sind qualitativ ähnlich. Eine CCl_3F -Gesamtmassenerhöhung von 20 % ändert ebenfalls nichts wesentliches am Verlauf dieser Beitragsfunktionen. Das bedeutet, die Information stammt auch bei dieser erhöhten Gaskonzentration immer noch aus nahezu demselben Höhenbereich der Atmosphäre. Die Strahllichteänderung $\Delta L_{\Delta\nu,1}$ beruht also in erster Linie auf der Zunahme der emittierenden CCl_3F -Moleküle. Dies ist ein wesentlicher Unter-

schied zur Nadirsondierung, wo die entsprechende Strahldichteänderung hauptsächlich durch die vertikale Verschiebung des Emissionsniveaus in einen anderen Temperaturbereich der Atmosphäre zustande kommt.

Am Beispiel des Moleküls CCl_3F wurde gezeigt, daß es möglich ist, die Konzentration dieses Spurengases über weite Höhenbereiche von der mittleren Troposphäre bis in die untere Stratosphäre mit einer Genauigkeit von 10 - 20 % abzuleiten. Auch für eine Reihe weiterer Gase (z.B. H_2O , CH_4 , N_2O , und CCl_2F_2) ist dies mit einer ähnlich hohen Genauigkeit möglich (ECHLE et al. 1992). Der meßbare Höhenbereich wird dabei unter anderem bestimmt durch das Konzentrationsprofil der entsprechenden Gase in Verbindung mit der Lage und Intensität der vorhandenen Spektrallinien. Die untere Höhenbegrenzung wird häufig durch die spezifischen optischen Eigenschaften der Troposphäre festgelegt, während die obere Begrenzung im allgemeinen durch das erreichbare Signal-zu-Rausch-Verhältnis festgesetzt wird.

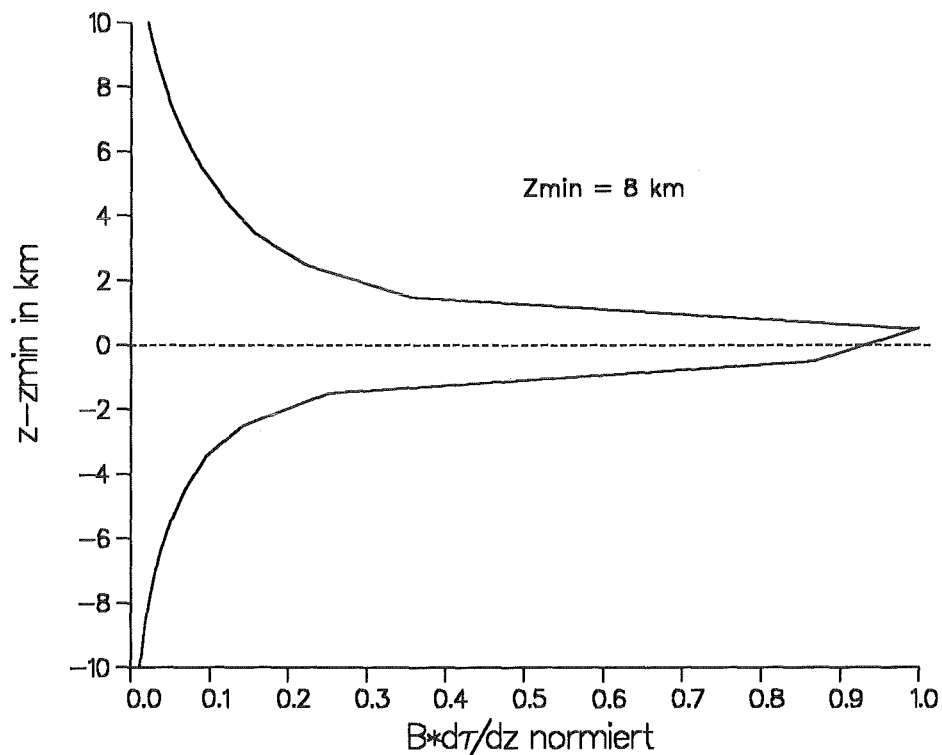


Abbildung 42. Beitragsfunktion im Bereich der $11.8 \mu\text{m}$ CCl_3F -Bande bei $\nu = 846.50 \text{ cm}^{-1}$ ($z_{\text{min}} = 8 \text{ km}$). $\Delta\nu = 0.1 \text{ cm}^{-1}$.

An der Ordinate aufgetragen ist die Differenz $z - z_{\text{min}}$, das bedeutet der Bereich $z - z_{\text{min}} > 0$ repräsentiert (Höhen-) Punkte auf dem optischen Weg zwischen Beobachter und Tangentenhöhe. Der Bereich $z - z_{\text{min}} < 0$ ist repräsentativ für den Abschnitt jenseits der Tangentenhöhe (und wurde deshalb zur Unterscheidung mit negativem Vorzeichen versehen). Der größte Beitrag zum Strahldichtesignal stammt aus dem Bereich der Tangentenhöhe ($z - z_{\text{min}} = 0$).

Am Beispiel der CCl_3F -Sondierung wurde gezeigt, daß Gase, deren Masse mittels einer Nadirsondierung nur recht ungenau bestimmt werden kann (vgl. Kap. 4.2.2), bei einer Horizontsondierung über weite Höhenbereiche mit guter Genauigkeit gemessen werden können. Grundsätzlich ist die Auswahl der Sondierungsgeometrie in starkem Maße von der jeweiligen Aufgabenstellung abhängig, da beide Sondierungsgeometrien in der Anwendung ihre Grenzen besitzen. Die Nadirsondierung ist insbesondere dazu geeignet, den Troposphären- und/oder Gesamtgehalt einer stark begrenzten Anzahl von Spurengasen mit guter räumlicher Auflösung zu messen. Die Horizontsondierung eignet sich, um Verteilungen zahlreicher Spurengase in der Stratosphäre und oberen Troposphäre mit guter vertikaler Auflösung zu bestimmen. Problematisch ist allerdings die Bestimmung von Spurengaskonzentrationen in der oberen Troposphäre bei denjenigen Gasen, die im Profil ein Maximum in der Stratosphäre haben, da in diesen Fällen die Troposphäre nur verhältnismäßig wenig Beitrag zum Strahldichtesignal leistet.

Z_{\min} (km)	$L_{\Delta\nu}$	$\Delta L_{\Delta\nu,1}$ $\Delta m_{\text{CCl}_3\text{F}}$ + 20 %	$\frac{\Delta L_{\Delta\nu,1}}{\text{NESR}}$	$\Delta L_{\Delta\nu,2}$ T-Profil: Bias = 0.5 K	$\frac{\Delta L_{\Delta\nu,1}}{\Delta L_{\Delta\nu,2}}$	$\frac{\Delta L_{\Delta\nu,2}}{\Delta L_{\Delta\nu,1}} \hat{=}$ $\Delta m_{\text{CCl}_3\text{F}}$ in %
15	0.0457	0.0073 (16.0)	4.9	0.0005 (1.1)	14.6	1.4
11	0.0974	0.0138 (14.2)	9.2	0.0012 (1.2)	11.5	1.9
8	0.1734	0.0202 (11.6)	13.5	0.0017 (1.0)	11.9	1.9
5	0.3641	0.0153 (4.2)	10.2	0.0026 (0.7)	5.9	4.0

$L_{\Delta\nu}, \Delta L_{\Delta\nu}$ in $10^{-5} \text{ W}/(\text{cm}^2 \text{ sr cm}^{-1})$, bzw. in Klammern: $\Delta L_{\Delta\nu}/L_{\Delta\nu}$ in %,
NESR = $1.5 \cdot 10^{-8} \text{ W}/(\text{cm}^2 \text{ sr cm}^{-1})$

Tabelle 14. Horizontsondierung von CCl_3F . Massen- und Temperatursensitivität für die Stützstelle bei $\nu = 846.50 \text{ cm}^{-1}$ im Zentrum der $11.8 \mu\text{m}$ CCl_3F -Bande, $\Delta\nu = 0.1 \text{ cm}^{-1}$.

5.2 Flugzeugsondierung

5.2.1 Nadirsondierung

Flugzeugsondierungen bieten gegenüber Messungen vom Satelliten aus dann Vorteile, wenn troposphärische Verteilungen von Gasen mit einem Konzentrationsmaximum in der Stratosphäre bestimmt werden sollen. Bei Flughöhen in der Troposphäre enthält ein mittels einer Nadirsondierung gemessenes Spektrum natürlich keinerlei Information aus der Stratosphäre. Dabei treten allerdings die üblichen Probleme der Nadirsondierung auf, wie die stark strahlende Erdoberfläche hinter dem Atmosphärensignal, sowie eine verhältnismäßig schlechte vertikale Auflösung bei der Messung. Abb. 43 zeigt am Beispiel von Ozon den Unterschied zweier (simulierter) Nadirsondierungsspektren, beobachtet vom Satelliten ($z_{\text{obs}} = 800 \text{ km}$) bzw. vom Flugzeug aus ($z_{\text{obs}} = 10 \text{ km}$). Bei der

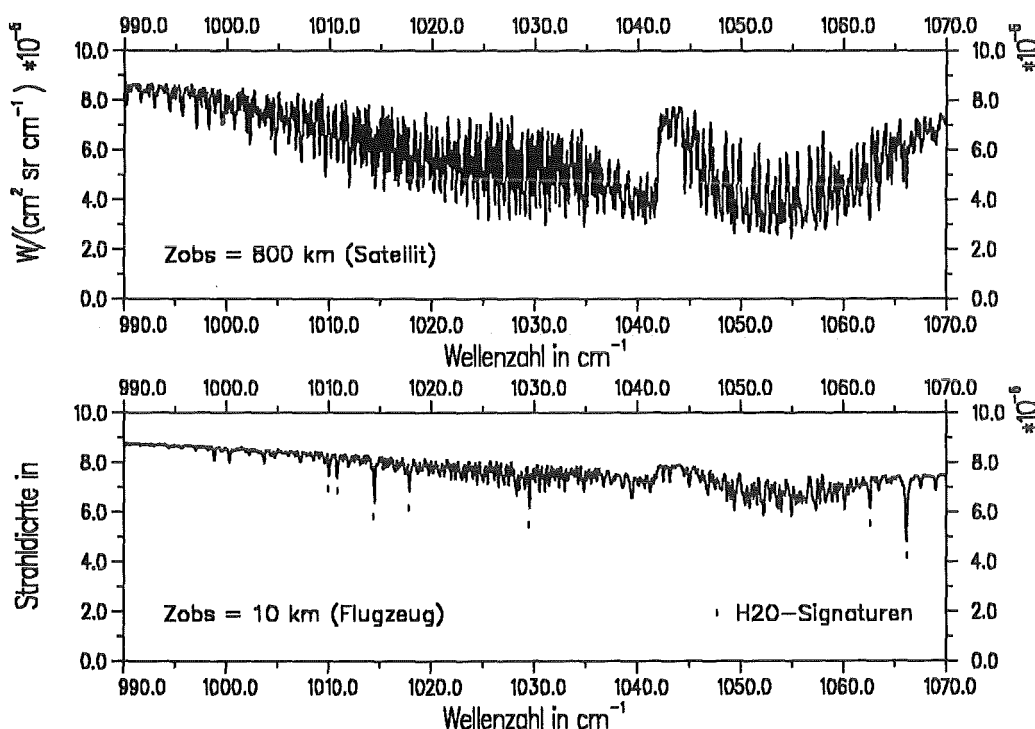


Abbildung 43. Nadirsondierungsspektren im Bereich der $9.6 \mu\text{m}$ O_3 -Bande.

