# 3-D numerische Modellierung polarer mesosphärischer Eisschichten

Simulation und Analyse von PMC/NLC Strukturen im Vergleich mit Lidar/Satellitendaten

Dissertation

zur Erlangung des akademischen Grades doctor rerum naturalium (Dr. rer. nat.) der Mathematisch-Naturwissenschaftlichen Fakultät der Universität Rostock

> eingereicht von Frau M.Sc. Francie Schmidt aus Prenzlau

Datum der Einreichung: 18.02.2020

### Kurzfassung

Polare mesosphärische Wolken (PMC), auch nachtleuchtende Wolken (NLC) genannt, bestehen aus Eispartikeln, die in der extrem kalten Umgebung der polaren Sommermesopause auftreten. Die Quantifizierung der für die PMC-Bildung und -Variabilität verantwortlichen Mechanismen sind essentiell, um auf die Dynamik, langfristige Veränderungen und Zusammensetzung der Atmosphäre zu schließen. Diese Arbeit untersucht die Beziehungen zwischen PMCs, Temperatur und Wasserdampf in der nördlichen Hemisphäre mittels dem Eistransportmodell MIMAS (engl.: Mesospheric Ice Microphysics And transport model). Die Ergebnisse zeigen, dass die Eiswolken sehr empfindlich gegenüber ihren Umweltbedingungen sind. Störungen in Temperatur und Wasserdampf über den Tageszyklus hinweg sind dabei eine wichtige Quelle der PMC-Variabilität in Abhängigkeit von der Lokalzeit. Das verwendete Modell liefert detaillierte Informationen über Prozesse und Eigenschaften in saisonalen Zeiträumen. Um diese Prozesse zu verstehen und zu quantifizieren werden zwei Modellkonfigurationen von MIMAS mit detaillierter Mikrophysik verwendet, die eine Untersuchung der PMC-Empfindlichkeit gegenüber verschiedenen Hintergrundfeldern erlauben. Ziel ist es, die wichtigsten Modellierungsprozesse zu erfassen, mit denen sich beobachtete PMC-Strukturen möglichst realistisch wiedergeben lassen. Zur Validierung des Modells wurden AIM-Satellitendaten (engl.: Aeronomy of Ice in the Mesosphere) und PMC-Daten aus Lidarmessungen (engl.: light detection and ranging) in 69°N und 54°N herangezogen. Die Diskrepanzen zwischen Modell und Beobachtungen sind als Folge der unterrepräsentierten Wellen im Modell zu identifizieren, welche Eigenschaften mesosphärischer Eispartikel beeinflussen.

### Abstract

Polar mesospheric clouds (PMCs), also called noctilucent clouds (NLCs), consist of ice particles that occur in the extremely cold environment of the polar summer mesopause. Quantification of the mechanisms, that are responsible for PMC formation and variability, is essential to infer the dynamics, long-term changes and composition of the atmosphere. This paper examines the relationships between PMCs, temperature and water vapor in the northern hemisphere using an Mesospheric Ice Microphysics And tranSport model (MIMAS). The results show that the ice clouds are very sensitive to their environmental conditions. Temperature and water vapor disturbances over the daily cycle are an important source of PMC variability in dependency of local time. The model provides detailed information on processes and properties in seasonal periods. To understand and quantify these processes, two model configurations of MIMAS with detailed microphysics are used to study PMC sensitivity to different background fields. Furthermore, the sensitivity of the ice particle model is investigated. The aim is to detect the most important modeling processes, that can be reproduced the observed PMC structures as realistically as possible. For this purpose, AIM (Aeronomy of Ice in the Mesosphere) satellite data and PMC data from lidar (light detection and ranging) measurements in 69°N and 54°N were used for comparison. The discrepancies between model and observations are to be identified as a consequence of the under-represented waves in the model, which influence properties of mesospheric ice particles.

# Contents

1	Einleitung			1
	1.1	Motiva	tion	1
	1.2	Ziele d	er Arbeit	3
2 Die Mesosphäre in hohen Breiten			phäre in hohen Breiten	<b>5</b>
	2.1	Die the	ermische und dynamische Struktur der Meso-sphäre	6
		2.1.1	Überblick atmosphärischer Wellen	7
		2.1.2	Die mittlere mesosphärische Residual zirkulation $\hdots$	10
	2.2	Strahlı	ungsprozesse und Chemie der Mesosphäre	11
	2.3	Polare	Mesosphärische Wolken (PMCs)	13
		2.3.1	Die Nukleation auf mesosphärischen Eispartikeln $\ \ldots\ \ldots\ \ldots\ \ldots$	16
		2.3.2	Teilchenwachstum und Sublimation $\ldots \ldots \ldots \ldots \ldots \ldots \ldots$	19
2.4 Zusammenfassung		menfassung	21	
3	Das	Lagra	ngesche Eistransportmodell MIMAS	22
	3.1 MIMAS Eingangsparameter und Modelldomäne		S Eingangsparameter und Modelldomäne	23
		3.1.1	Zirkulationsmodell LIMA	23
		3.1.2	Wasserdampfquelle und solare Aktivität	25
	3.2 Mikrophysikalische und chemische Prozesse		bhysikalische und chemische Prozesse	26
		3.2.1	Meteorstaubteilchen	26
		3.2.2	Wasserdampf in der PMC-Saison	27
		3.2.3	Nukleation, Wachstum und Transport	28
	3.3	MIMA	S Modellausgabe	31
	3.4	4 Zusammenfassung		32
4	Mo	dellsim	ulationen von Atmosphären- und Eisparametern	33
	4.1	Atmos	phärische Hintergrundfelder	33
		4.1.1	Mittlere atmosphärische Hintergrundbedingungen	33
		4.1.2	Auswirkung verschiedener Modellkonfigurationen	35
		4.1.3	Validierung von Temperatur und Wasserdampf	40
	4.2	Modell	ierung von PMC-Strukturen	43
		4.2.1	Mittlerer Zustand von Eisschichten	44

		4.2.2 IWC zweier Modellkonfigurationen	47				
	4.3	Zusammenfassung	49				
<b>5</b>	PMC-Abhängigkeit von der Lokalzeit 5						
	5.1 Harmonische Analyse der täglichen Variationen						
	5.2	Variationen der atmosphärischen Hintergrundtemperatur mit der Lokalzeit	52				
	5.3	Variationen des Wasserdampfs und der Sättigung mit der Lokalzeit	55				
	5.4	Eisparameter in Abhängigkeit von der Lokalzeit	58				
	5.5	Breiten- und Grenzwertabhängigkeit der Lokalzeitvariationen	60				
	5.6	Langfristige IWC-Variationen in Abhängigkeit von der Lokalzeit	65				
	5.7	Zusammenfassung	66				
6	Vergleich von PMC-Parametern mit Beobachtungsdaten						
	6.1	Vergleich mit Lidardaten	67				
		6.1.1 Vergleich mit ALOMAR Lidardaten (69°N)	68				
		6.1.2 Vergleich mit Lidardaten aus Kühlungsborn (54°N) $\ldots \ldots \ldots$	72				
	6.2	Vergleich mit AIM-Satellitendaten	78				
		6.2.1 CIPS	78				
		6.2.2 SOFIE	83				
		6.2.3 IWC-Variabilität im Vergleich mit CIPS und SOFIE	88				
	6.3	Zusammenfassung	90				
7	Subskalige Variabilitäten der PMC-Parameter						
	7.1	Monte Carlo-Simulation	91				
	7.2	Zusammenfassung	96				
8	Zusammenfassung und Ausblick						
	8.1	Zusammenfassung	97				
	8.2	Ausblick	99				
$\mathbf{A}$	LIN	IA/MIMAS Modelländerungen	101				
в	$\mathbf{PM}$	C-Abhängigkeit von der Lokalzeit in LIH5	103				
С	Sate	ellitenmessungen von PMCs	105				
D	• PMC Parameter im Vergleich mit Satellitendaten						
Re	Referenzen 120						

Eidesstattliche Erklärung

# Liste der Akronyme

AIM	Aeronomy of Ice in the Mesosphere		
ALOMAR	Arctic Lidar Observatory for Middle Atmosphere Research		
CARMA	Community Aerosol and Radiation Model for Atmospheres		
CDE	Cosmic Dust Explorer		
CIPS	Cloud Imaging and Particle Size		
ECMWF	European Centre for Medium-Range Weather Forecasts		
FOV	Field Of View		
GW	Gravity Waves		
HALOE	Halogen Occultation Experiment		
IWC	Ice Water Content		
IWD	Ice Water Density		
KMCM	Kühlungsborn Mechanistic general Circulation Modell		
LASP	Laboratory for Atmospheric and Space Physics		
Lidar	Light detection and ranging		
LIMA	Leibniz-Institute Middle Atmosphere model		
LT	Lokalzeit		
MIMAS	Mesospheric Ice Microphysics And tranSport model		
MISI	MIcrowave Spectrometer at IAP		
MLS	Microwave Limb Sounder		
MSP	Meteor Smoke Particle		
NASA	National Aeronautics and Space Administration		
NLC	NoctiLucent Clouds		
NOGAPS	Navy Operational Global Atmospheric Prediction System		
PMC	Polar Mesospheric Clouds		
PMSE	Polar Mesospheric Summer Echos		
RMR-Lidar	Rayleigh-Mie-Raman-Lidar		
SABER	Sounding of the Atmosphere using Broadband Emission Radiometry		
SBUV	Solar Backscatter Ultraviolet Radiometer		
SOFIE	Solar Occultation For Ice Experiment		
SZA	solarer Zenitwinkel		
WMO	World Meteorological Organization		

# Chapter 1

# Einleitung

### 1.1 Motivation

Was sind polare mesosphärische Wolken?

Polare mesosphärische Wolken (engl.: polar mesospheric clouds, PMCs) oder auch leuchtende Nachtwolken (engl.: noctilucent clouds, NLCs), sind Eiswolken, die aus etwa 50 nm großen Wassereiskristallen bestehen. In dieser Arbeit wird fortan die Bezeichnung PMC verwendet. Ihre Entstehung wird durch Temperatur und Feuchte gesteuert. PMCs treten in einer Höhe von etwa 83 km und polwärts ab etwa 50° geografischer Breite auf. Sie kommen in beiden Hemisphären nur im Sommer vor. Die Eiswolken sind in mittleren Breiten auch vom Erdboden kurz nach Sonnenuntergang mit bloßem Auge sichtbar und erscheinen bläulich-weiß schimmernd (sieh Abb. 1.1). Der Beobachter befindet sich bereits im Dunkeln, während die Eiswolken noch von der Sonne angeleuchtet werden.



Figure 1.1: Parkentin 21. Juni 2019, 23:23 Uhr

Warum kommen sie nur in höheren Breitengraden und nur im Sommer vor?

Die Mesosphäre ist durch einen abnehmenden Temperaturgradienten charakterisiert. Die kälteste Region der gesamten Erdatmosphäre, die Mesopause in mittleren und polaren Breiten im Sommer, ist bei ~87 km Höhe mit Temperaturen von etwa 130 K gekennzeichnet (z.B. Lübken, 1999). Trotz der sehr geringen Mengen an Wasserdampf in diesem Höhenbereich mit nur einigen Teilchen pro Millionen Luftmolekülen (ppmv, engl.: parts per million per volume) kann bei den sehr tiefen Temperaturen und dem vorherrschenden niedrigen Druck eine Übersättigung auftreten. Dadurch entstehen Bereiche potentieller Eisbildung, die sich aufgrund der höheren Temperaturen in den niederen Breitengraden nicht ausbilden.

#### Warum sind polare mesosphärische Wolken von Interesse?

Die Erdatmosphäre unterliegt komplexen dynamischen und chemischen Wechselwirkungen ihrer verschiedenen Schichten. Die Mesosphäre ist dabei einer der am wenigsten verstandenen Bereiche der Erdatmosphäre. PMCs helfen, die Prozesse in der Mesosphäre besser zu verstehen und sind somit von hohem wissenschaftlichen Interesse. Die Eispartikel stehen in Wechselwirkung mit ihrer Umgebung und werden als Tracer für thermische und dynamische Änderungen in der Erdatmosphäre genutzt. PMCs reagieren sensitiv auf Temperatur und Luftfeuchtigkeit in der Atmosphäre. Die Temperatur wiederum wird durch Kohlendioxid  $(CO_2)$  und die Feuchte durch Methan  $(CH_4)$  beeinflusst. Die Konzentrationen beider Gase nehmen aufgrund menschlicher Aktivitäten zu (z.B. Masson-Delmotte et al., 2018). Dabei hat eine Konzentrationszunahme des Kohlendioxids eine Erwärmung in der Troposphäre (Treibhauseffekt) und eine Abkühlung in der Mesosphäre, in der sich die PMCs befinden, zur Folge. Eine Zunahme der Methankonzentration führt zu einer Erhöhung des Wasserdampfs in der Stratosphäre. Aufgrund von Kopplung zwischen den Höhenschichten und der um mehrere Größenordnungen niedrigeren Massendichte in der Mesosphäre reagieren die Eiswolken empfindlich auf Änderungen in den unteren Schichten. Die Ausbreitung und Dissipation von Schwerewellen bilden dabei den wichtigsten Kopplungsmechanismus. Somit sind PMCs mögliche sichtbare Indikatoren für globale Änderungen in der Mesosphäre und werden im Englischen auch oft als "The Miner's canary of global change" bezeichnet (z.B. von Zahn, 2003; Thomas, 1996a). Das Hauptziel bei der Untersuchung der PMCs ist es zu klären, warum und wie PMCs entstehen und warum sie auf zeitlicher und räumlicher Skala variieren. Dabei gilt es, den Zusammenhang zwischen den Wolken und der Meteorologie der polaren Mesosphäre zu erforschen. Dieses Wissen bildet dann die Grundlage für die Untersuchung langfristiger Variabilität des mesosphärischen Klimas und deren Einordnung in den globalen Klimawandel (z.B. Lübken et al., 2018; Thomas, 2003).

Wie werden polare mesosphärische Wolken gemessen?

In situ Messungen, also Messungen, die im direkten Kontakt mit den PMCs stehen, gibt es nur sehr wenige. Diese können beispielsweise mit Höhenforschungsraketen durchgeführt werden, wobei die Flüge nur kurz und selten sind. Ballone und Flugzeuge können nicht hoch genug fliegen. Zu den Fernerkundungsmethoden gehören die visuelle Erfassung durch einen Beobachter oder durch Kameras sowie Messungen mit Lidar-, Radar- und Satellitengeräten. Die Messungen waren aufgrund von Einschränkungen bei der Beobachtung von PMCs und deren Umfeld lange eine Herausforderung. Durch den deutlichen Anstieg der Anzahl an satelliten- und bodengestützten Messungen hat sich das Verständnis der Mesosphäre bedeutend verbessert (z.B. *Baumgarten et al.*, 2012; *DeLand et al.*, 2006; *Russell et al.*, 2009). Dennoch sind viele Mechanismen wie beispielsweise Nukleationsprozesse und Parameter wie Anzahldichte und Größenverteilung sowie die Variabilität der Eispartikel noch wenig bekannt.

### 1.2 Ziele der Arbeit

Diese Arbeit zielt auf die realitätsnahe Darstellung polarer mesosphärischer Wolken der Nordhalbkugel und auf die Untersuchung der physikalischen Prozesse, die zur Bildung und Variabilität der PMCs führen, ab. Das Eistransportmodell MIMAS (engl.: Mesospheric Ice Microphysics And tranSport model) ist ein eigenständiges Eismodell, welches auf spezifische Probleme und Forschungsfragen der polaren mesosphärischen Wolken angewendet wird und dabei verschiedene Hintergrundfelder assimiliert. MIMAS hat den Vorteil, die zeitliche und räumliche Gesamtheit der potentiellen Eisbildungs- und Eisentwicklungsregion zu betrachten. In Kombination mit Beobachtungen können die Modellierungen helfen, die Erdatmosphäre besser zu verstehen.

In dieser Arbeit wurden MIMAS-Modellsimulationen der Jahre 1979–2018 verwendet, mit deren Ergebnissen der allgemeine Zustand der PMCs beschrieben wird. Ebenfalls werden die allgemeinen Hintergrundbedingungen für eine Eisbildung in der Mesosphäre im Sommer charakterisiert. Eine wichtige und offene Frage ist die Auswirkung verschiedener Hintergrundparameter auf PMC-Strukturen. Diese Felder, wie z.B. atmosphärische Hintergrundwinde, Temperaturen, Luftdrücke und -dichten werden für die Initialisierung des Eistransportmodell MIMAS verwendet und können entweder durch Beobachtungen oder durch Modelldaten bereitgestellt werden. In dieser Arbeit wird MIMAS mit der Modellausgabe eines allgemeinen globalen Zirkulationsmodells (GCM, engl.:General Circulation Models), dem Leibniz-Institute Middle Atmosphere model (LIMA) gekoppelt. Der realitätsnahe Zustand der unteren Atmosphärenschichten wird durch Reanalysedaten repräsentiert, welche in LIMA eingebunden werden. Reanalysen sind die Ergebnisse von Modellberechnungen aus der Vergangenheit unter Einbezug aller zur Verfügung stehenden Beobachtungen. MIMAS erlaubt eine kontinuierliche Simulation über einen Zeitraum von mehreren Monaten und kann somit die gesamte PMC-Saison abdecken. Die Studie befasst sich mit zwei verschiedenen Modellläufen mit unterschiedlichen Eingabedaten, die für mehrere Saisons ausgewertet werden.

Ein weiterer Bereich betrifft die natürliche Variabilität von PMCs, wie zum Beispiel die Variation während eines Tages. Die Charakterisierung und Quantifizierung der tageszeitlichen Abhängigkeit der PMCs ist Bestandteil der Arbeit. Außerdem erfolgt ein Vergleich mit Beobachtungsdaten boden- und satellitengestützter Instrumente, der Auskunft über die Replizierbarkeit polarer mesosphärischer Wolken mit dem Modell MIMAS liefert und zu Verbesserungen der Modellphysik beiträgt. Durch die Verifizierung und Validierung des Modells ist eine Annäherung an das reale System möglich. Daraus ergibt sich die entscheidende Frage, welche Parameter bzw. physikalischen Prozesse für die PMC-Bildung mit realistischen Eigenschaften von Relevanz sind. Mit dem Eistransportmodell MIMAS wird eine Annäherung an die Realität verfolgt. Es kann aber nie eine völlig wahre Darstellung des realen Systems erfolgen, das viel zu komplex ist, um es in seiner Gesamtheit zu replizieren. Das Modell kann demnach keine perfekten Ergebnisse liefern, jedoch wichtige Einblicke in wahrscheinliche Szenarien geben.

Die Ziele sind hier noch einmal zusammengefasst:

#### Hauptziele

- Simulation von PMC-Strukturen mit MIMAS von 1979 bis 2018
- Analyse des Einflusses verschiedener Reanalysedatensätze auf die PMC-Modellierung
- Quantifizierung der natürlichen Variabilität von PMCs im Modell, wie die Variation in Abhängigkeit von der Tageszeit
- Vergleich von PMC-Variationen und -Strukturen mit Beobachtungen (Lidar, Satelliten) und physikalische Interpretation bei Abweichungen
- Formulierung neuer mikrophysikalischer Ansätze, die essentiell für die Modellentwicklung sind und mit denen eine Annäherung an die Realität erreicht wird

#### Sekundäre Ziele:

- Validierung der Hintergrundfelder mit Beobachtungsdatensätzen
- Aufbereitung und Analyse der PMC-Daten aus Lidarmessungen bei 69°N und 54°N
- Akquisation von PMC-Satellitendaten und allgemeiner Überblick über PMC-Satellitenmessungen

# Chapter 2

# Die Mesosphäre in hohen Breiten

Die Mesosphäre spielt eine bedeutende Rolle bei der Untersuchung klimarelevanter Fragestellungen. Genaue Kenntnisse über die thermische und dynamische Struktur der Mesosphäre helfen, Prozesse in dieser Region und Kopplungsmechanismen zwischen den einzelnen Atmosphärenschichten besser zu verstehen. Neben der Stratosphäre ist die Mesosphäre ein Bereich mit den größten Klimaänderungen in der Atmosphäre. Diese Region ist somit nicht nur wichtig für klimatische Änderungen vor Ort, sondern gilt ebenfalls aufgrund von Kopplungsmechanismen als Indikator für Klimaänderungen in den unteren Atmosphärenschichten. Die global gemittelte beobachtete Erwärmung, die aus kombinierten Land- und Meeresoberflächentemperaturdaten ermittelt wird, zeigt eine Erhöhung von 0.87 K im Zeitraum 2006 bis 2015 (Masson-Delmotte et al., 2018). Die geschätzte globale Erwärmung nimmt nach dem IPCC-Bericht von 2018 (engl.: Intergovernmental Panel on Climate Change) derzeit aufgrund von vergangenen und aktuellen anthropogenen Treibhausgasemissionen pro Jahrzehnt um 0,2 K zu. In der Mesosphäre besitzen die Temperaturveränderungen im Gegensatz zur Erdoberfläche ein negatives Vorzeichen. Dies bedeutet eine Abkühlung in der Mesosphäre, welche mit 2–4 K pro Jahrzehnt (z.B. Berger und Lübken, 2015) um ein Vielfaches stärker sind als die Temperaturveränderungen am Boden.

In diesem Kapitel erfolgt die Beschreibung der Mesosphäre hinsichtlich der grundlegenden chemischen und dynamischen Eigenschaften. Zunächst wird auf den Aufbau der Erdatmosphäre eingegangen und die Mesosphäre bezüglich ihrer Lage und Klimatologie eingeordnet. Dem schließt sich eine Beschreibung der verschiedenen Wellentypen der Atmosphäre an. Im Unterkapitel 2.2 sind die wichtigsten chemischen Bestandteile und die Strahlungsprozesse der Mesosphäre zusammengefasst, die notwendige Bedingungen für die Eisbildung in der polaren Mesosphärenregion im Sommer sind. Anschließend werden die physikalischen Grundlagen der PMC im Abschnitt 2.3 beschrieben. Der Schwerpunkt dieses Überblicks liegt auf der Beschreibung der Umgebung und den mittleren Eigenschaften polarer mesosphärischer Eisschichten.

# 2.1 Die thermische und dynamische Struktur der Mesosphäre

Die Atmosphäre ist bis zu einer Höhe von etwa 120 km hinsichtlich der Luftbestandteile durch Turbulenzen und großräumige Vertikalbewegungen im Allgemeinen gut durchmischt. Dieser Bereich wird Homosphäre genannt. In größeren Höhen finden molekulare Diffusionsvorgänge statt, die mit zunehmender freier Weglänge stärker werden. Dies führt in einer Höhe über 120 km zu einer Entmischung der atmosphärischen Gase, dem Bereich der Heterosphäre. Die Homosphäre ist im physikalischen Sinne dennoch nicht einheitlich. Infolge von Temperatur-, Druck- und dadurch auch Dichteunterschieden mit zunehmender Höhe bilden sich verschiedene Atmosphärenschichten mit jeweils ähnlichen Gegebenheiten aus. Zudem nimmt der Wasserdampfgehalt stark mit der Höhe ab und auch das Ozon sowie weitere Spurengase haben eine höhenabhängige Konzentration. Die einzelnen Schichten und der allgemeine Temperaturverlauf mit der Höhe sind in Abbildung 2.1 zu sehen. Die unterste Atmosphärenschicht ist die Troposphäre, die durch einen abnehmenden Temperaturgradienten gekennzeichnet ist und in der alle wichtigen Vorgänge ablaufen, die das Wetter beeinflussen. Daran schließt sich die Stratosphäre an, welche durch die Absorption der solaren Strahlung in der stratosphärischen Ozonschicht einen umgekehrten Temperaturgradienten zur Troposphäre hat. Die Mesosphäre befindet sich über der Stratosphäre und wird oberhalb durch die Thermosphäre begrenzt. Der Bereich der Temperaturumkehr wird jeweils Pause genannt und grenzt die einzelnen Atmosphärenschichten von einander ab. Das Suffix wird dabei der unteren der beiden angrenzenden Schichten zugeordnet. Die Höhe der Pausen und die Temperaturen variieren unter anderem mit der geografischen Breite und der Jahreszeit. Der Fokus dieser Arbeit liegt auf der polaren Mesosphäre, welche sich breiten- und saisonabhängig auf eine Höhe von etwa 50 bis 85 km erstreckt. Die mittlere Temperatur- und Windstruktur in der Mesosphäre ist das Ergebnis von solarer Einstrahlung, chemischen Prozessen und vor allem auch der mittleren großräumigen Residualzirkulation. Im Allgemeinen ist die Mesosphäre durch eine Temperaturabnahme mit zunehmender Höhe charakterisiert. Die kältesten Temperaturen der Erdatmosphäre sind am oberen Rand der Mesosphäre, der sogenannten Mesopause, zu finden. Die Mesosphäre stellt für die darüber liegende Thermosphäre durch Absorption von kurzwelliger solarer Strahlung und der damit verbundenen Erwärmungsrate eine Wärmesenke dar (z.B. Bauer et al., 2001).

Die Dynamik der Mesosphäre wird durch die großskalige atmosphärische Residualzirkulation bestimmt. Sie wird durch propagierende Wellen aus der Troposphäre, die sich horizontal und vertikal in der Atmosphäre ausbreiten, angetrieben. Somit sind die verschiedenen Schichten der Atmosphäre miteinander gekoppelt und unterliegen auch einer wechselseitigen Beeinflussung. Das Brechen der Wellen in Bereich der polaren Mesosphäre führt zu geringeren Temperaturen im Sommer gegenüber denen im Winter. In den weiteren Abschnitten wird zunächst auf atmosphärische Wellen eingegangen und anschließend die mittlere mesosphärische Residualzirkulation beschrieben.



Figure 2.1: Allgemeine vertikale Temperatur- und Windstruktur der Atmosphäre für den Sommer (rot) und Winter (schwarz) polarer/mittlerer Breiten. Außerdem sind Messmethoden, atmosphärische Wellen und höhenspezifische Effekte wie Ozonschicht, Meteore und NLC/PMC dargestellt. Zur Verfügung gestellt von Gunter Stober (Stand: 2019).

#### 2.1.1 Überblick atmosphärischer Wellen

Verschiedene Arten von Wellen in der Atmosphäre beeinflussen die Mesosphäre. Wellen transportieren Energie aus der Troposphäre und Stratosphäre nach oben in die Mesosphäre und treiben den größten Teil der globalen Zirkulation an. Atmosphärische Wellen sind periodische Störungen atmosphärischer Variablen. Aufgrund einer äußeren Krafteinwirkung werden die Partikel aus ihrem Gleichgewicht gebracht, wodurch eine zeitliche und räumliche Schwankung hervorgerufen werden kann. Es gibt verschiedene Möglichkeiten atmosphärische Wellen nach physikalischen und geometrischen Aspekten zu kategorisieren. Eine mögliche Einteilung der Wellen ist die nach der rücktreibenden Kraft. Die Schwerkraft  $(m\vec{g})$  bildet die Rückstellkraft für Schwerewellen, wohingegen die breitenabhängige Corioliskraft  $(-2m(\vec{\Omega} \times \vec{v}))$  die Rückstellkraft für planetare Wellen (Rossby-Wellen) und die Druckgradientkraft  $(\frac{m}{\rho}\nabla p)$  diejenige Kraft für Schallwellen ist. Zusammen mit der Reibungskraft  $(\vec{F}_R)$  gehen diese drei Kräfte in die einfache Bewegungsgleichung ein:

$$m \cdot \frac{d\vec{v}}{dt} = \frac{m}{\rho} \nabla p - 2m\vec{\Omega} \times \vec{v} + m\vec{g} + \vec{F}_R$$
(2.1)

Auf der linken Seite steht die Beschleunigung des Teilchens, die sich aus der Ableitung der Geschwindigkeit  $\vec{v}$  nach der Zeit t ergibt, mit der Masse m. Auf der rechten Seite sind alle auf das Teilchen einwirkenden Kräfte aufsummiert. Die eingehende Coriolisbeschleunigung berücksichtigt den Winkelgeschwindigkeitsvektor der Erde  $\vec{\Omega}$  und die körpereigene Geschwindigkeit im rotierenden Bezugssystem  $\vec{v}$ . Die Druckgradientbeschleunigung lässt sich aus der Dichte  $\rho$  und dem Druckfeld p berechnen.

Wellen sind auf verschiedenen zeitlichen Skalen vorzufinden. Die Variabilität von PMCs ist ebenfalls auf unterschiedlichen Skalen beobachtbar, welche zeitlich gesehen in vier Klassen eingeteilt und den äquivalenten Skalen für Wellen zugeordnet werden können (*Merkel et al.*, 2008).

- 1. Variabilität in weniger als 24 Stunden, welches Gezeiten- und Schwerewellen umfasst;
- 2. auf Skalen einiger Tage wie beispielsweise planetare Wellen;
- 3. auf monatlichen bis jährlichen Skalen;
- 4. auf multidekaden Skalen, die den 11-Jahres-Zyklus (hervorgerufen durch periodische Schwankungen der Strahlungsintensität der Sonne) sowie längerfristige globale Variationen einschließen

Planetare Wellen haben nicht nur eine große Zeitskala, sondern sind auch auf großen Längenskalen bis zu mehreren 1.000 km vorzufinden. Dadurch beeinflussen sie großskalige atmosphärische Prozesse wie interhemisphärische Kopplungen, die auch in PMC-Vaiabilitäten beobachtet werden (z.B. *Karlsson et al.*, 2007).