$$\text{NESR} = 5.0 \cdot 10^{-9} \text{ W}/(\text{cm}^2 \text{ sr cm}^{-1}), \Delta\nu = 0.1 \text{ W}/(\text{cm}^2 \text{ sr cm}^{-1})$$

oben: $z_{\text{obs}} = 800 \text{ km}$ (Satellit)

unten: $z_{\text{obs}} = 10 \text{ km}$ (Flugzeug)

Aufgrund der kleinen troposphärischen O_3 -Masse sind die O_3 -Signaturen bei $z_{\text{obs}} = 10 \text{ km}$ deutlich schwächer als bei $z_{\text{obs}} = 800 \text{ km}$. Die H_2O -Signaturen sind in beiden Fällen etwa gleich stark, da der Massenunterschied hier nur gering ist.

Flugzeugsondierung sind die O₃-Signaturen deutlich schwächer als im Satellitenfall. Die stärkeren Linien im Spektrum stammen im wesentlichen vom Molekül H₂O.

Vergleicht man die Sensitivität der beiden Spektren gegenüber troposphärischen O₃-Massenänderungen (in der Grenzschicht), so stellt man fest, daß die Strahlendichteänderung im Falle einer Flugzeugsondierung aufgrund einer größeren relativen Massenänderung $\Delta m_{O_3,GS}/m_{O_3,ges}$ stets größer ist als bei einer Satellitensonderung.

Die dargestellten Differenzspektren in Abb. 44 zeigen diesen Unterschied. Dabei wurde jeweils entsprechend Gleichung (4.10) die Differenz gebildet zwischen einem Spektrum unter Normalbedingungen und einem Spektrum mit erhöhtem O₃-Mischungsverhältnis in der Grenzschicht (siehe Kap. 4.2.3.3, vgl. Abb. 23 auf Seite 57). Die relative Massenänderung $\Delta m_{O_3,GS}/m_{O_3,ges}$ beträgt bei der Flugzeugsondierung etwa 80 %, während sich

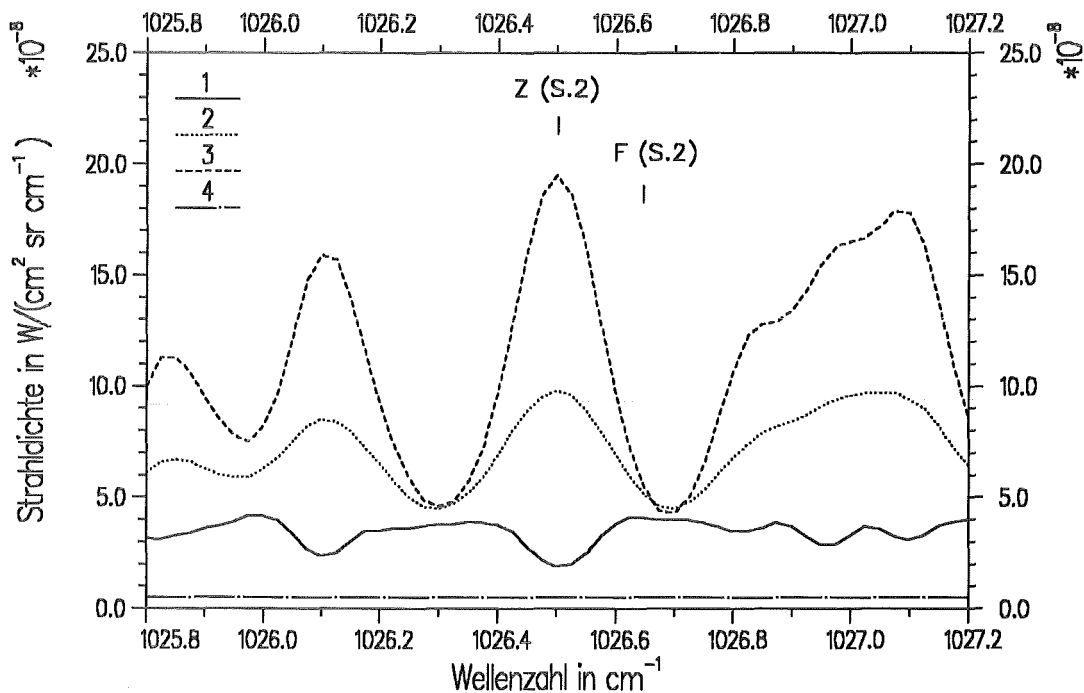


Abbildung 44. Differenzspektren im Bereich der O₃-Signatur bei $\nu = 1026.50 \text{ cm}^{-1}$.

Z = Signaturzentrum, F = Bereich im Flügel, $\Delta\nu = 0.1 \text{ cm}^{-1}$

Differenz: $\Delta L_{\Delta\nu} = L_{\Delta\nu}(m_{ges}, T, T_0) - L_{\Delta\nu}(m_{ges} + \Delta m_{O_3,GS}, T, T_0)$

1: $z_{obs} = 800 \text{ km}$ (Satellit)

2: $z_{obs} = 10 \text{ km}$ (Flugzeug)

3: $z_{obs} = 10 \text{ km}$ (Flugzeug) mit $\Delta L_{\Delta\nu} = L_{\Delta\nu}(m_{ges}, T, T_0) - L_{\Delta\nu}(m_{ges} + 0.2 m_{O_3,Trop}, T, T_0)$

4: NESR = $5.0 \cdot 10^{-9} \text{ W}/(\text{cm}^2 \text{ sr cm}^{-1})$

Die Strahlendichtedifferenz ist bei $z_{obs} = 10 \text{ km}$ aufgrund der stärkeren relativen Massenänderung wesentlich größer als bei $z_{obs} = 800 \text{ km}$. Außerdem ist zu bemerken, daß die Strahlendichteänderungen spektral unterschiedlich verlaufen.

S. 1 (Z)
S. 2 (Z)
S. 2 (F)
S. 3 (Z)
S. 4 (Z)

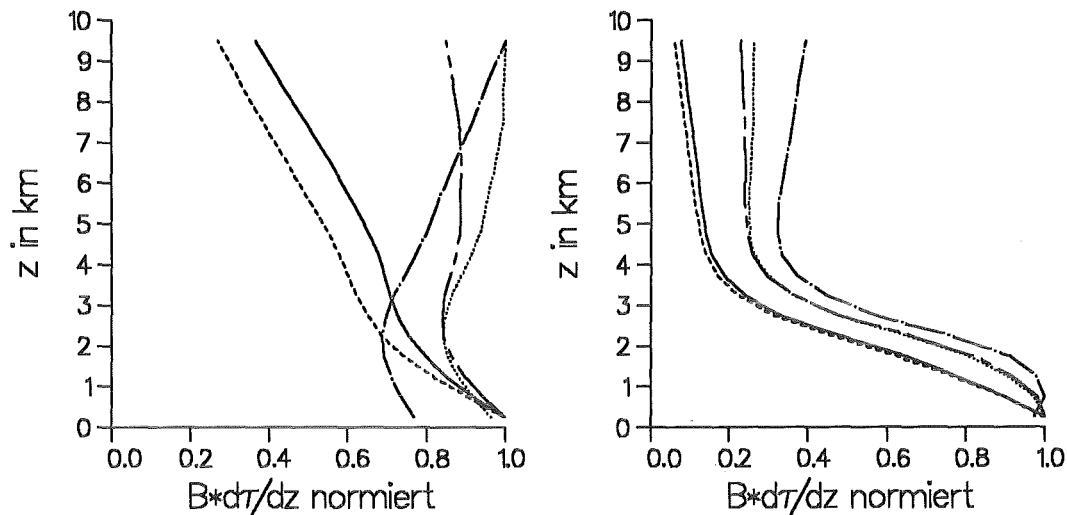


Abbildung 45. Beitragsfunktionen für O₃-Signaturen (Flugzeugsondierung). Dargestellt ist der zentrale Linienbereich (Z), außerdem eine Stelle im Flügel (F) der Signatur 2 mit $\Delta\nu = 0.1 \text{ cm}^{-1}$. Bei den Berechnungen wurden O₃-Profile (Sommer, mittlere Breiten) mit durchschnittlichen (links) bzw. erhöhten Ozonwerten in der Grenzschicht (rechts) zugrundegelegt.

die Masse bei der Satellitensondierung lediglich um ca. 8 % ändert. In Abb. 44 wird am Beispiel der Signatur 2 außerdem deutlich, daß im Flugzeugfall (Kurve 2) stets die Linienzentren die massensensitivsten Stellen im Spektrum sind, während im Satellitenfall (Kurve 1) die Zentren stärkerer Signaturen nur wenig sensitiv sind gegenüber Massenänderungen in der Troposphäre. Kurve 3 zeigt für den Flugzeugfall, daß die Signaturen auf eine Änderung der troposphärischen Gesamtmasse spektral ähnlich reagieren wie bei einer Änderung der Masse in der Grenzschicht. Daher ist es in der Praxis ohne Vorkenntnisse über das Gasprofil sehr schwierig zu unterscheiden, um welche Art der Massenänderung es sich handelt. Eine höhere spektrale Auflösung ($\Delta\nu = 0.05 \text{ cm}^{-1}$) ändert an dieser Aussage nichts wesentliches. Tabelle 15 auf Seite 90 zeigt Zahlenwerte der ausgewählten Signaturen für die Flugzeugsondierung. Diese können mit den Werten der Satellitensondierung in Tabelle 7 auf Seite 59 verglichen werden. Aufgrund der durch eine größere relative Gesamtmassenänderung verursachten stärkeren Strahldichteänderungen im Spektrum bei der Flugzeugsondierung, ist das Signal-zu-Rausch-Verhältnis $\Delta L_{\Delta\nu,1}/\text{NESR}$ deutlich größer als bei der Satellitensondierung. Bei einer mit Ozon stark angereicherten Grenzschicht stammt der größte Beitrag zum Strahldichtesig-

nal aus diesem unteren Troposphärenbereich (siehe Abb. 45, rechts). Bei einer mittlere Bedingungen repräsentierenden Atmosphäre tragen insbesondere in den Zentren stärkerer Signaturen sämtliche Troposphärenschichten ungefähr gleich viel zum Signal bei (siehe S. 2 (Z), S. 3 (Z) und S. 4 (Z) in Abb. 45, links). Eine gewisse Höhenauflösung ist aber bei der Betrachtung unterschiedlich starker Stützstellen möglich (vgl. z.B. S. 1 (Z) mit S. 2 (Z) bzw. S. 2 (F) mit S. 2 (Z) in Abb. 45, links).