Thermischen Gezeiten sind ebenfalls atmosphärische Wellen, die durch Absorption von solarer Strahlung durch Wasserdampf und Ozon entstehen und in der Mesosphäre eine wichtige Rolle einnehmen. Schallwellen hingegen sind für die Mesosphärenregion nicht von Bedeutung (*Holton et al.*, 1995). Im Folgenden werden Schwerewellen und thermische Gezeiten, die für die Dynamik und die Thermik der polaren Mesosphäre sehr entscheidend sind und Einfluss auf PMCs nehmen, vorgestellt.

#### Schwerewellen

Die kleinskalige Dynamik der Schwerewellen kann PMCs beeinflussen und zum Beispiel das Wachstum, aber auch die Sublimation fördern. Dieser Effekt ist auf verhältnismäßig starke Temperaturschwankungen von  $\pm 10$  K zurückzuführen (z.B. *Rapp et al.*, 2002; *Lübken et al.*, 2014; *Kaifler et al.*, 2015). PMCs ermöglichen somit auf eine relativ neue Art und Weise, die kleinskalige Dynamik in der Mesosphäre zu untersuchen.

Schwerewellen sind periodische Schwankungen von Temperatur, Dichte, Druck und Wind und gehören zu den transversalen Wellen. Sie haben Skalen von wenigen bis tausend Kilometern. Schwerewellen entstehen durch primäre Quellen wie zum Beispiel aufgrund von Konvektion, atmosphärischer Instabilität geostrophischer Ausgleichsbewegungen wie Jets und Wetterfronten in der Troposphäre und der unteren Stratosphäre oder bei der Überströmung von topographischen Erhebungen (z.B. *Fritts und Alexander*, 2003; *Fritts et al.*, 2018). *Fritts und Alexander* (2003) geben auch sekundäre Quellen an wie Interaktionen zwischen Wellen, die nichtlineare Dynamik der Dissipation von Wellen und Kelvin-Helmholtz-Instabilitäten.

Die mit zunehmender Höhe geringere Luftdichte führt zur Vergrößerung der Amplituden der sich ausbreitenden Wellen, bis es je nach wellenspezifischen Eigenschaften in den unterschiedlichen Atmosphärenschichten zur Dissipation der Wellen und zur Energieübertragung kommt. Größere Schwerewellen dissipieren und resultieren in kleineren Instabilitäten und Turbulenz. Damit spielen sie eine wesentliche Rolle beim Transport von Energie von den unteren Atmosphärenschichten bis zur Mesosphäre.

Lidarsondierungen der mittleren Atmosphäre sind ideal geeignet, um Schwerewellen mit hoher vertikaler und zeitlicher Auflösung zu analysieren (z.B. *Baumgarten und Fritts*, 2014; *Fritts et al.*, 2018). So haben zum Beispiel *Kaifler et al.* (2013) den Zusammenhang von Schwerewellen und PMCs untersucht. Sie haben gezeigt, dass Schwerewellen den Beginn der PMC-Saison verzögern können. Durch den Einfluss auf die Temperatur führen Schwerewellen auch dazu, dass eine Eiswolke auf einer Skala von wenigen Stunden erscheint, verblasst und wieder auftaucht. *Rusch et al.* (2017) konnte nachweisen, dass die kleinskalige Variabilität der Sättigungsbedingungen, die durch Schwerellen verursacht wird, ausreicht, um Eispartikel in Breitengraden bis zu  $85^{\circ}$  zu zerstören.

Messungen des Impulsflusses von *Fritts et al.* (2014a) mit einer sogenannten Luftleucht-Kamera (engl.: Airglow Imager) zeigen eine erhöhte Schwerewellenaktivität für kurzperiodische Schwerewellen von  $\sim 3$  h gegenüber Wellen mit längeren Perioden. Die kurzperiodischen Schwerewellen haben nach *Fritts et al.* (2014a) einen größeren Einfluss in der Mesosphärenregion. Die dabei beobachteten Kelvin-Helmholtz-Instabilitäten in der Hydroxyl-Schicht bei  $\sim 87$  km und 59°N, wurden durch numerische Simulationen quantifiziert (*Fritts et al.*, 2014b). Das Hydroxyl emittiert nachts ein schwaches Licht, dessen Intensität durch Schwerewellen moduliert wird. Die fotografischen Aufnahmen erlauben durch die Veränderungen des emittierten Lichts die Berechnung von horizontalen Wellenlängen und Perioden der Schwerewellen.

Ebenfalls zeigen erste Ergebnisse des Polar Mesospheric Cloud Turbulence Experiments (PMC Turbo) signifikante Variabilitäten in PMCs durch das Auftreten von Schwerewellen (*Fritts et al.*, 2019). Die Mission zielt darauf ab, hochauflösende und hochfrequente Beobachtungen von PMCs unter Verwendung eines stratosphärischen Ballons zu erhalten. Die wissenschaftliche Nutzlast des PMC Turbo umfasst sieben hochauflösende Kameras und ein Rayleigh-Lidar. Nach *Fritts et al.* (2019) war das gesamte Sichtfeld mehrfach von nahezu kontinuierlichen Schwerewellen und Instabilitäten auf horizontalen Skalen von  $\sim 2-100 \,\mathrm{km}$  geprägt.

#### Thermische Gezeiten

Thermische Gezeiten sind periodische globale Schwingungen, die durch die Absorption der Sonneneinstrahlung über den Tag hervorgerufen werden. Am häufigsten treten 24-, 12sowie 8-stündige Schwingungen auf. Die ganztägige Gezeit wird überwiegend infolge von Absorption von Sonnenstrahlung in den nahen Infrarotbändern durch den troposphärischen Wasserdampf angeregt, während das Ozon in der Stratosphäre die solare ultraviolette Strahlung absorbiert und vor allem die halbtägige Gezeitenkomponente erzeugt. Im Allgemeinen breiten sich diese Wellen mit exponentiellem Amplitudenwachstum von unten nach oben aus und sind auch im Bereich der sommerlichen Mesopausenhöhe in hohen Breiten vorhanden. Sie transportieren Energie und Impuls über große Skalen und sind daher ein wichtiger Bestandteil der dynamischen Kopplung einzelner Atmosphärenschichten. Gezeiten äußern sich in persistenten Amplitudenvariationen von beispielsweise Hintergrundtemperatur und Windkomponenten, wie auch in PMCs (z.B. *von Zahn et al.*, 1998; *Fiedler et al.*, 2005; *Schmidt et al.*, 2018).

#### 2.1.2 Die mittlere mesosphärische Residualzirkulation

In der polaren Mesosphäre existieren im Sommer geringere Temperaturen im Vergleich zum Winter (siehe Abbildung 2.1). Dieses Phänomen kann nicht durch die Verteilung solarer Einstrahlung erklärt werden, sondern ist mit dynamischen Effekten verbunden. Die Mesosphäre wird von einer starken globalen Zirkulation vom Sommer- zum Winterpol dominiert (z.B. *Plumb*, 2002). Der Antrieb dieser globalen Zelle erfolgt durch brechende Schwerewellen. Die Amplitude der Schwerewellen wächst exponentiell mit der Höhe. Wellen aus der Troposphäre haben somit große Amplituden, wenn sie die Mesosphäre erreichen. Beim Brechen der Wellen werden Energie und Impuls auf den Grundstrom übertragen. Schwerewellen, ost- oder westwärts propagierend, breiten sich vertikal aus (*Holton und Alexander*, 2000). Dabei kann beim Brechen sowohl eine ost- als auch eine westwärts gerichtete Kraft auf den Grundstrom ausgeübt werden. Dies kann zu einem Abbremsen oder einer Beschleunigung des Grundstroms führen.

Die Stratosphäre wirkt als eine Art Filter für die vertikal propagierenden Schwerewellen. Dabei ist die Phasengeschwindigkeit des zonalen Grundstroms entscheidend für die vertikale Wellenausbreitung. Die Wellen brechen, wenn ihre Phasengeschwindigkeit mit der Geschwindigkeit des mittleren Grundstroms übereinstimmt und können weiter propagieren, wenn sie gegenüber dem Grundstrom eine unterschiedliche Geschwindigkeit aufweisen. Durch die negative Strahlungsbilanz in polaren Wintermonaten ergeben sich in der Stratosphäre zonal gemittelte ostwärts gerichtete Winde, wie in Abbildung 2.1 zu sehen ist. Somit werden nur sich nach Westen ausbreitende Wellen nicht vom zonalen Grundstrom gefiltert und können ihren westwärts gerichteten Impuls beim Brechen in der Mesosphäre deponieren. In ähnlicher Weise können sich im Sommer nur nach Osten propagierende Wellen in die Mesosphäre ausbreiten, dort brechen und ihren ostwärts gerichteten Impuls in der Mesosphäre deponieren.

Brechende Wellen induzieren Kräfte, die zu einem Abschwächen des zonalen Grundstroms führen. Dies führt zu einer äquatorwärts gerichteten Beschleunigung im Sommer und zu einer polwärts gerichteten Beschleunigung im Winter (*Holton und Alexander*, 2000). Der resultierende, Hemisphären übergreifende Massentransport vom Sommer- zum Winterpol ist mit einem Aufsteigen der Luftmassen am Sommerpol und infolge der Massenkontinuität mit einem Absinken am Winterpol verbunden. Dabei werden die Luftmassen beim Aufsteigen adiabatisch abgekühlt und beim Absinken adiabatisch erwärmt. Im Bereich der Mesopause werden im Sommerhalbjahr somit sehr geringe Temperaturen erreicht, die eine notwendige Bedingung für die Entstehung von polaren mesosphärischen Wolken bilden.

### 2.2 Strahlungsprozesse und Chemie der Mesosphäre

Die globale Temperatur der oberen Atmosphäre ist in Näherung im Strahlungsgleichgewicht. Die im vorherigen Abschnitt beschriebene inter-hemisphärische, durch Wellen angetriebene Zirkulation und die Dissipation von Bewegungsenergie durch Turbulenz führt in der Mesosphäre lokal zu teilweise sehr starken Abweichungen vom Strahlungsgleichgewicht. Aber auch exothermische chemische Prozesse und Wärmeleitung sind maßgeblich für die sehr geringen Temperaturen in der Mesosophäre verantwortlich. Spurengase wie zum Beispiel Kohlendioxid ( $CO_2$ ), Wasserdampf ( $H_2O$ ) und Ozon ( $O_3$ ) haben einen relevanten Einfluss auf die thermische Struktur und die Dynamik in der Mesosphäre. Das CO<sub>2</sub> ist eines der wichtigsten temperaturrelevanten Spurengase, welches einen signifikanten Kühlungseffekt in der Mesosphäre hat (Feofilov und Kutepov, 2012). In den unteren Atmosphärenschichten agiert das  $CO_2$  als sogenanntes Treibhausgas aufgrund seiner Absorptionsfähigkeit für die abgestrahlte infrarote Strahlung der Erde. Mit zunehmender Höhe verringert sich die Luftdichte, was mit einer größer werdenden freien Weglänge verbunden ist. Dadurch kann sich ein emittiertes infrarotes Photon relativ lange frei bewegen, bevor es durch ein anderes infrarot-aktives Molekül wieder absorbiert wird. In der Mesosphäre erhöht sich die mittlere freie Weglänge so stark, dass die vom CO<sub>2</sub> emittierten infraroten Photonen im Wesentlichen ohne Stöße mit weiteren atmosphärischen Molekülen in den Weltraum entweichen (von Zahn und Berger, 2011). Damit trägt jedes  $CO_2$ -Molekül in der Mesosphäre zu einer lokalen Abkühlung bei. Eine Erscheinung, die oftmals auch als 'negativer Treibhausgaseffekt' bezeichnet wird (z.B. von Zahn und Berger, 2011). Des Weiteren trägt auch das  $O_3$  in der Stratosphäre durch variable aufwärts gerichtete emittierte Infrarotstrahlung zum Strahlungshaushalt der kalten Mesopausenregion im Sommer bei (Lübken et al., 2013).

Im Bereich der geringsten Temperaturen findet man im Sommer kleine Eiskristalle von etwa  $50 \,\mathrm{nm}$ . Eine Schlüsselstellung bei den Eisbildungsprozessen nimmt dabei das

mesosphärische H<sub>2</sub>O ein. In der Mesosphäre ist gegenüber der Troposphäre nur wenig H<sub>2</sub>O vorhanden. Die wichtigsten Beiträge, welche die Wasserdampfverteilung q in der Mesosphäre bestimmen, sind der vertikale Transport  $v \cdot \nabla q(\vec{x}, t)$ , der vom Ortsvektor  $\vec{x}$ und der Zeit t abhängt, die Produktion (P), der Abbau (A) und die molekulare Diffusion (D) (z.B. Berger und von Zahn, 2002):

$$\frac{\partial q(\vec{x},t)}{\partial t} = v \cdot \nabla q(\vec{x},t) + P - A + D.$$
(2.2)

Der vertikale Transport wird durch den Geschwindigkeitsvektor  $\vec{v}$  und den konvektiven Anteil beschrieben, der mittels des Nabla-Operators dargestellt ist. Der Aufwärtstransport von Wasserdampf durch den synoptischen vertikalen Aufwärtswind ist der dominierende Prozess oberhalb von 75 km (z.B. *Berger und von Zahn*, 2002).

Die Hauptquellen für  $H_2O$  in der mittleren und oberen Mesosphäre ist die Wasserdampfbildung durch die Methanoxidation unterhalb von 65 km (z.B. *Sonnemann et al.*, 2005). Die Oxidation von Methan in der Stratosphäre kann vereinfacht durch folgende Gleichung dargestellt werden:

$$CH_4 + OH \xrightarrow{O_2} H_2O + CH_3O_2,$$
 (2.3)

wobei Methan (CH<sub>4</sub>) durch das Hydroxyl-Radikal (OH) zu H<sub>2</sub>O und Methyldioxidanyl (CH<sub>3</sub>O<sub>2</sub>) oxidiert wird (*Sonnemann et al.*, 2005). Das CH<sub>3</sub>-Radikal ist dabei ein Zwischenprodukt und so reaktiv, dass es sofort mit einem Sauerstoffmolekül reagiert. Diese Reaktion ist aber nur der Beginn der sehr komplexen Methanoxidationskette. Je nach weiterem Verlauf der Methanoxidation können zusätzliche H<sub>2</sub>O Moleküle gebildet werden (*Frank et al.*, 2018). Die Oxidation von CH<sub>4</sub> in der Stratosphäre durch OH führt zu einer Erhöhung des Wasserdampfmischungsverhältnisses mit Maximalwerten im globalen Mittel in der oberen Stratosphäre und unteren Mesosphäre.