Signatur (cm^{-1})	$L_{\Delta v}$	$\Delta L_{\Delta v,1}$ $\Delta m_{\text{O}_3, \text{GS}}$ erhöht	$\frac{\Delta L_{\Delta v,1}}{\text{NESR}}$	$\Delta L_{\Delta v,2}$ T-Profil: Bias = 0.5 K	$\Delta L_{\Delta v,3}$ T-Profil: Bias = 0.5 K T_0 : Bias = 1.0 K	$\frac{\Delta L_{\Delta v,1}}{\Delta L_{\Delta v,2}}$	$\frac{\Delta L_{\Delta v,1}}{\Delta L_{\Delta v,3}}$
1: 997.02 (Z)	0.8509	0.0030 (0.4)	6.0	0.0015 (0.2)	0.0127 (1.5)	2.0	0.2
2: 1026.50 (Z) 1026.63 (F)	0.7028 0.7825	0.0098 (1.4) 0.0059 (0.8)	19.6 11.8	0.0027 (0.4) 0.0018 (0.2)	0.0110 (1.6) 0.0126 (1.6)	3.6 3.3	0.9 0.5
3: 1054.95 (Z) 1055.13 (F)	0.5870 0.7000	0.0127 (2.2) 0.0099 (1.4)	25.4 19.8	0.0034 (0.6) 0.0024 (0.3)	0.0091 (1.6) 0.0111 (1.6)	3.7 4.1	1.4 0.9
4: 1059.40 (Z) 1059.55 (F)	0.6482 0.7157	0.0112 (1.7) 0.0082 (1.1)	22.4 16.4	0.0025 (0.4) 0.0020 (0.3)	0.0099 (1.5) 0.0113 (1.6)	4.5 4.1	1.1 0.7
$L_{\Delta v}$, $\Delta L_{\Delta v}$ in $10^{-5} \text{ W}/(\text{cm}^2 \text{ sr cm}^{-1})$, bzw. in Klammern: $\Delta L_{\Delta v}/L_{\Delta v}$ in %, NESR = $5.0 \cdot 10^{-9} \text{ W}/(\text{cm}^2 \text{ sr cm}^{-1})$							

Tabelle 15. Flugzeug-Nadirsondierung von O_3 in der Grenzschicht. Massen- und Temperatursensitivität ausgewählter Signaturen im Zentrum (Z) sowie an einer Stelle im Flügel (F), $\Delta v = 0.1 \text{ cm}^{-1}$. Das O_3 -Mischungsverhältnis wurde in Bodennähe von 32 auf 160 ppbv erhöht.

Betrachtet man schließlich die Temperatursensitivität, so ist festzustellen, daß der Einfluß der Bodentemperatur bei der Sondierung aus 10 km Höhe aufgrund der schwächeren Signaturen etwas größer ist als im anderen Fall (siehe Tabelle 15). Das ändert aber nichts an der Aussage, daß insgesamt gesehen eine Sondierung vom Flugzeug aus wesentlich besser dazu geeignet ist, troposphärische Konzentrationen von Gasen mit Konzentrationsmaxima in der Stratosphäre abzuleiten, als dies mit einer Sondierung vom Satelliten aus möglich ist. Im übrigen kann der Troposphärengehalt sämtlicher vom Satelliten aus meßbarer Quellgase (H_2O , CH_4 , N_2O , CO , CCl_2F_2) mit guter Genauigkeit (5 – 20 %) von hochfliegenden Flugzeugen aus gemessen werden. Der große Vorteil von globalen Messungen mit hoher zeitlicher Überdeckungsrate geht dabei allerdings verloren.

5.2.2 Aufwärtssondierung

Eine speziell beim Flugzeug anwendbare Meßmethode ist die Aufwärtssondierung mit Blickwinkel schräg nach oben ($90^\circ < \Theta \leq 180^\circ$) aus verschiedenen Flugniveaus. Dabei kann die Masse eines bestimmten Gases entlang des optischen Weges oberhalb der Flughöhe bestimmt werden. Durch Differenzbildung ist es anschließend möglich, die Masse des Gases in den Schichten zwischen den entsprechenden Flugniveaus zu bestimmen. Entsprechend Abb. 46 gilt für die Masse m_g des Gases g entlang des optischen Weges in der Differenzschicht:

$$\Delta m_g = m_g(1) - m_g(2) \quad (5.1a)$$

mit $m_g(1)$ Masse des Gases g entlang des optischen Weges 1
 $m_g(2)$ Masse des Gases g entlang des optischen Weges 2

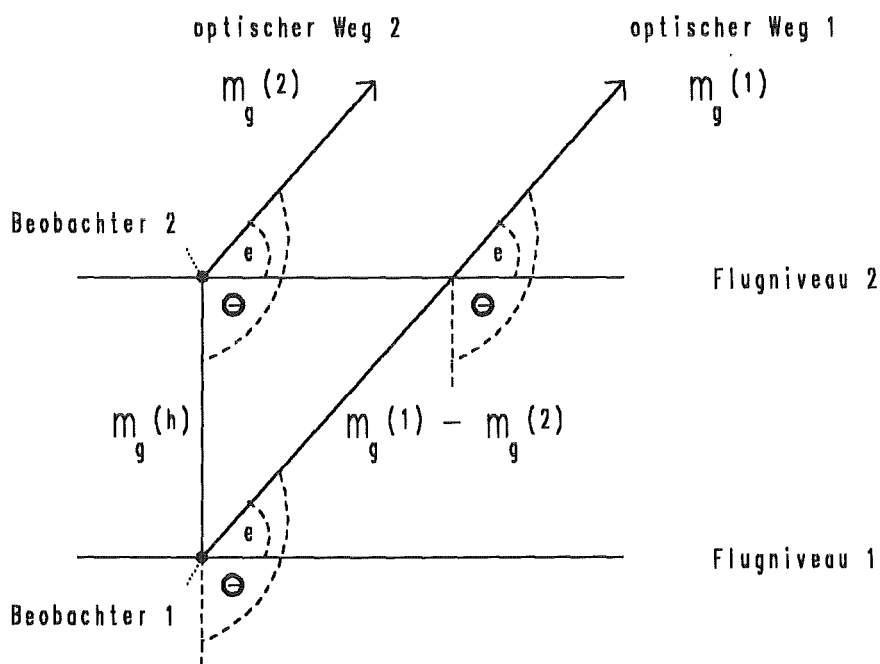


Abbildung 46. Geometrie der Aufwärtssondierung vom Flugzeug.

Θ = Nadirwinkel

e = Elevationswinkel

$m_g(h)$ = Masse des Gases g entlang des vertikalen Weges h (Schichthöhe)

$m_g(1)$ = Masse des Gases g entlang des Weges 1

$m_g(2)$ = Masse des Gases g entlang des Weges 2

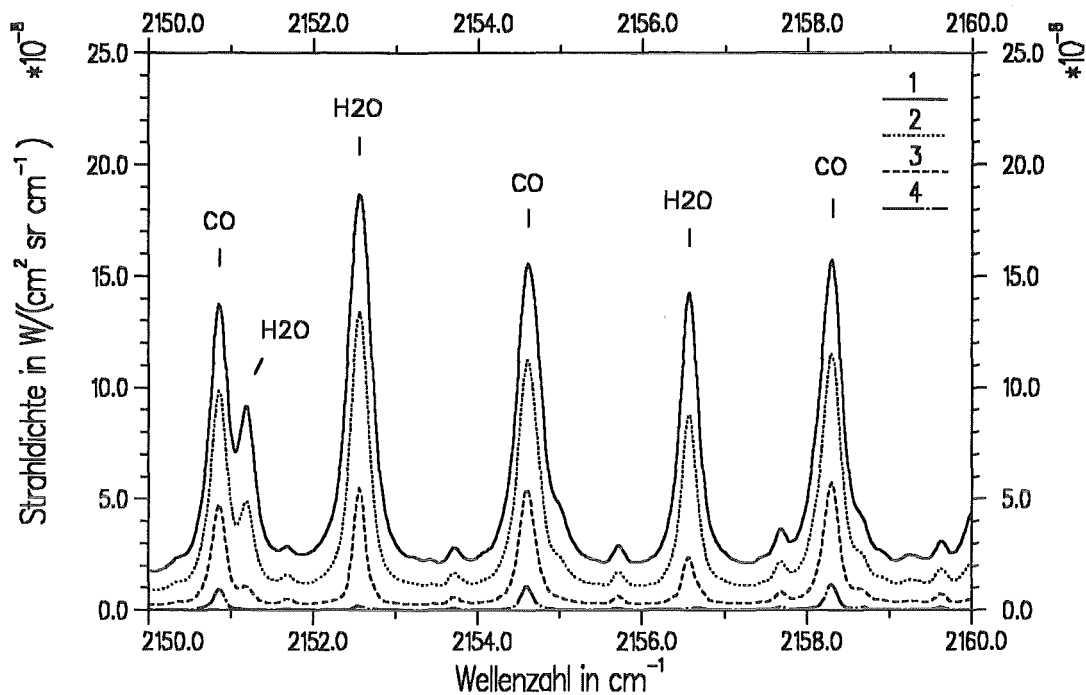


Abbildung 47. Spektren im Bereich der 4.6 μm CO-Bande, Elevation = 25°.