Die Destruktion des Wasserdampfs findet im Wesentlichen in und über der oberen Mesosphäre statt (Sonnemann et al., 2005). Dabei erfolgt eine Photodissoziation durch die solare Lyman- $\alpha$  Strahlung in molekularen oder atomaren Wasserstoff. Bei  $\pm 75$  km liegt das Wasserdampfmischungsverhältnis im Sommer bei etwa 5 ppmv (Seele und Hartogh, 1999). Mit zunehmender Höhe reduziert sich der Wasserdampf auf etwa 0,8 ppmv ( $\pm 90$  km Höhe) (Berger und von Zahn, 2002). Im Bereich des Sommerpols sind die größten Werte innerhalb des Jahres zu finden, was auf die mittlere mesosphärische Residualzirkulation zurückzuführen ist. Diese ist mit einem Auftrieb der Luftmassen in der Sommerhemisphäre, einem polwärts gerichteten Transport hin zu den Tropen und einem abwärts gerichteten Transport im Winter verbunden.

Der Wasserdampf in mittleren und polaren Breiten im Sommer wurde sowohl experimentell als auch mit Hilfe von Modellen untersucht. Der längste Beobachtungsdatensatz mesosphärischer H<sub>2</sub>O-Konzentrationen reicht bis ins Jahr 1980 zurück und basiert auf Hygrosonden-Messungen über Boulder, Colorado. Die meisten Datensätze beginnen aber

erst nach 2004. Zu den Satellitenmessungen gehören unter anderem das HALogen Occultation Experiment (HALOE) auf dem Upper Atmosphere Research Satellite (UARS), das Submillimeter Radiometer (SMR) an Bord von Odin, das Atmospheric Chemistry Experiment (ACE) auf dem Satelliten SCISAT-1 und das Michelson Interferometer for Passive Atmospheric Sounding (MIPAS) auf dem ENVISAT Satelliten (z.B. Hervig und Siskind, 2006; McHugh et al., 2005; Bernath et al., 2005; López-Puertas et al., 2009). Zudem gibt es einige bodengestützte Messungen mit Mikrowellenspekrometern, die beispielsweise bei 54°N mit MISI (engl.: MIcrowave Spectrometer at IAP) oder bei 69°N am ALOMAR-Observatorium (engl.: Arctic Lidar Observatory for Middle Atmosphere Research) in Norwegen durchgeführt werden (z.B. Hartogh et al., 2010). In situ Messungen von  $H_2O$ -Konzentration in der oberen Stratosphäre und Mesosphäre mit Höhenforschungsraketen sind derzeitig noch eine große Herausforderung. Die Fernerkundungsmethoden vom Boden oder vom Satelliten werden durch geringe Signalstärken und durch einen großen Strahlungshintergrund erschwert. Mirkowellenmessungen haben eine geringe Höhenauflösung und funktionieren oberhalb von 80 km sehr eingeschränkt. Diese Aspekte sowie eine statistisch geringe Abdeckung führen zu Unsicherheiten bei der Bestimmung von H<sub>2</sub>O-Konzentrationen in der Mesosphäre und müssen beim Vergleich von modellierten und beobachteten Werten berücksichtigt werden.

### 2.3 Polare Mesosphärische Wolken (PMCs)

Polare mesosphärische Wolken (PMCs, engl.: polar mesospheric clouds) bestehen aus Wassereiskristallen und treten in mittleren bis hohen Breiten um 83 km Höhe auf (z.B. Jesse, 1896; Gadsden und Schröder, 1989; Lübken et al., 2008). Sie werden auch leuchtende Nachtwolken (NLC, engl.: noctilucent clouds) genannt, wenn sie vom Boden aus beobachtet werden. Diese Wolken bilden sich im Sommer in einer übersättigten kalten Atmosphäre mit Temperaturen unter  $\sim 150 \,\mathrm{K}$ . PMCs können sich in einem Höhenbereich von etwa  $\sim 80$  bis  $\sim 89$  km vertikal ausdehnen (z.B. Baumgarten und Fiedler, 2008; Hervig et al., 2009a; García-Comas et al., 2016) und sind optisch dünn. Die optische Dicke geht als Extinktionskoeffizient in die Berechnung der Transmissivität ein, die eine Größe für die durchgelassene Intensität der Strahlung darstellt. Mit dem Extinktionskoeffizienten lässt sich die exponentielle Abschwächung von elektromagnetischen Wellen durch die PMC infolge von Streuung und Absorption ausdrücken. In Baumgarten (2001) wird eine typische optische Dicke der Wolke von  $10^{-5}$ , gemessen bei einer Wellenlänge von 532 nm, angegeben, was einem Extinktionskoeffizienten von etwa  $10^{-5}$ /km entspricht. Durch diese optischen Eigenschaften kann ein Beobachter am Erdboden die Eiswolken nur vor einem dunklen Hintergrundhimmel in der Morgen- bzw. Abenddämmerung betrachten (Abb. 2.2). Sie heben sich als bläulich-weiße Erscheinung vom Nachthimmel ab. Steht die Sonne  $6^{\circ}$  oder weniger unter dem Horizont, verschwinden diese Wolken für das bloße Auge (Gadsden und Schröder, 1989).



Figure 2.2: Schema der NLC-Geometrie zum Zeitpunkt des Sonnenuntergangs bzw. Sonnenaufgangs.

PMCs zeigen oft eine große Variabilität, die Informationen über thermische und dynamische Prozesse liefern (*Witt*, 1962). Sie gelten als mögliche Klima- und Solarzyklusindikatoren in der mittleren Atmosphäre (z.B. *Thomas*, 1996a; *Berger und Lübken*, 2015; *Hervig et al.*, 2016a). Die kleinskaligen Eisstrukturen reagieren aber auch äußerst empfindlich gegenüber der atmosphärischen Hintergrundtemperatur und dem Wasserdampf. Die unterschiedlichen physikalischen Entstehungsprozesse von Eiswolken (Nukleation) sowie Form und Größe der Eispartikel haben Auswirkungen auf Strahlungseigenschaften der Wolken. Die gewonnen Informationen aus der Analyse der Extinktion und Streuung kann wiederum genutzt werden, um die Anzahl, Helligkeit und Auftrittswahrscheinlichkeit der Wolken zu bestimmen.

In Petty (2004) findet man eine Grafik (Abb. 2.3), welche die Streuprozesse für einige Partikeltypen der Atmosphäre und für verschiedene Spektralbereiche zeigt. Die theoretische Behandlung der Streuung für Partikel hängt vom Größenparameter x ab, welcher wiederum von der Strahlungswellenlänge  $\lambda$  und der Partikelgröße r abhängig ist ( $x = 2\pi r/\lambda$ ). Die Rückstreuung durch PMC-Partikel besitzt im UV-Bereich Mie-ähnliche Eigenschaften. Die Eispartikel sind viel kleiner als die Wellenlängen des sichtbaren Lichts, aber immer noch groß genug, dass ihre Streuquerschnitte mit der Mie-Theorie berechnet werden müssen (*Kiliani*, 2014). Für sehr kleine Eisteilchen von etwa 10 nm bei einer Wellenlänge von beispielsweise 290 nm ist die Mie-Phasenfunktion im Wesentlichen gleich der symmetrischen Rayleigh-Phasenfunktion (siehe Abb. 2.4). In diesem Fall wird die Rayleigh-Streuung als ein sphärischer Fall der Mie-Streuung bezeichnet und es ist die einfache Rayleigh-Annäherung  $\beta \sim r^6$  zur Bestimmung der Partikelgröße ausreichend.

Messungen mit Lidargeräten und Satellitenbeobachtungen zeigen, dass mesosphärische Eispartikel im Allgemeinen nicht sphärisch geformt sind (z.B. *Baumgarten et al.*, 2002;



Figure 2.3: Zusammenhang zwischen Partikelgröße, Strahlungswellenlänge und Streuverhalten für atmosphärische Partikel. Diagonal gestrichelte Linien trennen die Bereiche unterschiedlicher Streuungsprozesse (nach Abb. 21.1 von *Petty* (2004)). Der rot markierte Bereich umfasst das Streuungsregime von PMCs.



Figure 2.4: Rayleigh-Phasenfunktion (A) und Mie-Phasenfunktion (B) für Eispartikel unterschiedlicher Größe bei einfallender Strahlung mit der Wellenlänge  $\lambda = 290 \text{ nm}$ , entnommen der Dissertation von *Robert* (2009).

*Eremenko et al.*, 2005; *Rapp et al.*, 2007; *Hervig et al.*, 2009a). Asphärische Partikel tendieren dazu, mehr Licht in die Vorwärtsrichtung zu streuen als Kugeln bei einem volumenäquivalenten Radius. Dennoch wird in der Modellierung oftmals zur Vereinfachung von kugelförmigen Eispartikeln ausgegangen, was aufgrund weiterer Unsicherheiten bei der numerischen Simulation gerechtfertigt ist (*Kiliani et al.*, 2015). Unter Annahme von

sphärischen Teilchen ist die Rückstreuung etwa proportional zu  $r^x$ , mit x = 4-6 (*Robert et al.*, 2009).

#### 2.3.1 Die Nukleation auf mesosphärischen Eispartikeln

In der Vergangenheit wurden unterschiedliche Szenarien der mesosphärischen Eisbildung aufgeworfen. Die Eispartikel können sich entweder durch Ionenkeimbildung und/oder homogene bzw. heterogene Kondensation von Wasserdampf bilden (z.B. *Berger und von* Zahn, 2002). Bei der homogenen Nukleation kondensieren reine Wasserdampfmoleküle in der Atmosphäre zu Eiskristallen. Sie erfordert aber sehr tiefe Temperaturen von weniger als 110 K und ein sehr hohes Sättigungsverhältnis von etwa 10<sup>5</sup>, was nur bei starker Schwerewellenaktivität möglich ist (*Murray und Jensen*, 2010). Die Sättigungsdampfdruck über einer ebenen Eisfläche ( $p_{sat}$ ). Der Sättigungsdampfdruck ist von der Temperatur (T) und der Partikelgröße (r) abhängig.

$$S = \frac{p_{\mathrm{H_2O}}}{p_{\mathrm{sat}}(T,r)}.$$
(2.4)

Bei der heteorogenen Eisnukleation wirken Partikel als Nukleationskeime. Dabei wird die mit dem Phasenwechsel des Wassers verbundene Energiebarriere durch die Nukleationskeime gesenkt, so dass die Eisbildung bereits bei geringeren Temperaturen stattfinden kann als bei einer homogenen Nukleation. Die Gefriertemperaturen hängen dabei stark vom jeweiligen Eisnukleationskeim ab. Die heterogene Eisbildung wird als der dominierende mikrophysikalische Prozess in der Mesosphäre angesehen (z.B. Gadsden und Schröder, 1989; Turco et al., 1982; Rapp und Thomas, 2006). Eine homogene Eisnukleation setzt voraus, dass bei den notwendigen sehr geringen Temperaturen auch noch genug Wasserdampf vorhanden ist. Dies ist infolge einer vorangegangen heterogenen Nukleation eher unwahrscheinlich, da der Wasserdampf durch diesen Prozess bereits aufgebraucht sein müsste. Es gibt verschiedene atmosphärische Prozesse der heteorogenen Eisnukleation. In der Mesosphäre sind geringe Wasserdampfpartialdrücke von  $10^{-7}$  bis  $10^{-6}$  Pa und Temperaturen zwischen 120 und 150 K (z.B. Rapp und Thomas, 2006) vorhanden. Damit liegt der Wasserdampf nur in der Gasphase vor (siehe Abb. 2.5), wodurch das Depositionsgefrieren am wahrscheinlichsten auftritt. Beim Depositionsgefrieren lagern sich Wasserdampfteilchen an der Oberfläche der Nukleationskeime ab.



Figure 2.5: Phasendiagramm von Wasser mit typischen Bedingungen, die in der polaren Mesopause im Sommer vorherrschen (roter Punkt). Das Diagramm wurde mit Daten vom National Institute of Standards and Technology (NIST) erstellt und der Dissertation von *Wilms* (2016) entnommen.

In der Mesosphäre verglühen ein Großteil der in die Atmosphäre eintretenden Meteore. Die durch die Kondensation der verdampften Meteore entstehenden Staubpartikel (MSP, engl.: Meteor Smoke Particle) sind mögliche Nukleationskeime mesosphärischer Eispartikel. Experimentell konnte die Existenz von MSPs durch Raketenexperimente, Radarmessungen und Satellitenbeobachtungen nachgewiesen werden (z.B. *Gelinas et al.*, 1998; *Lynch et al.*, 2005; *Rapp et al.*, 2010; *Robertson et al.*, 2014; *Strelnikova et al.*, 2007; *Hervig et al.*, 2012). Aus Satellitenmessungen konnte geschlussfolgert werden, dass 0,01–3% des Gesamtvolumens der Wassereiskristalle aus Meteorstaub bestehen (*Hervig et al.*, 2012). Diese Beobachtungen sind ein Beleg für die heterogene Eisbildung. MSP sind dabei die wahrscheinlichsten Kandidaten für Nukleationskeime in der Mesopausenregion (*Rapp und Thomas*, 2006). Die Untersuchung von Meteoren hält dennoch viele Fragen offen, wie genaue MSP-Anzahldichte und Größenverteilung, welche bislang im Wesentlichen durch Modelle abgeschätzt werden (*Hunten et al.*, 1980; *Megner et al.*, 2008b). Laborversuche lassen darauf schließen, dass die MSPs vermutlich aus eisenhaltigen Mineralien zusammengesetzt sind (z.B. *Saunders und Plane*, 2006).