NESR = $10^{-9} \text{ W}/(\text{cm}^2 \text{ sr cm}^{-1})$, $\Delta\nu = 0.1 \text{ cm}^{-1}$

1: $z_{\text{obs}} = 1 \text{ km}$

2: $z_{\text{obs}} = 2 \text{ km}$

3: $z_{\text{obs}} = 4 \text{ km}$

4: $z_{\text{obs}} = 8 \text{ km}$

Die Unterschiede in den Spektren beruhen auf verschiedenen Temperaturen in den jeweiligen beobachternahen Schichten einerseits, sowie auf den unterschiedlichen Gesamtmassen entlang der jeweiligen optischen Wege andererseits.

bzw. entsprechend für die Gesamtmasse:

$$\Delta m_{\text{ges}} = m_{\text{ges}}(1) - m_{\text{ges}}(2) \quad (5.1b)$$

mit $m_{\text{ges}}(1)$ Gesamtmasse aller Gase entlang des optischen Weges 1

$m_{\text{ges}}(2)$ Gesamtmasse aller Gase entlang des optischen Weges 2

Das Volumenmischungsverhältnis $c_{v,g}$ des Gases g in der Differenzschicht berechnet sich damit zu:

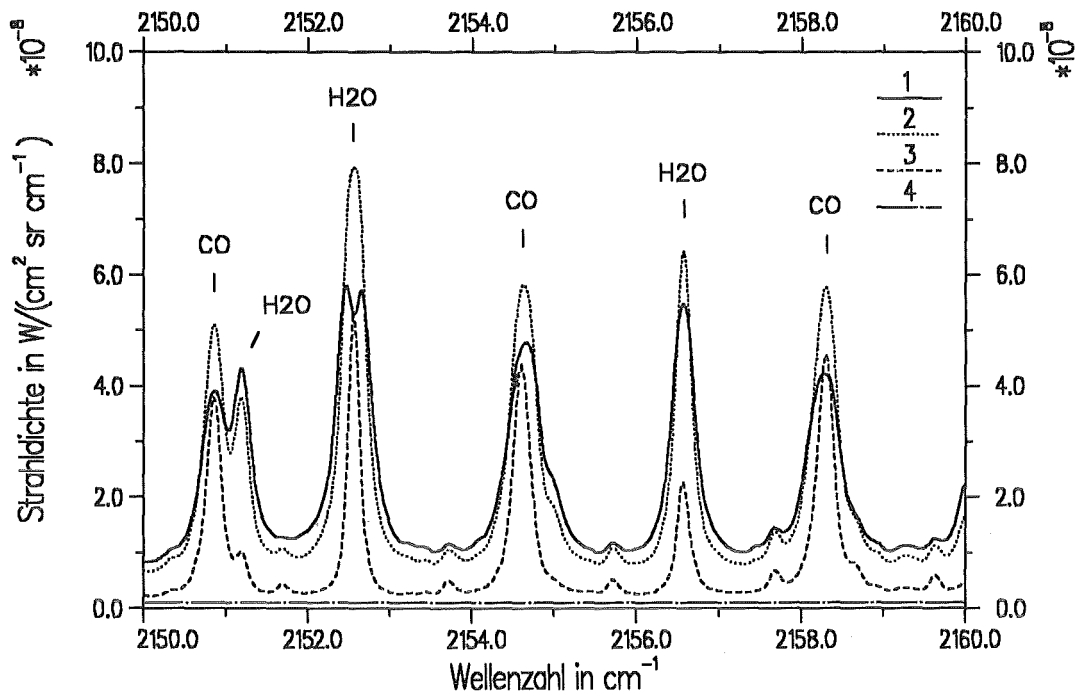


Abbildung 48. Differenzspektren zwischen verschiedenen Beobachterhöhen.

Elevation = 25°, $\Delta\nu = 0.1 \text{ cm}^{-1}$

1: $L_{\Delta\nu}(z_{\text{obs}} = 1\text{km}) - L_{\Delta\nu}(z_{\text{obs}} = 2\text{km})$

2: $L_{\Delta\nu}(z_{\text{obs}} = 2\text{km}) - L_{\Delta\nu}(z_{\text{obs}} = 4\text{km})$

3: $L_{\Delta\nu}(z_{\text{obs}} = 4\text{km}) - L_{\Delta\nu}(z_{\text{obs}} = 8\text{km})$

4: NESR = $10^{-9} \text{ W}/(\text{cm}^2 \text{ sr cm}^{-1})$

Die Strahlendichtedifferenzen sind um ein vielfaches größer als das spektrale Rauschen. Die kräftigen Massenänderungen der beteiligten Gase sind zu einem großen Teil dafür verantwortlich.

$$c_{v,g} = \frac{\Delta m_g}{\Delta m_{\text{ges}}} \frac{R_g}{R_{\text{ges}}} \quad (5.2)$$

mit R_g (spezielle) Gaskonstante des Gases g
 R_{ges} (spezielle) Gaskonstante der Luft

Bezogen auf eine vertikale Säule gilt für die Masse $m_g(h)$ des Gases g in einer dünnen Differenzschicht der Höhe h :

$$m_g(h) = (m_g(1) - m_g(2)) \cos(180^\circ - \Theta) \quad (5.3)$$

Dabei wurde die Refraktion des Sehstrahles vernachlässigt, was in der Troposphäre allerdings nur für große Nadirwinkel (Θ nahe 180°) zulässig ist. Für die Untersuchungen in dieser Studie spielt die Refraktion jedoch keine Rolle.

Abb. 47 auf Seite 92 zeigt simulierte Spektren im Bereich der $4.6 \mu\text{m}$ CO-Bande bei einem konstanten Elevationswinkel $e = \Theta - 90^\circ = 25^\circ$. Variiert wurde dabei die Beobachterhöhe. Die Spektren enthalten im wesentlichen Beiträge der Gase CO und H_2O . Die Spektren verändern sich mit der Beobachterhöhe aufgrund der unterschiedlichen Temperaturen in den jeweiligen beobachternahen Schichten einerseits und andererseits durch die verschiedenen Gasmassen entlang der unterschiedlich langen optischen Wege. Damit ist sofort klar, daß das Strahldichtesignal bei einer Beobachterhöhe in der warmen, massenreichen unteren Troposphäre am größten sein muß. Auffällig ist auch, daß die bei niedrigen Beobachterhöhen recht starken H_2O -Signaturen bei $z_{\text{obs}} = 8 \text{ km}$ nahezu völlig verschwinden (Kurve 4).

Bildet man die Differenz aus Spektren mit verschiedenen Beobachterhöhen, stellt man fest, daß die daraus resultierenden Strahldichteänderungen um ein vielfaches größer sind als das spektrale Rauschen (siehe Abb. 48 auf Seite 93). Die damit verbundenen kräftigen Massenänderungen der Gase CO und H_2O sind dafür zu einem großen Teil verantwortlich.

Elevationswinkel	$m_{\text{CO,ges}}(8)$	$m_{\text{CO,ges}}(4)$	$m_{\text{CO,ges}}(2)$	$m_{\text{CO,ges}}(1)$	$\frac{m(4) - m(8)}{m(8)}$	$\frac{m(2) - m(4)}{m(4)}$	$\frac{m(1) - m(2)}{m(2)}$
5°	$5.260 \cdot 10^{18}$	$1.219 \cdot 10^{19}$	$1.822 \cdot 10^{19}$	$2.228 \cdot 10^{19}$	132 %	50 %	22 %
10°	$2.779 \cdot 10^{18}$	$6.448 \cdot 10^{18}$	$9.654 \cdot 10^{18}$	$1.180 \cdot 10^{19}$			
25°	$1.164 \cdot 10^{18}$	$2.699 \cdot 10^{18}$	$4.038 \cdot 10^{18}$	$4.935 \cdot 10^{18}$			
90°	$4.933 \cdot 10^{17}$	$1.143 \cdot 10^{18}$	$1.712 \cdot 10^{18}$	$2.091 \cdot 10^{18}$			
$m(8) = m_{\text{CO,ges}}(8) = \text{CO-Säulendichte in Molekülen/cm}^2 \text{ für } z_{\text{obs}} = 8 \text{ km}$ $m(4) = m_{\text{CO,ges}}(4) = \text{CO-Säulendichte in Molekülen/cm}^2 \text{ für } z_{\text{obs}} = 4 \text{ km}$ $m(2) = m_{\text{CO,ges}}(2) = \text{CO-Säulendichte in Molekülen/cm}^2 \text{ für } z_{\text{obs}} = 2 \text{ km}$ $m(1) = m_{\text{CO,ges}}(1) = \text{CO-Säulendichte in Molekülen/cm}^2 \text{ für } z_{\text{obs}} = 1 \text{ km}$ Elevationswinkel $e = \Theta - 90^\circ$							

Tabelle 16. CO-Massen bei der Aufwärtssondierung. Angegeben sind CO-Säulendichten entlang schräger optischer Wege mit unterschiedlichen Elevationswinkeln und Beobachterhöhen, sowie die relative CO-Gesamtmassenänderung bei einer Änderung der Beobachterhöhe.

Gas	$\frac{m_g(4) - m_g(8)}{m_g(8)}$	$\frac{m_g(2) - m_g(4)}{m_g(4)}$	$\frac{m_g(1) - m_g(2)}{m_g(2)}$
H ₂ O	1500 %	200 %	62 %
CH ₄	81 %	31 %	14 %
N ₂ O	77 %	30 %	13 %
CCl ₂ F ₂	85 %	31 %	14 %

$m_g(z_{\text{obs}})$ = Säulendichte des Gases g in Molekülen/cm² entlang des optischen Weges bei einer bestimmten Beobachterhöhe in km

Tabelle 17. Relative Massenänderungen einiger troposphärischer Quellgase bei der Aufwärtssondierung. Die Änderungen sind praktisch unabhängig vom Blickwinkel.

In Tabelle 16 auf Seite 94 sind die CO-Säulendichten für unterschiedliche Beobachterhöhen und Blickwinkel zusammengestellt. Daneben ist auch die relative Gesamtmassenänderung bei einer Änderung der Beobachterhöhe angegeben. Diese ist für CO praktisch unabhängig vom Blickwinkel. Entlang eines optischen Weges mit $z_{\text{obs}} = 4$ km befinden sich mehr als doppelt soviel CO-Moleküle als bei $z_{\text{obs}} = 8$ km. Im Fall von H₂O sind es sogar ungefähr 16 mal soviel Moleküle. Selbst bei einer Änderung von $z_{\text{obs}} = 2$ km auf $z_{\text{obs}} = 1$ km beträgt die Gesamtmassenerhöhung noch 22 % (bei H₂O: 62 %). Die Zahlenwerte der Massenänderungen weiterer troposphärischer Quellgase (CH₄, N₂O, CCl₂F₂) liegen grob gesehen im Rahmen der Werte für CO (siehe Tabelle 17). Derartig deutliche Massenänderungen sind bei den üblichen Meßunsicherheiten der Temperatur (Bias = 0.5 K) gut meßbar, zumal Temperaturfehler im Prinzip nur in der Zwischenschicht eine Rolle spielen, da die Fehler in der darüberliegenden Atmosphäre durch die Differenzbildung der Spektren eliminiert werden. Die Temperatur in der Zwischenschicht läßt sich in der Praxis außerdem durch in situ Messungen vom Flugzeug aus bestimmen. Es sollte erwähnt werden, daß die obigen Betrachtungen durchgeführt wurden unter der Annahme einer über die Meßzeit konstanten Stratosphärenkonzentration der Gase. Diese Annahme ist zulässig, da sich zum einen die Stratosphärenmasse innerhalb der verhältnismäßig kurzen Meßzeit im allgemeinen nicht wesentlich ändert. Zum anderen haben stratosphärische Massenänderungen ohnehin nur einen sehr geringen Einfluß auf das Spektrum, da bei der Aufwärtssondierung der größte Beitrag zum Strahldichtesignal bei der Sondierung von Quellgasen immer aus den beobachter-nächsten Schichten stammt (vgl. Abb. 49 auf Seite 96).

Die Konzentration oben genannter troposphärischer Spurengase ist daher mit guter vertikaler Auflösung von bis zu etwa 1 km meßbar. Unter günstigen Meßbedingungen müß-

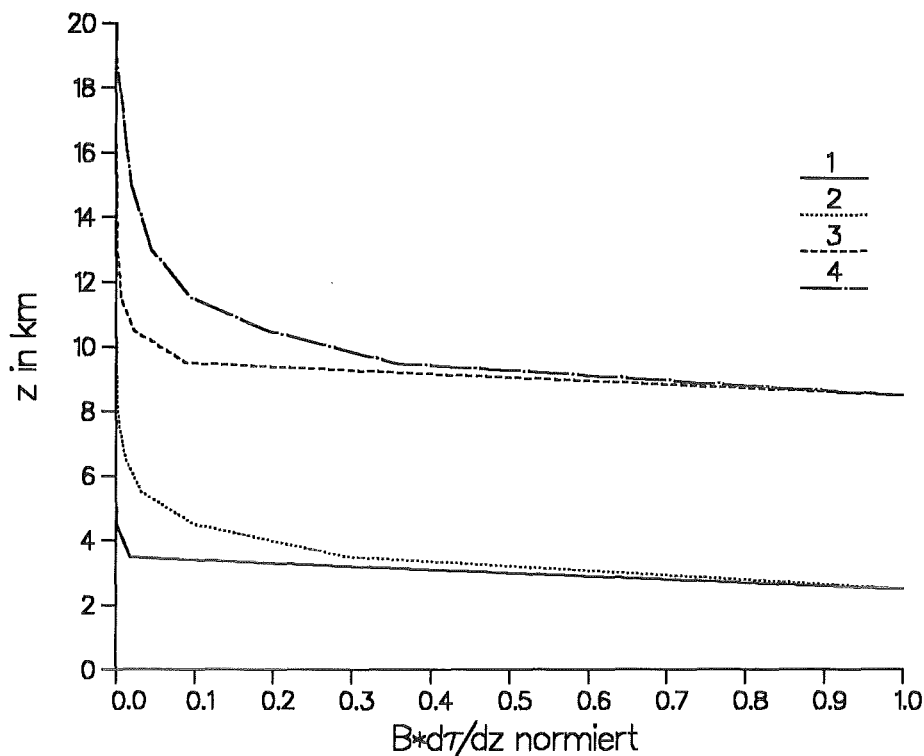


Abbildung 49. Beitragsfunktionen für die CO-Signatur bei $\nu = 2154.60 \text{ cm}^{-1}$. Dargestellt ist der zentrale Bereich der Signatur mit $\Delta\nu = 0.1 \text{ cm}^{-1}$.

- 1: $z_{\text{obs}} = 2 \text{ km}$, Elevation = 5°
- 2: $z_{\text{obs}} = 2 \text{ km}$, Elevation = 25°
- 3: $z_{\text{obs}} = 8 \text{ km}$, Elevation = 5°
- 4: $z_{\text{obs}} = 8 \text{ km}$, Elevation = 25°

Der maximale Beitrag zum Strahldichtesignal stammt aus den beobachternächsten Schichten. Die Funktionsverläufe sämtlicher CO-Signaturen sind qualitativ ähnlich.

te es daher möglich sein, den Übergangsbereich zwischen der planetaren Grenzschicht und der freien Troposphäre näherungsweise zu bestimmen.

Abb. 48 auf Seite 93 zeigt, daß die Strahldichteänderungen überwiegend im Linienzentrum am größten sind. Dies ist allerdings stark abhängig vom Sättigungsgrad der jeweiligen Linie, welcher sich mit der Beobachterhöhe und dem Blickwinkel ändert (vgl. dazu die H_2O -Signaturen bei 2151.18 und 2152.55 cm^{-1} in Abb. 48).

Wie sich das Spektrum in Abhängigkeit des Blickwinkels bei konstanter Beobachterhöhe ändert, ist in Abb. 50 auf Seite 97 dargestellt. Bei kleinen Elevationswinkeln ($e = 5^\circ$) ist neben den Zentren der Linien auch die Emission dazwischen verhältnismäßig stark, da die Gesamtmasse entlang des optischen Weges von den betrachteten Winkeln am größten ist. Bei den Winkeln $e = 10^\circ$ bzw. 25° ist die Strahldichtedifferenz zwischen den Zentren und dem Flügelbereich der Signaturen am größten, die Signaturen treten in

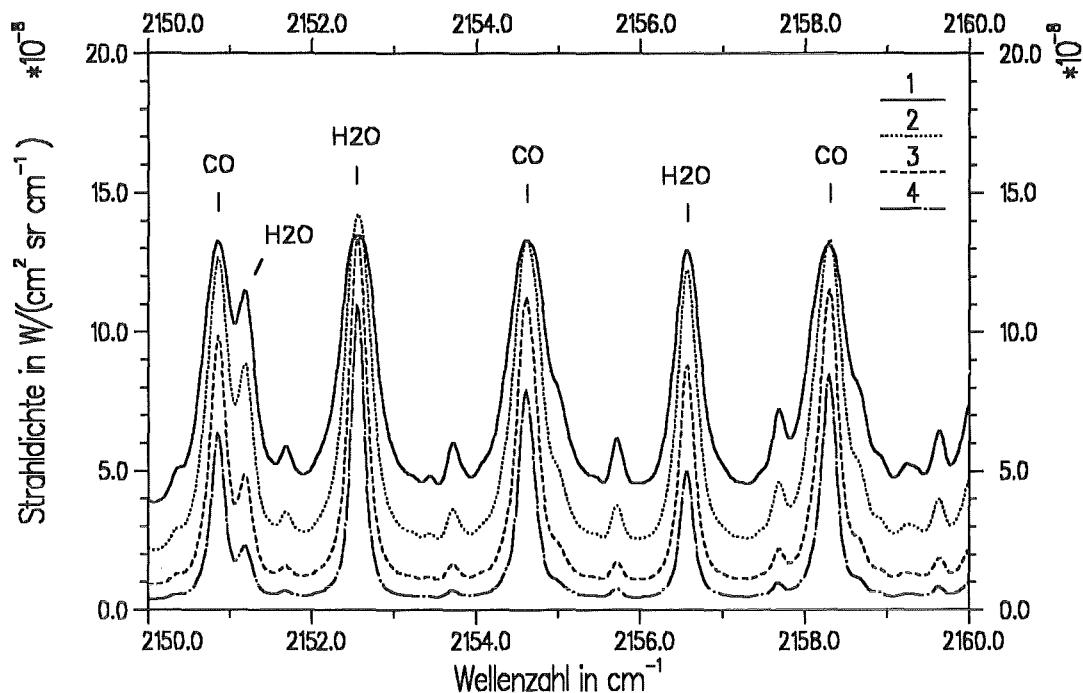


Abbildung 50. Spektren im Bereich der 4.6 μm CO-Bande, $z_{\text{obs}} = 2 \text{ km}$.

NESR = $10^{-9} \text{ W}/(\text{cm}^2 \text{ sr cm}^{-1})$, $\Delta\nu = 0.1 \text{ cm}^{-1}$

- 1: Elevation = 5°
- 2: Elevation = 10°
- 3: Elevation = 25°
- 4: Elevation = 90°

Das Spektrum ändert sich in Abhängigkeit des Blickwinkels aufgrund der unterschiedlichen Gesamtmasse entlang des jeweiligen optischen Weges.

diesen Fällen am deutlichsten aus dem Spektrum hervor. Daneben ist auffällig, daß die CO-Signatur bei 2150.85 cm^{-1} bei allzu schrägen Blickwinkeln stark von der benachbarten H_2O -Signatur mit Zentrum bei 2151.18 cm^{-1} gestört ist und bei der angenommenen spektralen Auflösung von $\Delta\nu = 0.1 \text{ cm}^{-1}$ nicht mehr deutlich separiert werden kann. Im Prinzip kann also mit der Wahl der freien Parameter z_{obs} , Δz_{obs} und e für jedes Gas eine individuelle optimale Meßstrategie entwickelt werden. Dies übersteigt jedoch den Rahmen dieser Studie.