Die Anlagerung von Wasserdampf an Staubpartikeln erfolgt in Regionen mit Übersättigung (Sättigungsverhältnis S > 1). Befindet sich der Sättigungsdampfdruck und der Wasserdampfpartialdruck im Gleichgewicht, so dass S = 1 ist, gibt es einen sogenannten kritischen Radius  $r^*$ , der für eine Nukleation oder ein weiteres Wachstum überwunden werden muss. Die Nukleationsrate J ist gegeben durch (*Keesee*, 1989):

$$J = \frac{ZkTdr^*\sin(\theta)}{fM\nu} 4\pi r_{\rm N}^2 \cdot N_{\rm N} \cdot N_{\rm H_2O}^2 \times exp\left[\frac{2G_{\rm des} - G_{\rm sd} - fG_{\rm r^*}}{kT}\right],\tag{2.5}$$

R	: Boltzman-Konstante
d	: Länge der Oberflächendiffusion der adsorbierten Moleküle
$\theta$	: Kontaktwinkel
f	: geometrischer Faktor
M	: Molekulargewicht des Wassers
ν	: Frequenz der Oberflächenvibration
$r_{\rm N}$	: Radien der Nukleationskeime
$N_{\rm N}$	: Anzahldichte der Nukleationskeime
$N_{\rm H_2O}$	: absorbierte Wasserdampfkonzentration
$G_{\text{des}}$	: freie Aktivierungsenergie der Desorption

- $G_{\rm sd}$  : freie Energie für die Oberflächendiffusion
- $G_{\mathbf{r}^*}$ : freie Gibbs-Energie für den kritischen Radius

Für mesosphärische Bedingungen geht Keesee (1989) von Werten d = 0,1 nm,  $\nu = 10^{13} s^{-1}$ ,  $G_{des} = 2,9 \cdot 10^{-20}$  J und  $G_{sd} = 2,9 \cdot 10^{-21}$  J aus (Bardeen et al., 2010). Der Zeldovich-Faktor Z ist ein Maß für die Abweichung der stationären Größenverteilung von der Gleichgewichtsverteilung und beträgt in etwa 0,1 (Rapp und Thomas, 2006). Der Kontaktwinkel  $\theta$  beschreibt, wie gut der entstehende Eiskristall mit der Oberfläche des Nukleationskeim interagiert. Der sogenannte Kontaktparameter  $m_{\rm K}$  ist der Kosinus des Kontaktwinkels zwischen Staubteilchen und Wasserdampfmolekül und wird durch die Young-Beziehung gegeben:

$$m_{\rm K} = \cos(\theta) = \frac{\sigma_{\rm a,N} - \sigma_{\rm c,N}}{\sigma_{\rm c,a}},\tag{2.6}$$

wobei  $\sigma_{i,j}$  die Oberflächenspannungen zwischen Luft (a) und dem Nukleationskeim (N), dem Eis (c) und dem Nukleationskeim sowie dem Eis und der Luft sind. f ist ein geometrischer Faktor in Abhängigkeit von  $m_{\rm K}$ , welcher die freie Energie zur Anpassung an die Oberflächengeometrie skaliert (*Bardeen et al.*, 2010). Der Kontaktwinkel beschreibt die sogenannte Benetzbarkeit der kristallinen Oberflächenstruktur des Eises, d.h. wie stark wasserdampfabweisend oder -bindend das Eis ist. Ein Kontaktwinkel von 0 (m= 1) impliziert eine sehr gute Benetzbarkeit und damit eine sehr gute Haftung des Wasserdampffilms auf dem Eis (z.B. *Rapp und Thomas*, 2006). Eine Nukleation findet in diesem Fall immer dann statt, wenn der Radius des Eiskerns größer als der kritische Radius ist.

In der klassischen heterogenen Nukleationstheorie werden Eiskerne zur Vereinfachung als perfekte Kugeln ohne Oberflächeninhomogenitäten betrachtet. Demzufolge gibt es keine bevorzugten Stellen, an denen die Eisbildung beginnt. Ebenfalls gibt es auch keine Barrieren für die Oberflächendiffusion. Hier ist anzumerken, dass die Form der Teilchen sehr wohl einen Effekt auf die mittleren Eigenschaften hat (*Hervig und Gordley*, 2010;

Z

: Zeldovich-Faktor

Kiliani et al., 2015). Asphärische Eisteilchen erscheinen heller und zeigen ein stärkeres Wachstum, wie auch eine langsamere Sedimentation. Zur Vereinfachung und um Rechenzeit zu sparen wird bei der PMC-Modellierung dennoch oftmals von sphärischen Teilchen ausgegangen. Die Wasserdampfmoleküle lagern sich an der Oberfläche der kugelförmigen Nukleationskeime an und bilden Cluster, die durch die Bindung zusätzlicher Moleküle wachsen. Die Krümmung der Oberfläche des Teilchens hat einen signifikanten Einfluss auf den Sättigungsdampfdruck. Bei kleinen Partikeln wird der Sättigungsdampfdruck im Vergleich zu einer flachen Oberfläche erhöht. Die äußeren Moleküle haben im Vergleich zu einer ebenen Oberfläche weniger Bindungspartner, so dass die Energiebarriere gesenkt wird. Dies wird als Kelvin-Effekt bezeichnet (*Pruppacher et al.*, 1998).

Weiterhin wird bei der klassischen Nukleationstheorie davon ausgegangen, dass die Partikeltemperatur gleich der Umgebungstemperatur ist (z.B. Fiocco et al., 1975; Eidhammer und Havnes, 2001). In der Realität können die Eisteilchen durch die Absorption von solarer oder terrestrischer Strahlung in Abhängigkeit vom enthaltenden Material allerdings deutlich wärmer sein als die Umgebungsluft (z.B. Eidhammer und Havnes, 2001; Asmus et al., 2014). Enthalten diese zum Beispiel mehr Eisen kann eine Temperaturdifferenz von bis zu 10 K erreicht werden (Wilms et al., 2016). Raketen- und satellitengestützte Messungen unterstützen die Aussage von Asmus et al. (2014), dass MSPs sehr wahrscheinlich aus eisenhaltigem Materialien bestehen (Rapp et al., 2012; Hervig et al., 2017). Zusätzlich werden die Ergebnisse einer steigenden Absorptionseffizienz mit steigendem Eisengehalt in den potenziellen MSP durch Laborexperimente in Kombination mit Modellrechnungen von Nachbar et al. (2019) bestätigt. Asmus et al. (2014) haben gezeigt, dass bereits kleine Temperaturdifferenzen eine deutliche Verringerung der Nukleationsrate bewirken können. Nachbar et al. (2019) haben in einer aktuellen Studie hingegen nachgewiesen, dass der Einfluss der Sonneneinstrahlung auf die Bildung von PMCs geringer ist als bisher angenommen und die Temperaturdifferenz zwischen den Staubpartikeln und der Umgebung maximal 4 K beträgt.

Unter besonderen Bedingungen kann auch eine Nukleation durch Ionenrekombination (*Witt*, 1969) oder auf geladenen MSPs sowie auf stark bipolaren Molekülen wie NaHCO3 (*Plane*, 2000) erfolgen. Durch die Coulomb-Wechselwirkungen (elektromagnetische Wechselwirkung zwischen geladenen Teilchen) ist eine Reduzierung der Energiebarriere für die Nukleation möglich. So können im Vergleich zu ungeladenen Staubpartikeln noch kleinere geladene Partikel als Eiskeime fungieren (*Gumbel und Megner*, 2009).

### 2.3.2 Teilchenwachstum und Sublimation

Bereits nukleierte Eiskristalle wachsen durch die direkte Deposition von Wasserdampf auf deren Oberflächen weiter an. Dabei muss die Atmosphäre ausreichend übersättigt (S > 1) sein. Um die durch den Kelvin-Effekt verursachte Energiebarriere zu überwinden, muss ein Cluster einen kritischen Radius erreichen. Der kritische Radius lässt sich direkt aus

der freien Gibbs-Energie bestimmen und ist wie folgt definiert (Rapp und Thomas, 2006):

$$r^* = \frac{2M\sigma_{\rm c,a}}{3(RT\rho_{\rm ice}lnS)^2},\tag{2.7}$$

wobei R die Gaskonstante und  $\rho_{ice}$  die Eisdichte ist. Die Sättigung des Wasserdampfes in der Atmosphäre in Bezug auf Eis bestimmt ob ein Eisteilchen anwächst oder sublimiert. Ein Cluster wächst nach der Keimbildung weiter, was durch folgende Gleichung beschrieben werden kann (*Wilms*, 2016):

$$\frac{d}{dt}m = \frac{M}{\sqrt{2\pi kT}}(p_{\rm H_2O} - p_{\rm sat})4\pi r^2.$$
(2.8)

In Bezug auf die Änderung der Radien kann dies umgeschrieben werden in

$$\frac{d}{dt}r = \frac{1}{\rho}\sqrt{\frac{M}{2\pi kT}}p_{\text{sat}}(S-1).$$
(2.9)

Während die wachsenden Eispartikel aufgrund ihres Gewichts nach unten sedimentieren, wirken mittlere vertikale und horizontale Winde sowie kleinskalige Wellen und Turbulenzen auf die Partikel ein. Beim weiteren Absinken gelangen die PMCs in Bereiche mit höheren Temperaturen und ein Sättigungsverhältnis unter 1, wodurch die Teilchen sublimieren. Dieser Prozess führt dazu, dass die größten Teilchen im unteren Teil einer PMC zu finden sind. Ab einem Durchmesser größer als 10 nm werden die Eispartikel für Lidargeräte sichtbar (*Gerding et al.*, 2018), während Satelliteninstrumente wie beispielsweise SOFIE an Bord des AIM Satelliten auch für kleinere Teilchen sensitiv sind.

Eisteilchen werden auch mit Radar-Geräten erkannt. Die mit dem Radar beobachteten starken Rückstreuungen werden als polare mesosphärische Sommerechos (PMSE, engl.: polar mesospheric summer echos) bezeichnet und durch neutrale Luftturbulenzen in Verbindung mit geladenen Eispartikeln verursacht (*Rapp und Lübken*, 2004). PMSE treten oftmals zusammen mit PMCs auf (*Nussbaumer et al.*, 1996; *Gerding et al.*, 2018). In *Gerding et al.* (2018) wurden Gemeinsamkeiten und Unterschiede in zeitlicher und vertikaler Ausdehnung von PMC und PMSE untersucht. Unter anderem wurde festgestellt, dass im Durchschnitt die Unterkanten von PMC und PMSE identisch sind, was dem allgemeinen Verständnis von schnell sublimierenden Eispartikeln am Boden der Schicht entspricht (*Kiliani et al.*, 2013). Mit dem Radar können aber oberhalb von PMC-Höhen eine große Anzahl an sehr kleinen Partikeln detektiert werden, wodurch die PMSE im Vergleich zur PMC einen größeren Höhenbereich abdeckt.

### 2.4 Zusammenfassung

Die Mesopause ist die kälteste Atmosphärenschicht, welche die Erde umgibt. Sie ist von atmosphärischen Schwerewellen, atmosphärischen Gezeiten, planetaren Wellen und einem meridionalen Massenfluss vom Sommer- zum Winterpol geprägt. Im Sommer sind die Temperaturen in der polaren Region kalt genug, um den geringen vorhandenen Wasserdampf in Eiswolken einzufrieren. Diese Eiswolken werden als leuchtende Nachtwolken oder polare mesosphärische Wolken bezeichnet und sind bei Sonnenuntergang von mittleren und hohen Breiten der Erde aus sichtbar. Folgende Tabelle gibt einen Überblick über die wichtigsten mittleren Eigenschaften von PMCs:

Charakteristik	PMC-Wert	Referenz
Farbe Höhe Breite für Bodenbeobach- tung Beobachtungszeitraum	Bläulich-weiß 82 km 45–80°N, am besten bei etwa 60– 75°N Mai–August	<ul> <li>(z.B. Gadsden und Schröder, 1989)</li> <li>(z.B. Gadsden und Schröder, 1989)</li> <li>(z.B. Avaste et al., 1980a; Gadsden und Schröder, 1989)</li> <li>(z.B. Gadsden und Schröder, 1989; Benze et al., 2012; Fiedler et al., 2015)</li> </ul>
Beobachtungsgeometrie	während der Dämmerung, wenn die Sonne $6-16^{\circ}$ unterhalb des Horizonts steht	(z.B. Fiedler et al., 2017)
Räumliche Ausdehnung Mittlere Geschwindigkeit	10.000-4.000.000 km <sup>2</sup> 40 m/s Richtung SW; einzelne Bän- der bewegen sich oft in ver- schiedene Richtungen und mit einer Geschwindigkeit, die sich von der Gesamtgeschwindigkeit unterschei- det.	(z.B. Avaste et al., 1980a) (z.B. Avaste et al., 1980a; Kiliani, 2014)
Mittlere vertikale Aus- dehnung	1,2 km	(z.B. Fiedler et al., 2003b)
Mittlerer unterer Rand	$80\mathrm{km}$	(z.B. Baumgarten und Fiedler, 2008; Hervig et al., 2009a; García-Comas et al., 2016)
Mittlerer oberer Rand	$87-89\mathrm{km}$	(z.B. Baumgarten und Fiedler, 2008; Hervig et al., 2009a; García-Comas et al., 2016)
Temperatur bei $82\mathrm{km}$	$150\mathrm{K}$	(z.B. Lübken, 1999)
Mittlere Partikelanzahl	$85/\mathrm{cm}^3$	(z.B. Baumgarten et al., 2008)
Mittlerer Radius	$50\mathrm{nm}$	(z.B. Baumgarten et al., 2008)
Extinktionskoeffizient	$10^{-4} - 10^{-7}$ /km (abh. von der Wellenlänge)	(z.B. von Savigny et al., 2004; McHugh et al., 2003; Baumgarten, 2001)

Table 2.1: Mittlere Eigenschaften von PMCs

# Chapter 3

# Das Lagrangesche Eistransportmodell MIMAS

Dieses Kapitel gibt einen Überblick über das Lagrangesche Eistransportmodell MIMAS (engl.: Mesospheric Ice Microphysics And tranSport model). Es umfasst eine Beschreibung des Modellaufbaus, welcher dieser Arbeit zugrunde liegt. In diesem Zusammenhang werden zunächst die in das Eismodell einfließenden Eingangsparameter beschrieben. Danach erfolgt die Erläuterung der mikrophysikalischen Prozesse, die in MIMAS simuliert werden. Abschließend werden die simulierten Bestandteile mesosphärischer Eisschichten wiedergegeben. Das Grundkonzept ist die Modellierung der Hintergrundatmosphäre mit dem Leibniz-Institut Middle Atmosphere Model (LIMA), um dann diesen Hintergrund in das MIMAS-Modell einzubinden und zur Untersuchung der räumlichen und zeitlichen Variabilität mesosphärischer Eisschichten zu nutzen (Abb. 3.1).



Figure 3.1: Schematische Darstellung von MIMAS mit den grundlegenden mikrophysikalischen Prozessen. Die Eingangsparameter sind links dargestellt. Die Ergebnisse der Simulation sind rechts angedeutet.

### 3.1 MIMAS Eingangsparameter und Modelldomäne

MIMAS ist ein eigenständiges Eistransportmodell, das am Leibniz-Institut für Atmosphärenphysik (IAP) speziell dafür entwickelt wurde, Eisteilchen in der Mesosphäre und unteren Thermosphäre zu modellieren. Die Modelldomäne ist auf den Bereich vom 37. Breitengrad polwärts auf einen Höhenbereich zwischen 77,8 km und 94,1 km begrenzt. Um Eisberechnungen durchführen zu können, benötigt MIMAS 3D-zeitabhängige Eingangsparameter wie zonale, meridionale und vertikale Winde (u, v, w) sowie die Umgebungstemperatur (T), Luftdichte  $(\rho)$  und -druck (p) von LIMA (Abb. 3.1 - blaue Umrandung). Des Weiteren gehen eine anfängliche Wasserdampfverteilung  $(H_2O)$  und ein Proxy für die solare Aktivität  $(Ly_{\alpha})$  in das Eismodel mit ein (Abb. 3.1 - orange Umrandung). Diese beiden farbigen Bereiche (blau und orange) werden im Folgenden nacheinander vorgestellt.

#### 3.1.1 Zirkulationsmodell LIMA

MIMAS ist so konzipiert, dass es mit beliebigen Daten mesosphärischer Hintergrundbedingungen gekoppelt werden kann. Diese Hintergrundfelder werden durch Beobachtungen und durch Modelldaten bereitgestellt. In dieser Arbeit wurden Hintergrundfelder des Zirkulationsmodells LIMA verwendet. Dieses soll insbesondere die thermische Struktur um Mesopausenhöhen darstellen (*Berger*, 2008). LIMA ist ein nichtlineares, globales 3D-eulersches Gitterpunktmodell, dass sich mit einer Vertikalauflösung von 1,1 km vom Erdboden bis in die untere Thermosphäre (0–150 km) erstreckt. Es berücksichtigt die wichtigsten Prozesse wie Strahlung, Chemie und den Transport. Das Modell verwendet eine dreieckige horizontale Gitterstruktur mit 41804 Gitterpunkten in jeder horizontalen Ebene ( $\Delta x \approx \Delta y \approx 110$  km).

Das Einbinden von Reanalysendatensätze sorgt für einen Antrieb in den unteren Atmosphärenschichten und wirkt sich in LIMA bis in die mittlere Atmosphäre aus. Die Reanalysen sind die Ergebnisse einer Modellrechnung unter Einbezug einer großen Menge an Beobachtungen. Das Ziel der Modellsimulationen ist es, einen zeitlich und räumlich hochaufgelösten homogenen Datensatz zu erhalten, welcher sich für die Berechnung von Klimatologien, wie sie in LIMA erfolgt, eignet. Somit wird der realitätsnahe Zustand der Troposphäre und unteren Stratosphäre durch Parameter wie Temperatur, Horizontalwinde und Bodengeopotential aus Reanalysen des Europäischen Zentrum für mittelfristige Wettervorhersage (ECMWF, engl.: European Centre for Medium-Range Weather Forecasts) repräsentiert. Diese werden mittels der vereinfachten Assimilationsmethode des Newton'schen Relaxationsverfahrens, auch "Nudging'- Methode genannt, in das Modell eingebunden. Der Nudgingkoeffizient beträgt vom Erdboden bis zur mittleren Stratosphäre  $3,5^{-1}$  Tagen<sup>-1</sup>. Das heißt, der Koeffizient ist so gewählt, dass die Abweichung des Modellwerts zum Wert der Reanalyse sich innerhalb eines Tages auf  $3,5^{-1}$  verringert. Damit werden die Modellfelder den Beobachtungswerten angenähert, ohne dass das modellinterne dynamische Gleichgewicht wesentlich gestört wird. Der Koeffizient verringert sich ab 35 km linear mit zunehmender Höhe, so dass er bei 45 km Höhe dem Wert *Null* entspricht (*Lübken et al.*, 2013).

In der vorliegenden Arbeit wurden verschiedene Reanalysendatensätze für den Nudging-Prozess verwendet. Für den sogenannten Referenzlauf (REF) wurden in LIMA der 40-jährige ECMWF Reanalysedatensatz (ERA-40) von 1960 bis 2002 mit anschließenden operativen Analysen des ECMWF eingebunden. Diese Modellkonfiguration wurde bereits für mehrere veröffentliche Studien genutzt (z.B. Lübken et al., 2013; Berger und Lübken, 2015; Kiliani et al., 2013). Der zweite Modelllauf wird LIH5 genannt und bindet ERA-Interim Daten (ebenfalls vom ECMWF) ein.

Für die ERA-40 Reanalysen wurde ein Spektralmodell mit einer horizontalen Auflösung T159 (entspricht einer Maschenweite von  $\sim 125 \,\mathrm{km}$  auf einem reduzierten Gauss'schen Gitter) verwendet. Als Datenassimilationsschema wurde eine dreidimensionale variationelle Analyse (3D-Var) mit einem 6-stündigen Assimilationszyklus angewandt. Das bedeutet, dass ein Hintergrundfeld nur zu einem synoptischen Termin mit den Beobachtungen abgeglichen wird. Vertikal besitzen die ERA-40 Reanalysen 60 Modelllevel mit der höchsten Stufe bei 0,1 hPa (Uppala et al., 2005). Die operationellen Analysen des ECMWF werden mittels eines spektralen Atmosphärenmodells mit einem geländefolgenden vertikalen Koordinatensystem, das mit einem 4D-Var Datenassimilationssystem gekoppelt ist, berechnet. Dadurch wird im Gegensatz zu ERA-40 die direkte Assimilation des Zeitverlaufs der Beobachtungen berücksichtigt (Uppala, 2006). Das Vorhersagemodell initialisiert eine 3D-Atmosphäre vom Vortag und führt eine Modellsimulation mit allen Informationen der Wetterbeobachtungen des aktuellen Tages durch. Das Modell für die operationellen Analysen befindet sich immer in der Entwicklung und wird regelmäßig aktualisiert. Daher variiert die Qualität der Zeitreihen. Es wird versucht eine stetige Verbesserung des Modells durch eine höhere zeitliche und räumliche Auflösung zu erreichen.

Der ERA-Interim Datensatz liefert Modellsimulationen von 1997 bis 2018 und ist der Nachfolger von ERA-40. ERA-Interim baut auf die 4D-Variationsassimilation auf. Die horizontale Auflösung von ERA-Interim hat sich gegenüber ERA-40 auf T255 erhöht, was einem Gitterpunktsabstand von etwa 80 km entspricht. Die 60 vertikalen Modelllevel sind gleich geblieben.

Die relativ kleine Maschenweite in LIMA von  $\sim 110$  km erlaubt eine modellinterne Beschreibung einer Vielzahl von atmosphärischen Wellen. Diese wird im REF-Lauf als Maß für die Wellenaktivität in der gesamten Modelldomäne genommen. Der LIH5-Lauf berücksichtigt zusätzlich zu der intern erzeugten Variabilität eine Schwerewellen-Parametrisierung nach *Yiğit et al.* (2008), mit der die Ausbreitung von kleinskaligen Wellen beschrieben wird. Mit dem Schema werden Schwerewelleneffekte in der gesamten Atmosphäre berechnet. Verglichen mit beispielsweise dem Kühlungsborn Mechanistic general Circulation Modell (KMCM) wird durch die Adaption der Renalysedaten dem Eismodell MIMAS ein heuristischer Charakter verliehen. KMCM kennzeichnet sich durch ein breites Wellenspektrum aus und berücksichtigt Schwerewellen und planetare Wellen. Gezeiten sind jedoch nicht enthalten. Die Komplexität des Modells ist mit hoher Rechenzeit gekoppelt, was den Berechnungszeitraum für die PMC-Saison einschränkt und oftmals nur für ein bis zwei Modelltage durchgeführt werden kann. Trendrechnungen mit Einbindung von Ozon- und Kohlendioxidänderungen sind somit nicht möglich. In den MIMAS-Hintergrundfeldern wird auf eine sehr hohe Auflösung von kleinskaligen Wellen verzichtet, was wiederum Trendberechnungen erlaubt.

LIMA adaptiert des Weiteren Beobachtungen zeitlicher Variationen von  $CO_2$  und  $O_3$ , die einen entscheidenden Einfluss auf Temperaturtrends nehmen (z.B. Lübken et al., 2013). Für  $CO_2$  wurden Monatsmittelwerte des gesamten Zeitraumes 1961–2013 verwendet. Gemessen wurde diese Zeitreihe in der USA auf Hawaii auf Mauna Loa (*Tans*, 2018). Für die Ozonvariabilität im Höhenbereich 40 bis 65 km werden relative Anomalien von 1979 bis 2013 bei 0,5 hPa eingebunden. Diese wurden mit SBUV (engl.: Solar Backscatter Ultraviolet Radiometer) Satelliteninstrumenten gemessen (*McPeters*, 2017). Vor 1979 wurden die Ozondaten dem Bericht der Weltorganisation für Meteorologie (WMO) entnommen. Die Module für die Strahlung und den mesosphärischen chemischen Transport werden extern in einem Chemie-Transportmodell (CTM) berechnet (*Berger und von Zahn*, 2002).

#### 3.1.2 Wasserdampfquelle und solare Aktivität

MIMAS verwendet eine Wasserdampfquelle, die am Anfang jeder saisonalen Simulation konstant auf den Druckniveaus ist. Das Wasserdampfprofil wurde den Modellsimulationen von Körner und Sonnemann (2001) entnommen, welches einer Mittlung über 10 Tagen entspricht (Berger und von Zahn, 2002). Dieses Profil wird ebenfalls für Simulationen mit dem Eismodell Community Aerosol and Radiation Model for Atmospheres (CARMA) verwendet, wobei Wilms (2016) unter anderem beschrieben hat, dass das Wasserdampfprofil gut zu bodengestützten Beobachtungen (Seele und Hartogh, 1999) und Satellitenbeobachtungen (Hervig et al., 2009b) passt. In der Simulation variiert der Wasserdampf durch Variation von Lyman- $\alpha$  Strahlung, 3D-Transport und turbulenter Diffusion. Durch Interaktion mit Eispartikeln kommt es infolge der Gefriertrocknung zur Umverteilung von H<sub>2</sub>O bis zum Ende der Saison am 20. August. In Kombination mit Transport und Photolyse hält das Nudging den Wasserdampf in MIMAS auf Konzentrationen, die mit Beobachtungen übereinstimmen (Hartogh et al., 2010). Als Proxy für die solare Aktivität werden Lyman- $\alpha$ Werte bei einer Wellenlänge von 121,56 nm vom LASP (engl.: Laboratory for Atmospheric and Space Physics) Interactive Solar IRradiance Data Center (LISIRD) genutzt (Machol et al., 2016).

### 3.2 Mikrophysikalische und chemische Prozesse

Ziel der Eiswolkenmodellierung mit MIMAS ist es, mittels Kopplung von Dynamik, Strahlung und Mikrophysik PMCs möglichst realitätsnah zu simulieren. In MIMAS werden die Bildung und der Lebenszyklus von Eisteilchen in der polaren Sommermesopausenregion auf Trajektorien beschrieben. Die einzelnen Module im Modell umfassen die Bildung von Eisteilchen sowie die Umverteilung von Wasserdampf und Staubteilchen, die als mögliche Nukleationskeime für die Eisbildung dienen. Diese drei Bestandteile interagieren untereinander über (a) die Nukleation von Staubteilchen, die zur Bildung von Eispartikeln führt, (b) die Deposition von Wasserdampf an Eispartikeln, die deren Wachstum unterstützen, (c) die Sublimation von Eispartikeln unter Freisetzung von Wasserdampf und eventueller Freisetzung von Staubpartikeln. Die Partikelkonzentration ändert sich im zeitlichen Verlauf dieser Prozesse. Zur Berechnung der mesosphärischen Chemie und des Transports von Wasserdampf sowie zur Berechnung der Mikrophysik einzelner Eisteilchen benötigt MIMAS Wind- und Temperaturfelder sowie Luftdrücke und Luftdichten von LIMA, wie im vorherigen Abschnitt beschrieben. Diese werden stündlich aktualisiert. Die MIMAS Modellkonfiguration mit den assimilierten ERA-40 Daten bzw. den operationellen Analysen in LIMA wird ebenfalls REF genannt (siehe Abschnitt 3.1.1). Entsprechend heißt die Konfiguration des Eismodells mit der LIMA-Version, die ERA-Interim Reanalysen einbindet, LIH5. Die explizieten Unterschiede zwischen den beiden Modellläufen werden in Kapitel 3.3 beschrieben. Im Folgenden werden die grundsätzlichen Bestandteile (Meteorstaubteilchen und Wasserdampf), welche für die mikrophysikalischen Prozesse von Bedeutung sind, detailliert beschrieben.

#### 3.2.1 Meteorstaubteilchen

Für die mikrophysikalischen Prozesse stehen 40 Millionen Staubteilchen zur Verfügung, die als potenzielle Nukleationskeime in einer übersättigten kalten Atmosphäre wirken. Die Anzahl der Nukleationskeime ist durch die verfügbare Rechenkapazität begrenzt. Das Vorgängermodell wurde noch mit einem Ensemble von 20 Millionen Staubteilchen initialisiert (*Berger und von Zahn*, 2007). Die Steigerung in MIMAS führt zu einer besseren statistischen Analyse. Jedes der Teilchen steht stellvertretenden für 7,4·10<sup>18</sup> reale Partikel. Die Größenverteilung der Staubteilchen richtet sich nach Hunten et al. (1980). Die Radien sind zwischen 1,2 nm und 3,7 nm groß und fünf Größenklassen von 0,5 nm Breite zugeordnet. Die Verteilung der Staubpartikel auf die einzelnen Klassen ist exponentiell und ergibt sich für den REF-Lauf wie folgt: 86,5% (1,2–1,7 nm), 11,7\% (1,7–2,2 nm), 1,7% (2,2–2,7 nm), 0,2% (2,7–3,2 nm) und 0,02% (3,2–3,7 nm). Da die genaue MSP-Anzahlendichte und Größenverteilung noch unbekannt sind (siehe Kapitel 2.3), wurden in Anlehnung an Modellstudien von *Megner et al.* (2006) auch kleinere Radien als mögliche Nukleationskeime angenommen. Dabei bleibt die exponentielle Verteilung der Partikel auf diskrete Klassen erhalten. Somit ergeben sich im LIH5-Modelllauf Radien zwischen 0,9 nm und 3,3 nm. Die anfängliche Domäne der Staubpartikel ist geografisch beschränkt, um Rechenzeit zu sparen. Sie ist längenunabhängig und erstreckt sich in meridionaler Richtung von 55°N/S bis 90°N/S. In der Vertikalen wird die Staubinitialisierung ebenfalls in einigen Modellläufen abgewandelt und ist  $\pm 1$  km um die Mesopausenhöhe oder für einen fixen Höhenbereich von 85 bis 86 km Höhe definiert. Die verwendete Staubinitialiserung geht von einer Gleichverteilung entlang eines Breitengrades aus, so dass die Anzahl an Staubteilchen pro Gittervolumen gleich ist.

Die numerische Transportmethode bezieht sich auf ein Lagrange-Schema, das auf alle Teilchen angewendet wird, indem die spezifische Trajektorie jedes einzelnen Teilchens berechnet wird. Durch den 3D-Transport gelangen einige Staubpartikel auch an den Rand der Modelldomäne. In diesem Fall werden Staubpartikel wieder an eine zufällige Position innerhalb der Anfangsstaubdomäne relokalisiert. Dies sorgt für einen quasi-stabilen Zustand permanent verfügbarer Staubpartikel während der gesamten Saison.