Während die beschriebene differentielle Meßmethode zur Bestimmung der Spurengaskonzentrationen in den Schichten zwischen zwei Beobachterhöhen für troposphärische Quellgase gut anwendbar ist, gestaltet sich die Anwendung dieses Meßprinzips für Gase mit Konzentrationsmaxima in der Stratosphäre wesentlich schwieriger. Dies liegt daran, daß die relative Gesamtmassenänderung $\Delta m_g/m_g$ des gesuchten Gases g entlang des optischen Weges in diesem Fall erheblich kleiner ist. Unter der Annahme eines

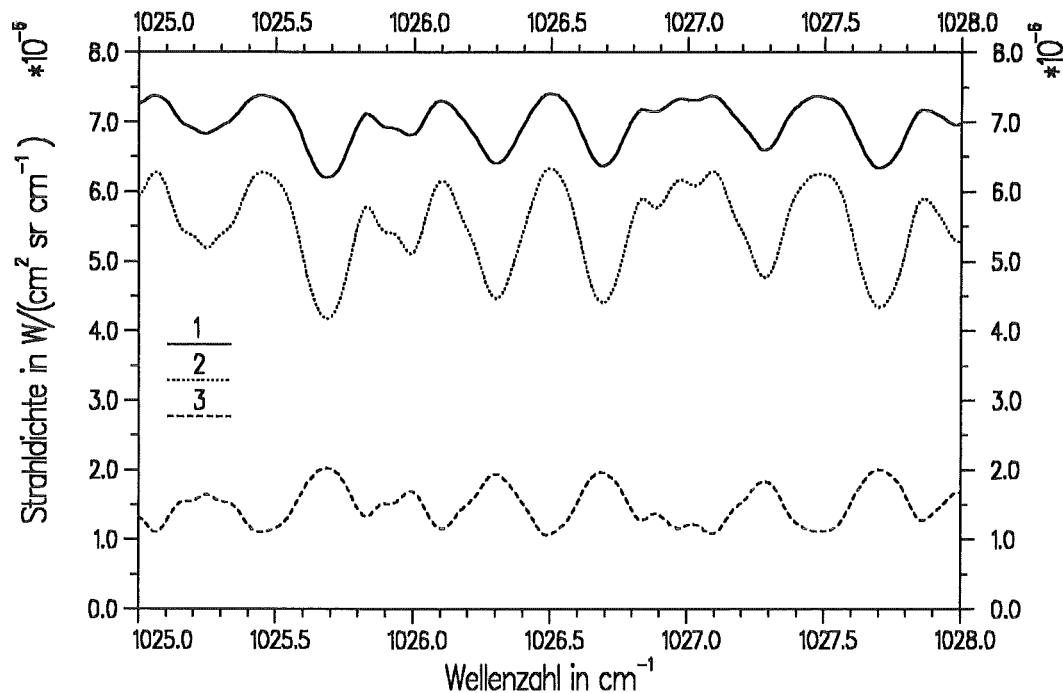


Abbildung 51. Spektren im Bereich der 9.6 μm O_3 -Bande, Elevation = 5 ° (bei erhöhter O_3 -Konzentration in der Grenzschicht).

NESR = $10^{-8} \text{ W}/(\text{cm}^2 \text{ sr cm}^{-1})$, $\Delta\nu = 0.05 \text{ cm}^{-1}$

1: $z_{\text{obs}} = 1 \text{ km}$

2: $z_{\text{obs}} = 2 \text{ km}$

3: Differenz 1 - 2

Die Spektren enthalten praktisch nur O_3 -Beiträge. Die Strahllichteänderung beruht im wesentlichen nur auf einer Änderung der Temperatur infolge unterschiedlicher Beobachterhöhen.

Ozonprofils mit erhöhten Ozonwerten in der Grenzschicht (siehe Abb. 23 auf Seite 57), ändert sich die O_3 -Masse beim Übergang von 2 auf 1 km Beobachterhöhe und einem Elevationswinkel von $e = 5^\circ$ um etwa 3.5 % (bei einer Standardatmosphäre nur um 0.5 %). Dementsprechend beruht die Strahllichteänderung, dargestellt in Abb. 51, zu einem großen Teil auf einer Änderung der Temperatur infolge unterschiedlicher Beobachterhöhen.

Diese auf Differenzen beruhende Meßmethode läßt sich daher im Fall von O_3 nur unter den günstigen Meßbedingungen einer hohen O_3 -Troposphärenkonzentration anwenden. In diesen günstigen Fällen kann die relative Massenänderung bei Differenzschichten von mehreren Kilometern Dicke bis ungefähr 10 % betragen. Bei $e < 5^\circ$ sind noch etwas größere Massendifferenzen erreichbar, jedoch enthalten die Spektren dann in der unteren Troposphäre aufgrund des langen optischen Weges durch dichte Schichten nur

noch wenig spektrale Strukturen. Das Beispiel hat aber gezeigt, daß es unter bestimmten atmosphärischen Bedingungen mit der beschriebenen Meßmethode möglich ist, troposphärische Verteilungen von Gasen mit einem Konzentrationsmaximum in der Stratosphäre zu bestimmen.

6. Schlußbemerkungen

Die vorliegende Studie hat gezeigt, daß die Fernerkundung einer Reihe von troposphärischen Spurengasen im infraroten Spektralbereich möglich ist.

Troposphärische Quellgase, die in höheren Konzentrationen vorkommen (z.B. H_2O , CH_4 , N_2O , CO) sind mittels einer Nadirsondierung sowohl vom Satelliten als auch vom Flugzeug aus mit guter Genauigkeit und guter horizontaler Auflösung meßbar. Dabei sind auch Aussagen über die vertikale Verteilung dieser Gase in der Troposphäre und zum Teil auch in der Stratosphäre (im Satellitenfall) möglich. Bei Gasen mit Konzentrationsmaxima in der Stratosphäre (z.B. O_3 , HNO_3) kann der Gesamtgehalt Troposphäre + Stratosphäre bestimmt werden. Bei Ozon können unter gewissen Bedingungen auch Rückschlüsse auf die bodennahe Verteilung dieses Gases gezogen werden (stark erhöhte O_3 -Konzentrationen in der Grenzschicht). Um den Einfluß der Stratosphäre auszublenden bietet sich die Nadirsondierung vom Flugzeug aus an. Umgekehrt kann mit der Wahl einer entsprechenden Horizontsondierungsgeometrie auch der Einfluß der Troposphäre ausgeblendet werden und damit die Stratosphärenkonzentration mit guter Genauigkeit und hoher vertikaler Auflösung bestimmt werden. Eine derartige Geometrie ist auch für die Bestimmung von Spurengasverteilungen im Bereich der oberen Troposphäre geeignet. Dabei kann im Vergleich zur Nadirsondierung eine größere Anzahl von Spurenstoffen bei besserer vertikaler Auflösung erfaßt werden. Eine weiter gesteigerte vertikale Auflösung erlaubt die differentielle Meßmethode zur Bestimmung der Gasmasse in der Schicht zwischen zwei verschiedenen Beobachterhöhen in der Troposphäre. Die Anzahl der dabei nachweisbaren Gase ist im wesentlichen begrenzt auf die stärker konzentrierten Quellgase.

Die Wahl der Sondierungsgeometrie ist also im Grunde eine Funktion der Meßaufgabe, d.h. insbesondere welches Gas unter welchen atmosphärischen Bedingungen in welchem Höhenbereich der Atmosphäre mit welcher räumlicher Auflösung bestimmt werden soll.

Eine Meßaufgabe für den Bereich der oberen Troposphäre bzw. unteren Stratosphäre stellt auch die Erfassung der erhöhten Spurengaskonzentrationen in Flugkorridoren dar. Die kontinuierliche Zunahme des Luftverkehrs führt dort zu einem verstärkten Anstieg der von den Flugzeugen emittierten Spurenstoffe. Nach bisherigen Erkenntnissen werden dabei in erster Linie Gase wie Kohlenmonoxid, Kohlendioxid, Wasserdampf, Stickstoffoxide, Schwefeldioxid und unverbrannte Kohlenwasserstoffe emittiert. Aufgrund der teilweise recht langen Verweilzeiten der Moleküle in diesen Höhen, sollten die resultierenden Gaskonzentrationen zum Teil deutlich über den vorhandenen Umgebungskonzentrationen liegen. Die durch diese Konzentrationsänderungen verursachten Strahldichteänderungen in den Infrarotspektren können bei einer geeigneten Meßgeometrie vom Flugzeug aus zumindest in einigen Fällen bestimmt werden. Bei der Auswahl der

Meßgeometrie ist darauf zu achten, daß der optische Weg möglichst lange durch den Flugkorridor verläuft, damit die relative Gesamtmassenänderung entlang des Weges gegenüber der Gesamtmasse bei einem Blick durch nicht kontaminierte Schichten möglichst groß ist. Eine erste Simulation am Beispiel von NO hat dabei gezeigt, daß eine NO-Konzentrationsverdoppelung im Flugkorridor nachweisbar ist. Um genaue Aussagen über die Möglichkeiten und Grenzen der Erfassung von erhöhten Spurengaskonzentrationen machen zu können, sind jedoch weitergehende, vertiefte Untersuchungen notwendig.

Insgesamt muß betont werden, daß die Aussagen dieser Studie abhängig sind von den getroffenen Annahmen. Die Nachweisbarkeit von Spurenstoffen ist neben der spektralen Auflösung auch in besonderem Maße abhängig von der erreichbaren NESR des Meßgeräts. Die angegebenen Meßgenauigkeiten der Gase können sich auch mit der Wahl der Atmosphärenmodelle deutlich ändern. Eine tropische Atmosphäre beispielsweise unterscheidet sich insbesondere im Wasserdampfgehalt und der Temperatur deutlich von der polaren Atmosphäre.

In polaren Gegenden treten im Winter auch Wolken in der Stratosphäre auf (PSC's¹⁶). Sie bestehen überwiegend aus Eisteilchen und besitzen daher ähnliche optische Eigenschaften wie Cirren. Der Einfluß von Cirren auf die Strahldichtespektren bei einer Satelliten-Nadirsondierung wurde untersucht. Während optisch dichte Wolken die Infrarotstrahlung vollständig absorbieren, lassen semitransparente Cirren Aussagen über die Zusammensetzung der dahinterliegenden Atmosphäre zu. Die Extinktion von Aerosolen ist bei der Nadirsondierung allgemein gering und wurde daher nicht explizit untersucht.

Abschließend ist festzuhalten, daß die Leistungsfähigkeit der Infrarotspektroskopie zur Fernerkundung troposphärischer Spurengase verglichen mit den Möglichkeiten in der Stratosphäre (siehe z.B. OELHAF und FISCHER 1983, ECHLE et al. 1992) aufgrund der meteorologischen und physikalischen Bedingungen der unteren Atmosphäre deutlich eingeschränkt sind.

¹⁶ Polar Stratospheric Clouds

7. Symbole und Abkürzungen

7.1 Liste der Symbole

Lateinische Symbole:

$B_{\Delta\nu}$	Planckfunktion im Intervall $\Delta\nu$
$C_{v,g}$	Volumenmischungsverhältnis des Gases g
$C_{v,CO}$	Volumenmischungsverhältnis des Gases CO
$C_{\Delta\nu}$	unkalibriertes Atmosphärenspektrum
$C_{\Delta\nu,k}$	unkalibriertes Spektrum eines kalten Schwarzkörpers
$C_{\Delta\nu,w}$	unkalibriertes Spektrum eines warmen Schwarzkörpers
e	Elevationswinkel
$E_{0,g}$	Energie des unteren Anregungszustands des Moleküls g
f	Profilfunktion
f_B	Beitragsfunktion
f_G	Gewichtsfunktion
f_s	Sensitivitätsfunktion
F_p	Tangentenfußpunkt
g	Kennziffer für ein bestimmtes Gas
G	Anzahl der Gase
h	Höhe
i	Zählindex
$L_{\Delta\nu}$	Strahldichte im Intervall $\Delta\nu$
$L_{\Delta\nu,i}$	Strahldichte im Intervall $\Delta\nu$ unter dem Nadirwinkel Θ_i
$L_{\Delta\nu,w}$	wahre Strahldichte im Intervall $\Delta\nu$
$L_{m,me}$	gemessene spektrale Strahldichte an der Stützstelle m
$L_{m,re}$	berechnete spektrale Strahldichte an der Stützstelle m
m	Zählindex oder Masse
m_g	Masse des Gases g
$m_{g,Trop}$	Masse des Gases g in der Troposphäre
m_{ges}	Gesamtmasse der Gase
$m_{CO,ges}$	CO-Gesamtmasse
$m_{N_2O,ges}$	N ₂ O-Gesamtmasse
$m_{O_3,ges}$	O ₃ -Gesamtmasse
$m_{O_3,Strat}$	O ₃ -Masse in der Stratosphäre
$m_{O_3,Trop}$	O ₃ -Masse in der Troposphäre
M	Anzahl der Stützstellen im Spektrum
n	Zählindex
N_g	Anzahl der Absorptionslinien des Moleküls g
p	Druck

P_i	anzupassende Parameter
Q	Summe der Abweichungsquadrate
Q_s	Qualität einer Signatur
R_g	(spezielle) Gaskonstante des Gases g
R_{ges}	(spezielle) Gaskonstante der Luft
S_g	Intensität der Linien des Moleküls g
T	Temperatur (in der Atmosphäre)
T_0	Hintergrundtemperatur
T_p	Tangentenpunkt
T_k	Temperatur eines kalten Schwarzkörpers
T_w	Temperatur eines warmen Schwarzkörpers
x	Wegkoordinate
x_0	Ort der Hintergrundquelle
x_{obs}	Ort des Beobachters
z	Höhenkoordinate
z_0	untere Begrenzung (Erdoberfläche)
z_{min}	Tangenten- oder Minimalhöhe
z_{obs}	obere Begrenzung (Beobachterhöhe)

Griechische Symbole:

α_g	Halbwertsbreite der Linien des Moleküls g
$\Delta L_{\Delta\nu}$	Strahldichtedifferenz im Intervall $\Delta\nu$
Δm_g	Fehler der Masse bzw. Massendifferenz des Gases g
Δm_{ges}	Differenz der Gesamtmasse
$\Delta m_{g,Trop}$	zusätzliche Masse des Gases g in der Troposphäre
$\Delta m_{CCl_2F_2,Trop}$	zusätzliche Masse des Gases CCl_2F_2 in der Troposphäre
$\Delta m_{CH_4,Trop}$	zusätzliche Masse des Gases CH_4 in der Troposphäre
$\Delta m_{CO,Trop}$	zusätzliche Masse des Gases CO in der Troposphäre
$\Delta m_{H_2O,Trop}$	zusätzliche Masse des Gases H_2O in der Troposphäre
$\Delta m_{N_2O,Trop}$	zusätzliche Masse des Gases N_2O in der Troposphäre
$\Delta m_{O_3,GS}$	zusätzliche Masse des Gases O_3 in der Grenzschicht
ΔT	Temperatur-Bias (= Differenz)
ΔT_0	Hintergrundtemperatur-Bias (= Differenz)
$\Delta\nu$	Wellenzahlintervall
$\Delta\sigma_{v,g}$	Fehler des monochromatischen Massenabsorptionskoeffizienten des Gases g
$\epsilon_{\Delta\nu}$	Emissionsvermögen der Hintergrundquelle im Intervall $\Delta\nu$
Θ	Nadirwinkel
λ	Wellenlänge

ν	Wellenzahl
$\nu_{0,g}$	Wellenzahl des Zentrums der Linien des Moleküls g
$\sigma_{\nu,g}$	monochromatischer Massenabsorptionskoeffizient des Gases g
σ_s	Standardabweichung
τ	monochromatische Transmission
$\tau_{\Delta\nu}$	Transmission im Intervall $\Delta\nu$
$\tau_{\Delta\nu}^{\rightarrow}$	Transmission im Intervall $\Delta\nu$ zwischen Beobachter und Tangentenhöhe
$\tau_{\Delta\nu}^{\leftarrow}$	Transmission im Intervall $\Delta\nu$ jenseits des Beobachters

7.2 Liste der Abkürzungen

AVHRR	Advanced Very High Resolution Radiometer
FASCOD2	Fast Atmospheric Signature Code 2
FCKW	Fluorchlorkohlenwasserstoff
HIS	High-Resolution Interferometer Sounder
HITRAN	High Transmission
IASI	Improved Atmospheric Sounding in the Infrared
IMG	Interferometric Monitor for Greenhouse Gases
ITRA	Intercomparison of Transmittance and Radiance Algorithms
LTE	Local Thermodynamic Equilibrium
MIPAS	Michelson Interferometer für Passive Atmosphärische Sondierung
NESR	Noise Equivalent Spectral Radiance, spektrales Rauschen
NOAA	National Oceanic and Atmospheric Administration
PSC	Polar Stratospheric Cloud, polare Stratosphärenwolke
RAT	Retrieval of Atmospheric Trace Gas Profiles
RMS	Root of Mean Squares, Wurzel aus der mittleren quadratischen Abweichung
SNR	Signal to Noise Ratio, Signal-zu-Rausch-Verhältnis
TES	Tropospheric Emission Spectrometer

8. Literatur

- ABBAS, M.M.; GUO, J.: Finite Field of View Effects on Inversion of Limb Thermal Emission Observations, *Journal of Geophysical Research*, Bd. 90, Nr. D2, 3903-3909 (1985)
- ADRIAN, G.: Infrarot-Absorption von atmosphärischem Wasserdampf - Probleme und Modellansätze, Kernforschungszentrum Karlsruhe, April 1990, KfK 4717 (1990)
- ADRIAN, G.P.; BLUMENSTOCK, T.; FISCHER, H.; GERHARDT, L.; GULDE, T.; OELHAF, H.; THOMAS, P.; TRIESCHMANN, O.: Column Amounts of Trace Gases Derived from Ground-Based Measurements with MIPAS during CHEOPS III, *Geophysical Research Letters*, Vol. 18, No. 4, 783-786 (1991)
- BEER, R.; GLAVICH, T.: Remote Sensing of the Troposphere by Infrared Emission Spectroscopy, *SPIE Vol. 1129*, 42-51 (1989)
- BOX, M.J.; MULLER, R.A.: Generation of Random Normal Derivatives, *Ann. Math. Stat.*, Bd. 29, 610-611 (1958)
- BROWN, L.R.; FARMER, C.B.; RINSLAND, C.P.; TOTH, R.A.: Molecular Line Parameters for the Atmospheric Trace Molecule Spectroscopy Experiment, *Applied Optics*, Bd. 26, Nr. 23, 5154-5182 (1987)
- BURCH, D.E.; GRYVNAK, D.A.: Continuum Absorption by H₂O Vapor in the Infrared and Millimeter Regions, in "Atmospheric Water Vapor", Hrsg.: A. Deepak, T.D. Wilkerson, L.H. Ruhnke, Academic Press, 48-76 (1980)
- CARLOTTI, M.: Global Fit Approach to the Analysis of Limb-Scanning Atmospheric Measurements, *Applied Optics*, Bd. 27, Nr. 15, 3250-3254 (1988)
- v. CLARMANN, T.: Untersuchungen zur Strahldichteberechnung mit Linie-für-Linie-Computerprogrammen, Diplomarbeit für Meteorologie, Universität München, Meteorologisches Institut (1986)
- v. CLARMANN, T.: Die Bestimmung von Mischungsverhältnissen stratosphärischer Spurengase aus Emissionsspektren im infraroten Spektralbereich, Dissertation, Kernforschungszentrum Karlsruhe, KfK 4698 (1990)
- CLOUGH, S.A.; KNEIZYS, F.X.; ROTHMAN, L.S.; GALLERY, W.O.: Atmospheric Spectral Transmittance and Radiance: FASCOD1B, *SPIE*, Bd. 277, Atmospheric Radiation, 152-166 (1981)

CLOUGH, S.A.; KNEIZYS, F.X.; SHETTLE, E.P.; ANDERSON, G.P.: Atmospheric Radiance and Transmittance: FASCOD2, Sixth Conference on Atmospheric Radiation, May 1986, Williamsburg Va. (1986)

ECHLE, G.; OELHAF, H.; WEGNER, A.: Measurement of Atmospheric Parameters with MIPAS, Final Report, ESTEC Contract 9597/91/NL/SF (1992)

FISCHER, H.: Generalized Iterative Methode for the Determination of Atmospheric Temperature Profiles, Beitr. Phys. Atmosph., Vol. 48, 301-326 (1975)

FISCHER, H.; FERGG, F.; OELHAF, H.; RABUS, D.; VÖLKER, W.: Simultaneous Detection of Trace Constituents in the Middle Atmosphere with a Small He-Cooled, High Resolution Michelson Interferometer (MIPAS), Beitr. Phys. Atmosph., Vol. 56, No. 2, 260-275 (1983)

FISCHER, H.; ANDERSON, G.P.; v. CLARMANN, T.; CLOUGH, S.A.; COFFEY, M.T.; GOLDMAN, A.; KNEIZYS, F.X.: Intercomparison of Transmittance and Radiance Algorithms (ITRA). Report of the Limb-Group of the ITRA-Workshop at the University of Maryland, March 12-14, 1986, KfK 4349 (1988)