#### 3.2.2 Wasserdampf in der PMC-Saison

Die Modellierung der Wasserdampfbildung im Modell erfordert eine sehr detaillierte Beschreibung der chemischen und dynamischen Prozesse. Aufgrund dieser Komplexität wird in MIMAS auf eine Parametrisierung der Wasserdampfbildung zurückgegriffen. Im Modell wird der Wasserdampf durch die dynamischen Felder transportiert, durch turbulente Diffusion ausgebreitet und durch Photodissoziation aufgrund solarer ultravioletter Strahlung reduziert (Abb. 3.1). Der Transport folgt dem Advektionsalgorithmus nach Walcek (*Walcek und Aleksic*, 1998; *Walcek*, 2000). Damit wird die anfängliche Klimatologie über 10 Tage an reale Gezeitenvariationen angepasst, wobei die Simulation bereits 10 Tage vor der ersten Eisbildung gestartet wird. Des Weiteren wird mit dem Advektionsalgorithmus die Umverteilung des Wasserdampfs durch die Interaktion mit den Eisteilchen berücksichtigt (*Berger und von Zahn*, 2002). Zudem wird der Wasserdampf in MIMAS kontinuierlich durch turbulente Eddy-Diffusion vermischt. Dies wird durch das zweite Gesetz von Fick beschrieben:

$$\frac{\partial c}{\partial t} = K_{\rm zz} \cdot \nabla^2 c, \qquad (3.1)$$

wobei c die Konzentration des Tracers, hier dementsprechend die Anzahl der Wasserdampfmoleküle, beschreibt. Der Diffusionskoeffizient  $K_{zz}$  wurde aus Raketenversuchen mit Ionisationsmessgeräten über Andoya in Nordnorwegen für Sommerbedingungen abgeleitet (*Lübken*, 1997) und ist zeitunabhängig (*Berger und von Zahn*, 2002).

Die Reduzierung des Wasserdampfs wird im Modell mittels der Photodissoziationsrate des Wasserdampfes  $P_{\text{Rate}}$  durch den solaren Lyman- $\alpha$ -Fluss ausgedrückt (*Berger und von Zahn*, 2002):

$$P_{\text{Rate}}(z,\chi) = \phi_{\infty} \cdot \sigma_{\text{H}_{2}\text{O}} \cdot R_{\text{M}}(z,\chi) \cdot X_{\text{H}_{2}\text{O}}(z), \qquad (3.2)$$

 $\phi_{\infty}$  steht für die Sonneneinstrahlung am oberen Rand der Atmosphäre bei einer Wellenlänge von 121,56 nm (Lyman- $\alpha$  Linie). Der Photodissoziationsquerschnitt ( $\sigma_{\rm H_2O}$ ) und ein Reduktionsfaktor ( $R_{\rm M}$ ), der aus *Chabrillat und Kockarts* (1997) entnommen wurde sowie die Molekülanzahl pro cm<sup>3</sup> ( $X_{\rm H_2O}$ ) gehen ebenfalls in Formel 3.2 mit ein. Die Gleichung ist abhängig von der Höhe (z) und dem solaren Zenitwinkel ( $\chi$ ). Anschließend erfolgt wieder die Umrechnung in das Wasserdampf-Mischungsverhältnis.

In Kombination mit dem Eulerschen Wasserdampftransport, der Wasserdampfsenke infolge der Photolyse und der Interaktion mit Eispartikeln (Gefriertrockung) kommt es zu einer Umverteilung des Wasserdampfs. Die resultierenden Wasserdampfkonzentrationen stimmen dabei gut mit Beobachtungen überein (*Hartogh et al.*, 2010). Der Gefriertrocknungseffekt bezeichnet den Einfluss von Eispartikeln auf die Wasserdampfverteilung. Dazu zählt die Anlagerung von Wasserdampf während der Nukleation, das Wachstum und die Freisetzung bei der Sublimation in niedrigeren Höhen (*Lübken et al.*, 2009b). Der Prozess der Gefriertrocknung findet bis zum Ende der PMC-Saison statt.

#### 3.2.3 Nukleation, Wachstum und Transport

Auf Grund der hohen Komplexität und den noch starken Unsicherheiten in den mesosphärischen Nukleationsprozessen wird im Modell auf Parametrisierungen und vereinfachte Annahmen zurückgegriffen. MIMAS geht von einer klassischen heterogenen Nukleation ohne Ionenfluss aus. Es werden folgende Annahmen gemacht:

- kugelförmige Staub-Eisteilchen,
- Größenverteilung der Staubteilchen nach Hunten et al. (1980),
- Kontakt parameter  $m_{\rm K} = 0$
- Akkommodationskoeffizient a = 0.5
- Kondensationskoeffizient  $\alpha = 0.83$

Die letzten drei Parameter kennzeichnen die Anlagerung von Wasserdampf an Staubund Eispartikeln. Der Kontaktparameter beschreibt, wie gut der entstehende Eiskristall mit der Oberfläche des Substrats interagiert und ist bei der Nukleation relevant. Der Akkommodationskoeffizient ist bei der Berechnung des Temperaturunterschieds zwischen Partikel und Umgebung von Bedeutung. Er gibt an, welcher Anteil des zur Einstellung des thermischen Gleichgewichts nötigen Energieaustausches tatsächlich stattgefunden hat. Für das Wachstum der Partikel spielt der Kondensationskoeffizient eine Rolle. Dieser beschreibt die Wahrscheinlichkeit, dass ein freies Wassermolekül auf der Oberfläche des Eispartikels haften bleibt (*Berger und von Zahn*, 2002). Die Anlagerung von Wasserdampf an Staub- und Eispartikeln erfolgt in Regionen mit Übersättigung. Im Modell wird die Sättigung explizit ermittelt und es erfolgt eine Abfrage, ob eine Übersättigung vorherrscht. Nur bei einer Übersättigung kann ein Eis-Staubteilchen nukleieren bzw. anwachsen. Im
$$p_{\rm H_2O} = 10^{-6} \cdot X_{\rm H_2O} \cdot p, \tag{3.3}$$

wobei p über die ideale Gasgleichung mit m als Masse der Luft und M als molare Luftmasse sowie der universellen Gaskonstante R, der Temperatur T und dem Wasserdampfvolumen V bestimmt wird:

$$p = \frac{m}{M} \cdot R \cdot T \cdot \frac{1}{V}.$$
(3.4)

Die Berechnung des Sättigungsdrucks  $(p_{sat})$  nach *Skinner und Sambles* (1972) bezieht den Kelvineffekt mit ein:

$$p_{\text{sat}} = p_{\text{glg}} \cdot \exp(\frac{2 \cdot m_{\text{H}_2\text{O}} \cdot \sigma}{k \cdot \rho_{\text{eis}} \cdot T \cdot r}), \qquad (3.5)$$

mit  $m_{\rm H_2O}$  für die molekulare Masse von Wasser, k als Boltzmann-Konstante und  $\rho_{\rm eis}$  für die Eismassendichte. Der Gleichgewichtsdampfdruck über einer ebenen Eisfläche  $p_{\rm glg}$  wird mit der Formel nach Murphy und Koop (2005) berechnet:

$$p_{\rm glg} = \exp(9,550426 - \frac{5723,265}{T_{\rm p}}) + 3,53068 \cdot \log(T_{\rm p}) - 0,00728332 \cdot T_{\rm p}.$$
 (3.6)

 $T_{\rm p}$  beschreibt die Temperatur der Eispartikel. Durch Strahlungsabsorption erwärmen sich die Eispartikel und weisen eine höhere Temperatur als die Temperatur der Umgebungsluft auf (*Eidhammer und Havnes*, 2001). Die Temperaturdifferenz zwischen dem Eisteilchen und der Umgebung kann durch folgende Beziehung ausgedrückt werden:

$$\Delta T = T_{\rm p} - T \propto \frac{r}{a \cdot n_{\rm Luft}},\tag{3.7}$$

wobei *a* der Akkomodationskoeffizient und  $n_{\text{Luft}}$  die Anzahldichte der Luftmoleküle ist. Der Akkomodationskoeffizient beschreibt die Effizienz der thermischen Energieübertragung vom Eispartikel auf die Umgebungsluft und kann Werte zwischen *Null* und *Eins* annehmen (*Rapp und Thomas*, 2006). Er ist derzeitig ein schlecht bekannter Parameter und weder experimentell noch theoretisch bewiesen. In MIMAS wird für den Akkomodationskoeffizienten ein Wert von a = 0.5 (*Kiliani*, 2014) und somit ein moderater Energietransfer vom Eisteilchen zum Luftmolekül angenommen. Des Weiteren geht die Oberflächenspannung über einer ebenen Eisfläche  $\sigma_{\infty}$  nach *Hale und Plummer* (1974) in die Berechnung des Sättigungsdrucks mit ein. Diese Oberflächenspannung ist wie folgt definiert:

$$\sigma_{\infty} = 0,141 - 1,5 \cdot 10^{-4} \cdot T. \tag{3.8}$$

Diese wird anschließend in die Bestimmung der Oberflächenspannung der Grenzfläche zwischen Eis und Wasserdampf  $\sigma$  mit einbezogen (*Tolman*, 1949):

$$\sigma = \frac{\sigma_{\infty}}{1 + \frac{2\cdot\delta\cdot10^{-9}}{r}}.$$
(3.9)

Hier fließt zusätzlich ein empirischer Faktor  $\delta$  von  $1.5 \cdot 10^{-10}$  m mit ein (*Turco et al.*, 1982).

In MIMAS beruht die Nukleation auf der Theorie des kritischen Radius (z.B. Turco et al., 1982; Berger und von Zahn, 2002; Berger und Lübken, 2015), d.h. es gibt eine minimale Partikelgröße, bei der ein Eisteilchen unter mesosphärischen Bedingungen in Regionen mit Ubersättigung gebildet werden kann. Der kleinste Radius eines Nukleationskeims, bei dem in MIMAS Eisbildung stattfinden kann, ist 0,9 nm (siehe Kapitel 3.2.1). Die Nukleationsrate ist abhängig vom Kontaktparameter  $m_{\rm K}$ . Die Modellstudien von Wilms et al. (2016) zeigen, dass eine Änderung des Faktors von 0,95 auf 0,93 bereits eine Verkleinerung der Nukleationsrate um drei Größenordnungen bewirkt. Die Größe des Kontaktwinkels zwischen den Wassermolekülen und potenziellen mesosphärischen Eiskernen ist allerdings von sehr großen Unsicherheiten geprägt und temperaturabhängig (Rapp und Thomas, 2006; Bardeen et al., 2010; Trainer et al., 2008). Im Eismodell MIMAS wird davon ausgegangen, dass die Kerne perfekt benetzbar sind  $(m_{\rm K} = 1)$  und dass die Nukleationsrate ausreichend groß ist, so dass die Nukleation abläuft, wenn der Radius des Kerns größer als der kritische Radius ist und Übersättigung vorherrscht. Dies sind auch die Voraussetzungen, die ein weiteres Wachstum begünstigen. Bei einer Übersättigung (S > 1) liegen die Temperaturen für die vorgegebene Wasserdampfmenge unter 155 K. Die Wachstumsrate ist dabei durch (*Hesstvedt*, 1961) gegeben:

$$\frac{dr}{dt} = \frac{\alpha}{\rho_{\rm Eis}} \sqrt{\frac{M}{2\pi k T_{\rm p}}} (p_{\rm H_2O}(r) - p_{\rm sat}(r)) = \frac{\alpha}{\rho_{\rm Eis}} \sqrt{\frac{M}{2\pi k T_{\rm p}}} p_{\rm sat}(r) (S(r) - 1), \qquad (3.10)$$

mit einem Kondensationskoeffizienten von  $\alpha = 0.83$  (Gadsden und Schröder, 1989).

Innerhalb eines Zeitschrittes von 45 s erfolgt die Berechnung des 3D-Transportes eines jeden Eis-Staubteilchens durch den Hintergrundwind, die Sedimentationsgeschwindigkeit und die turbulente Partikeldiffusion. Die Sedimentationsgeschwindigkeit  $w_s$  für die Staubund Eisteilchen ist von *Reid* (1975) abgeleitet:

$$w_{\rm s} = -\frac{g \cdot \rho_{\rm Eis} \cdot r}{2N_{\rm atm}} \sqrt{\frac{\pi}{2 \cdot M_{\rm atm} \cdot k \cdot T}} \,. \tag{3.11}$$

Sie hängt vom Radius des Eispartikels, sowie von der Dichte und Temperatur der Umgebungsluft ab. Die Erdbeschleunigung g für die Mesosphäre ist mit  $9,55 \text{ m/s}^2$  (*Berger und von Zahn*, 2002) gegeben.  $M_{\text{atm}}$  ist die molekulare Masse der Luft und  $N_{\text{atm}}$  die Anzahldichte der Luftmoleküle. Die Geschwindigkeiten der turbulenten Durchmischung zeigen

ein chaotisches Verhalten, weshalb die Partikeldiffusion in MIMAS als Zufallsbewegung behandelt wird.

Eisformen wie Platten oder Nadeln können die Fallgeschwindigkeit, Wachstumsrate und den Kelvin-Effekt beeinflussen und sich auf die Helligkeit auswirken (z.B. *Kiliani*, 2014; *Baumgarten*, 2001; *Turco et al.*, 1982). In der Sensitivitätsstudie von *Kiliani* (2014) wurden aber nur Platten oder Nadeln mit verschiedenen Axialverhältnissen untersucht, andere Formen oder eine Mischung aus Platten und Nadeln sind ebenfalls denkbar (*Kiliani et al.*, 2015). Derzeitig gibt es nur vereinzelte Studien über nicht-sphärische Teilchen in der Mesosphäre. Beobachtungen deuten auch darauf hin, dass das Achsenverhältnis möglicherweise nicht konstant ist (*Hervig et al.*, 2009b). Zudem ist der physikalische Mechanismus hinter dem nicht-sphärischen Wachstum derzeit unbekannt und könnte auf die Eiskristallstruktur oder die Ladung der Eispartikel zurückzuführen sein (*Wilms*, 2016). Aufgrund all dieser Unsicherheiten und einem wesentlich höheren Rechenaufwand für Mikrophysik und Streuung von Licht bei asphärischen Teilchen werden die Berechnungen für diese Arbeit mit kugelförmigen Partikeln durchgeführt. Die Streuung an sphärischen Teilchen wird durch die Mie-Theorie beschrieben.

### 3.3 MIMAS Modellausgabe

Für die Nordhemisphäre wird die Mikrophysik an einzelnen Eisteilchen auf ihren Trajektorienbahnen vom 15. Mai bis 25. August und auf der Südhemisphäre vom 15. November bis 25. Februar für einen Höhenbereich von 77,8 bis 94,1 km mit einer vertikalen Auflösung von 100 m berechnet. Dabei ist MIMAS auf die mittleren und polaren Breiten (37,5 °N/S bis 90 °N/S) mit einer 1°-Auflösung für die Felder der Hintergrundatmosphäre in meridionaler Richtung begrenzt. Die Bedingungen in der mittleren Atmosphäre erlauben keine Eisbildung außerhalb dieser begrenzten Region. In longitudinaler Richtung ergeben sich bei 3°-Schritten 120 Level. Die Trajektorienberechnungen umfassen Informationen über Größe, Position und Form der einzelnen 40 Millionen Partikel. Zusätzlich erhält man durch den Lagrangeschen Ansatz Informationen über den Lebenszyklus aller Eis- und Staubteilchen. Damit können Fragestellungen über den Entstehungsort, das Alter von Eisteilchen oder den Wachstumsverlauf untersucht werden (*Kiliani*, 2014).