FISCHER, H.; WETZEL, G.; OELHAF, H.: Remote Sensing of Tropospheric Trace Gases from Space, Proceedings of the International Radiation Symposium, Lille, France, 18-24 August 1988, A. DEEPAK Publishing, 507-510 (1989)

FISCHER, H.; OELHAF, H.; FERGG, F.; FRITZSCHE, C.; PIESCH, C.; RABUS, D.; SEEFELDER, M.; FRIEDL-VALLON, F.; VÖLKER, W.: Limb Emission Measurements with the Balloon Version of the Michelson Interferometer for Passive Atmospheric Sounding (MIPAS), Optical Remote Sensing of the Atmosphere, Technical Digest Series, Volume 4, Conference Edition, Incline Village, Nevada, February 12-15, 1990, 150-153 (1990)

FISCHER, H.: Remote Sensing of Atmospheric Trace Constituents Using Fourier Transform Spectroscopy, Ber. Bunsenges. Phys. Chem. 96, No. 3, VCH Verlagsgesellschaft mbH Weinheim, 306-314 (1992)

FISHMAN, J.; WATSON, C.E.; LARSON, J.C.; LOGAN, J.A.: Distribution of Tropospheric Ozone Determined from Satellite Data, Journal of Geophysical Research, Vol. 95, No. D4, 3599-3617 (1990)

FLAUD, J.-M.: Review of Spectroscopic Data for MIPAS, Final Report (15/09/92), ESA Contract No. AOP/OL/RB/309204 (1992)

GALLERY, W.O.; KNEIZYS, F.X.; CLOUGH, S.A.: Air Mass Computer Program for Atmospheric Transmittance/Radiance Calculations: FSCATM, Air Force Geophysics Laboratory, AFGL-TR-83-0065 (1983)

GOLDMAN, A.; SAUNDERS, R.S.: Analysis of Atmospheric Infrared Spectra for Altitude Distribution of Atmospheric Trace Constituents - I: Method of Analysis, J.Q.S.R.T., Bd. 21, Nr. 2, 155-162 (1979)

KNEIZYS F.X.; SHETTLE E.P.; GALLERY, W.O.; CHETWYND, J.H., Jr.; ABREU, L.W.; SELBY, J.E.A.; CLOUGH, S.A.; FENN, R.W.: Atmospheric Transmittance/Radiance: Computer Code LOWTRAN 6, AFGL-TR-83-0187, Environmental Research Papers, No. 846 (1983)

KRIEBEL, K.T.; KOEPKE, P.: Reflexion und Emission natürlicher Oberflächen, Deutscher Wetterdienst, Promet 2/3 (1985)

LINDEN, A.: Die Bestimmung von Tangentenhöhen aus Horizontsondierungsspektren im infraroten Spektralbereich, Diplomarbeit für Meteorologie, Universität Karlsruhe (TH), Kernforschungszentrum Karlsruhe (KfK) (1991)

MASSIE, S.T.; GOLDMAN, A.; McDANIEL, A.H.; CANTRELL, C.A.; DAVIDSON, J.A.; SHETTER, R.E.; CALVERT, J.G.: Temperature Dependent Infrared Cross Sections for CFC-11, CFC-12, CFC-13, CFC-14, CFC-22, CFC-113, CFC-114, and CFC-115, NCAR Technical Note, February 1991, NCAR/TN-358+STR (1991)

McKEE, T.B.; WHITMAN, R.I.; LAMBIOTTE, J.J., Jr.: A Technique to Infer Atmospheric Water-Vapor Mixing Ratio from Measured Horizon Radiance Profiles, NASA TN D-5252 (1969)

OELHAF, H.; FISCHER, H.: Measurements of Minor Constituents in the Middle Atmosphere from IR Limb Emission Spectra - A Feasibility Study, Applied Optics 22 (17), (1983)

OELHAF, H.; FISCHER, H.: Relevance of Upper Atmosphere non-LTE Effects to Limb Emission of Stratospheric Constituents, in IRS '88: Current Problems in Atmospheric Radiation, Proceedings of the International Radiation Symposium, Lille, France, 18-24 August 1988, Hrsg.: J. Lenoble, J.-F. Geleyn, A. DEEPAK Publishing, 460-463 (1989)

OELHAF, H.; v. CLARMANN, T.; FERGG, F.; FISCHER, H.; FRIEDL-VALLON, F.; FRITZSCHE, C.; PIESCH, C.; RABUS, D.; SEEFELDNER, M.; VÖLKER, W.: Remote Sensing of Trace Gases with a Balloon Borne Version of the Michelson Interferometer for Passive Atmospheric Sounding (MIPAS), Proceedings 10th ESA Symposium on European Rocket and Balloon Programmes and Related Research, Mandelieu-Cannes, France, 27-31 May 1991, ESA SP-317, 207-213 (1991)

OGAWA, T.; SHIMODA, H.; HAYASHI, M.; IMASU, R.; ONO, A.; NISHINOMIYA, S.; KOBAYASHI, H.: IMG, Interferometric Measurement of Greenhouse Gases from Space, CO-SPAR '92, A.2-S.3.04 (1992)

PFISTER, A.: Untersuchung der horizontalen und vertikalen Auflösung eines operationellen Inversionsverfahrens zur Bestimmung von mesoskaligen Temperaturfeldern aus Satellitendaten, Diplomarbeit für Meteorologie, Universität Karlsruhe (TH), Kernforschungszentrum Karlsruhe (KfK) (1988)

POSSELT, W.: private Mitteilung (1992)

REALE, A.L.; FLEMING, H.E.; WARK, D.Q.; NOVAK, C.S.; ZBAR, F.S.; NEILON, J.R.; GELMAN, M.E.; BLOOM, H.J.: Baseline Upper Air Network (BUAN) Final Report, NOAA Technical Report NESDIS 52 (1990)

REICHLE, H.G.; CONNORS, V.S.; HOLLAND, J.A.; HYPES, W.D.; WALLIO, H.A.; CASAS, J.C.; GORMSEN, B.B.; SAYLOR, M.S.; HESKETH, W.D.: Middle and Upper Tropospheric Carbon Monoxide Mixing Ratios as Measured by a Satellite-Borne Remote Sensor During November 1981, Journal of Geophysical Research, Vol. 91, No. D10, 10865-10887 (1986)

REVERCOMB, H.E.; BUIJS, H.; HOWELL, H.B.; LAPORTE, D.D.; SMITH, W.L.; SROMOVSKY, L.A.: Radiometric Calibration of IR Fourier Transform Spectrometers: Solution to a Problem with the High-Resolution Interferometer Sounder, Applied Optics, Vol. 27, No. 15, August 1988, 3210-3218 (1988)

REVERCOMB, H.E.; KNUTESON, R.O.; SMITH, W.L.; WOOLF, H.M.; HOWELL, H.B.: Spectroscopic Inferences from HIS Measurements of Atmospheric Thermal Emission, Optical Remote Sensing of the Atmosphere, 1990 Technical Digest Series, Volume 4, Conference Edition, Incline Village, Nevada, February 12-15, 1990, 590-593 (1990)

REUTTER, H.; OLESEN, F.-S.; FISCHER, H.: Distribution of the Temperature of Land Surfaces Determined from AVHRR Data, International Journal of Remote Sensing, to be published (1993)

ROTHMAN, L.S.; GAMACHE, R.R.; GOLDMAN, A.; BROWN, L.R.; TOTH, R.A.; PICKETT, H.M.; POYNTER, R.L.; FLAUD, J.-M.; CAMY-PEYRET, C.; BARBE, A.; HUSSON, N.; RINSLAND, C.P.; SMITH, M.A.H.: The HITRAN Database, 1986 Edition, Applied Optics, Bd. 26, Nr. 19, 4058-4097 (1987)

ROTHMAN, L.S.: private Mitteilung (1991)

RUSSEL, J.M.; DRAYSON, S.R.: The Inference of Atmospheric Ozone Using Satellite Horizon Measurements in the 1042 cm^{-1} Band, *Journal of Atmospheric Sciences*, Bd. 29, 376-390 (1972)

SCOTT, N.A.; HUSSON, N.; CHEDIN, A.; FLOBERT, J.F.; ROCHARD, B.; QUERE, J.: Comparisons Between Physically Retrieved Temperatures from NOAA-7 and NOAA-8 and Conventional Analyses or Radiosonde Data, *Second Conference on Satellite Meteorology/Remote Sensing and Applications*, May 13-16, 1986, Williamsburg, Va., published by the American Meteorological Society, Boston, Mass., 126-130 (1986)

SINGH, S.M.: Removal of Atmospheric Effects on a Pixel by Pixel Basis from Thermal Infrared Data from Instruments on Satellites. The Advanced Very High Resolution Radiometer (AVHRR), *International Journal of Remote Sensing*, Bd. 5, Nr. 1, 161-183 (1984)

SMITH, W.L.; MA, X.L.; ACKERMAN, S.A.; REVERCOMB, H.E.; KNUTESON, R.O.: Remote Sensing Cloud Properties from High-Spectral Resolution Infrared Observations, *Journal of Atmospheric Sciences*, to be published (1992)

WAHICHE, C.; SCOTT, N.A.; CHEDIN, A.: Cloud Detection and Cloud Parameters Retrieval from the Satellites of the TIROS-N series. *Annales Geophysicae*, 1986, 4, B, 2, 207-222 (1986)

WEGNER, A.: Der Einfluß des nichtinfinitesimalen Gesichtsfeldes auf die Auswertung von spektral hochaufgelösten Horizontsondierungsspektren, *Diplomarbeit für Meteorologie*, Universität Karlsruhe (TH), Kernforschungszentrum Karlsruhe (KfK) (1991)

WETZEL, G.: Fernerkundung von Spurengasen in der Troposphäre, *Diplomarbeit für Meteorologie*, Universität Karlsruhe (TH), Kernforschungszentrum Karlsruhe (KfK) (1988)

WMO: Atmospheric Ozone 1985, World Meteorological Organization, Global Ozone Research and Monitoring Project, Report Nr. 16, Vol. I-III (1985)

ZANDER, R.; RINSLAND, C.P.; FARMER, C.B.; NORTON, R.H.: Infrared Spectroscopic Measurements of Halogenated Source Gases in the Stratosphere with the ATMOS Instrument, *Journal of Geophysical Research*, Vol. 92, Nr. D8, August 1987, 9836-9850 (1987)

U.S. Standard Atmosphere 1976, NOAA-S/T76-1562 (1976)