Die einzelnen Eisteilchen bilden zusammen Eiswolken mit großräumigen Strukturen, die statistische Analysen der Eisparameter erlauben. Die Analysen beziehen sich auf bestimmte Eisschichtparameter wie den zeitlichen Verlauf, die mittlere Höhe, die Helligkeit und die Auftrittswahrscheinlichkeit als Funktion von Saison, Höhe und Breite. Die Ausgabe der Parameter erfolgt pro Volumenelement (cm<sup>-3</sup>). Dafür werden die 40 Millionen Teilchen auf eine wahre physikalische Einheit umgerechnet, was über eine universelle Konstante realisiert wird. Aus der modellierten Eisverteilung lassen sich alle beobachtbaren Größen von Eiswolken wie mittlerer Radius, Eismassendichte, Eisgehalt, Anzahldichte der Eisteilchen, Albedo für verschiedene Wellenlängen sowie Rückstreukoeffizient ableiten, die in einem sogenannten  $\beta$ -File ausgegeben werden.

### 3.4 Zusammenfassung

Das mikrophysikalische Eismodell MIMAS wurde speziell für polare Mesopausenbedingungen im Sommer entwickelt. Die Wechselwirkung der drei Modellbestandteile - Staubteilchen, Eispartikel und Wasserdampf - wird in vorgegebenen atmosphärischen Hintergrundfeldern berechnet. Die Nukleation, das Wachstum, die Koagulation und der Transport durch den Hintergrundwind, Diffusion und Sedimentation werden in jedem Zeitschritt für eine dreidimensionale Modelldomäne berechnet, die den Höhenbereich zwischen 77,8 km und 94,1 km umfasst. Die in dieser Arbeit verwendeten zwei Modellkonfigurationen (REF und LIH5) basieren auf unterschiedlichen atmosphärischen Hintergrundfeldern, aber auch auf Änderungen im Eismodell selbst. Dabei wurden die Staubinitialisierung, der Wirbeldiffusionskoeffizient, die Wasserdampfmenge und die Staubverteilung verändert. Der REF Lauf ist der sogenannte Referenzlauf, der bereits für vorangegangene Studien, wie zum Beispiel in *Berger und Lübken* (2015), verwendet wurde. LIH5 ist die neuere Modellversion und beschreibt eine Weiterentwicklung von REF. Folgende Tabelle gibt einen Überblick über die Unterschiede der Modellläufe:

Parameter	Grundmodell	REF	LIH5
Zeitraum	LIMA/MIMAS	1961 - 2013	1979 - 2009
Reanalyse	LIMA	ERA-40,	ERA-Interim
		Operational	
Ozon	LIMA	WMO-Report;	SBUV
		SBUV ab $2009$	
Schwerewellen-	LIMA	keine	nach <i>Yiğit et al.</i>
Parametrisierung			(2008)
Staubinitialisierung	MIMAS	$85-86\mathrm{km}$	Mesopause $\pm 1 \mathrm{km}$
$K_{zz}$	MIMAS		$< 85 \mathrm{km}$ konst.
$H_2O$	MIMAS	100%	Reduktion um $10\%$
Staubverteilung	MIMAS	$1,\!2\!-\!3,\!7{ m nm}$	$0,9-3,3{ m nm}$
(Schrittweite)		(a 0,5 nm)	(a 0,5 nm)

Table 3.1: Unterschiede der Modellläufe REF und LIH5, die in dieser Arbeit verwendet wurden.

## Chapter 4

# Modellsimulationen von Atmosphärenund Eisparametern

### 4.1 Atmosphärische Hintergrundfelder

Die Temperatur und der Wasserdampf sind von übergeordneter Bedeutung für die Eisbildung in der Mesopausenregion. Im Folgenden wird der mittlere Hintergrund von Temperatur und Wind sowie die Verteilung des nicht im Eis gebundenen Wasserdampfs vorgestellt. Dieser Wasserdampf ist streng genommen in der PMC-Saison nicht den Hintergrundfeldern zuzuordnen, sondern bereits eine Folge der PMC-Bildung. Er wird dennoch in den folgenden Kapiteln betrachtet, da der umverteilte Wasserdampf für die weitere Eisbildung und das Wachstum der Teilchen als Hintergrundparameter zur Verfügung steht.

#### 4.1.1 Mittlere atmosphärische Hintergrundbedingungen

Während des nordhemisphärischen Sommers treten PMCs typischerweise von Ende Mai bis Mitte August auf (z.B. Thomas und Olivero, 1989; Gadsden und Schröder, 1989; Hartogh et al., 2010; Hervig et al., 2013). Abbildung 4.1 und 4.2 zeigen monatliche und zonal gemittelte Temperatur- und Wasserdampffelder ( $H_2O$ ) einzelner Monate der PMC-Saison 2009. Diese geben den thermischen Zustand und den Feuchtigkeitsgehalt im Bereich des Eismodells wieder. Zunächst erfolgt eine allgemeine Beschreibung der Temperatur- und Wasserdampffelder. Von den verfügbaren Jahren 1979–2013 wurde das Jahr 2009 für die Analyse gewählt, da sowohl Lidar- als auch Satellitendaten für den späteren Vergleich von PMC-Parametern für diesen Zeitraum vorhanden sind. Am Anfang der Saison (Abb.4.1a) ist der mittlere Sättigungsgrad noch kleiner als Eins. Dieser Wert teilt den abgebildeten Höhenabschnitt in Bereiche des Wachstums und der Sublimation von Eispartikeln ein. Wann immer ein Teilchen sich im Bereich einer Übersättigung befindet, kann es wachsen, unterhalb von S = 1 setzt die Sublimation ein. Die Temperaturen nehmen im dargestellten Höhenbreitenschnitt vom Mai bis Juli ab und anschließend im August wieder zu. In Abbildung 4.1c ist zu sehen, dass PMCs in der Hauptsaison polwärts von 54°N existieren



Figure 4.1: Zonale Mittel der Temperaturen modelliert mit LIMA (REF) von mittleren bis polaren Breiten für Mai, Juni, Juli und August 2009. Die Mesopausenhöhe ist als gestrichelte und der Sättigungsbereich (S = 1) als durchgezogene Linie gezeigt.

können. Später wird gezeigt, dass sich der übersättigte Bereich durch die Variabilität der Sättigungsbedingungen innerhalb eines Tages weiter nach Süden ausdehnen kann. Die vertikale Ausdehnung der übersättigten Region nimmt polwärts zu, was mit den geringen Temperaturen in polaren gegenüber mittleren Breiten zusammenhängt. D.h. es erhöht sich auch der Bereich potentieller Eisbildung, was auf eine Zunahme der Eismassen in höheren Breiten hindeutet. Damit verbunden verstärkt sich erwartungsgemäß der Effekt der H<sub>2</sub>O-Umverteilung im Juli. Die Verteilung des H<sub>2</sub>O wird durch die Eismikrophysik modifiziert. Somit sinkt die  $H_2O$ -Konzentration oberhalb von  $\sim 85 \text{ km}$  im Bereich der Eisnukleation (siehe Abb. 4.2c). Dies führt zu Regionen mit erhöhter Dehydration. Das  $H_2O$ -Mischungsverhältnis wird gegenüber den Werten im Mai bei 69°N um etwa 1 ppmv  $(\sim 87 \text{ km})$  reduziert. In Polnähe sind die H<sub>2</sub>O-Werte im Juli bis zu 1,5 ppmv geringer. In der Sublimationszone der Eisteilchen ( $\sim$ 82 km) erhöht sich die Hydration, so dass sich das H<sub>2</sub>O-Mischungsverhältnis im Juli in den polaren Breiten um etwa 10 ppmv gegenüber Mai verstärkt. Infolge des Transports durch vertikale Aufwinde und turbulente Diffusion wird diese zusätzliche H<sub>2</sub>O-Menge sporadisch in höhere Schichten umverteilt. Das bedeutet, dass eine erhöhte Eisbildung durch diesen selbstverstärkenden Prozess verursacht wird, was auch durch Satellitenmessungen von  $H_2O$  in PMC-Höhen bestätigt wird (*Hervig et al.*, 2015). Die Anreicherung von  $H_2O$  erfolgt im Juli auch in Höhen, in denen eine mittlere Sättigung kleiner als *Eins* vorzufinden ist. Dies ist mit der residuellen Zirkulation und dem damit verbundenen stärkeren, aufwärts gerichteten Massenfluss im Sommer zu begründen. Des Weiteren können kleine Eispartikel aufgrund des Kelvin-Effekts bei den sehr tiefen Temperaturen im Juli auch bereits in größeren Höhen sublimieren als größere Eisteilchen.



Figure 4.2: Wie Abb. 4.1 für Wasserdampfmischungsverhältnisse.

#### 4.1.2 Auswirkung verschiedener Modellkonfigurationen

LIMA liefert Hintergrundfelder für das Eismodell MIMAS und bindet europäische Reanalysen des ECMWF in den unteren Atmosphärenschichten ein (siehe Kapitel 3.1). Im Folgenden werden zwei Modellläufe (REF und LIH5), für die unter anderem verschiedene Reanalysedaten assimiliert wurden, analysiert. Diese Studie verfolgt zwei Ziele. Zum einen sollen die Auswirkungen verschiedener Reanalysedatensätze und die Behandlung von Schwerewellen auf die Hintergrundatmosphäre im Bereich der Eisbildung verdeutlicht und zweitens der Einfluss auf PMC-Parameter quantifiziert werden. Eine Diskussion der Unterschiede zwischen den Modellläufen LIH5 und REF erfolgt im Anhang A. Für die LIMA-LIH5 Modellsimulation werden ERA-Interim Daten assimiliert. Der REF Modelllauf verwendet ERA-40 Daten und ab 2002 auch operationelle Reanalysedaten. Aufgrund der räumlich veränderten Auflösung der Reanalysen sind unterschiedliche Ergebnisse in den LIMA Modellsimulationen zu erwarten. Bedingt durch die vertikale und horizontale Auflösung wird ein Teil des Wellenspektrums in LIMA nicht erfasst. Dies wird im LIH5-Modelllauf durch eine Schwerewellenparametrisierung nach *Yiğit et al.* (2008) zusätzlich zu der internen Variabilität, die durch die ECMWF-Daten vorgegeben wird, in LIMA kompensiert. Im REF-Lauf erfolgt keine Schwerewellenparametrisierung. Da atmosphärische Wellen die mittlere Zirkulation der Stratosphäre und Mesosphäre antreiben, resultieren Abweichungen in den dynamischen und thermischen Feldern in der Mesosphäre. Die Abbildungen 4.3–4.7 zeigen die Ergebnisse der Modellkonfigurationen REF und LIH5 sowie deren Differenzen für einen Breitenbereich von 45° bis 90°N und einen Höhenabschnitt von 80 bis 94 km. Die Gegenüberstellungen der beiden Modellläufe zeigen, dass sowohl in den Winden, als auch in den Temperaturen und im Wasserdampf Differenzen bestehen, die im Folgenden detaillierter beschrieben werden.

Im Sommer ist der zonale Wind in der Mesosphäre nach Westen ausgerichtet (Abb. 4.3), was mit dem mesosphärischen Sommerjet mit Windgeschwindigkeiten von  $\sim 60 \,\mathrm{m/s}$  bei 60°N und 80 km Höhe verbunden wird (z.B. Berger und von Zahn, 2002). Die zonale Windumkehr befindet sich etwas oberhalb der Mesopausenhöhe, so dass in der unteren Thermosphäre der zonale Wind wieder nach Osten weht. Der Wind dreht in einer Höhe über dem oberen Rand des übersättigten Gebietes auf Ost. Diese allgemeine zonale Windstruktur ist in beiden Läufen vorzufinden. Ein Vergleich mit den Windmessungen der ALOMAR MF-Radaranlage (69°N) zeigt eine sehr gute Übereinstimmung der absoluten Windwerte und der Umkehrhöhe bei etwa 90 km (Hoffmann et al., 2002) mit dem LIH5-Datensatz. Auch die Messungen mit dem Meteorradar in Nordnorwegen (69°N) und der in mittleren Breiten gelegenen Station Juliusruh (54°N) zeigen ähnliche klimatologische Werte, die mit dem LIH5-Datensatz übereinstimmen (Wilhelm et al., 2019). Im übersättigten Bereich (S > 1) existient im REF eine stärkere westwärts gerichtete Komponente im Vergleich zu LIH5 von durchschnittlich  $8 \,\mathrm{m/s}$ . Die Differenzen nehmen polwärtig ab. Die größten Windunterschiede der beiden Modellläufe sind in mittleren Breiten oberhalb von  $90 \,\mathrm{km}$  Höhe mit einer Differenz von mehr als  $30 \,\mathrm{m/s}$  vorzufinden. Diese großen Differenzen liegen außerhalb des übersättigten Bereichs.

Der meridionale Wind (Abb. 4.4) sorgt dafür, dass im Sommer kühle, feuchte Luftmassen aus dem Norden nach Süden transportiert werden, was die Eisbildung in mittleren Breiten begünstigt. Im Mai ist eine relativ stabile Schicht mit Werten zwischen 0 und -3 m/svorhanden (nicht gezeigt). Die Werte der beiden Modellläufe unterscheiden sich zwischen  $65^{\circ}$ N und 90^{\circ}N zu dieser Zeit nur um 1 bis 2 m/s. Dies gilt auch für polare Breiten im Juli, während ebenfalls unter Juli-Bedingungen im gesättigten Bereich der mittleren Breiten der meridionale Wind des LIH5-Laufs bis zu 5 m/s stärker ausgeprägt ist als im REF-Lauf.



Figure 4.3: Zonale Mittel der zonalen Winde modelliert mit LIMA REF (a) und LIH5 (b) von mittleren bis polaren Breiten für Juli 2009. Der Differenzplot (c) ergibt sich aus LIH5 minus REF. Die Mesopausenhöhe ist als gestrichelte schwarze Linie und der Sättigungsbereich (S = 1) als durchgezogene schwarze Linie gezeigt.

Er weht bei 69°N mit maximalen Windgeschwindigkeiten von etwa 4 m/s (REF) bis 6 m/s (LIH5) am oberen Rand des gesättigten Bereichs. Damit sind die Meridionalwinde in hohen Breiten etwas geringer als das klimatologische Mittel der Meteorradar-Messungen in Andenes mit bis zu 10 m/s (*Wilhelm et al.*, 2019). In niederen Breiten stimmen die meridionalen Winde des LIH5-Laufs mit den Beobachtungen in Juliusruh überein (*Wilhelm et al.*, 2019). Die geometrische Höhe der meridionalen Maximalwindwerte des LIH5-Datensatzes ist im Vergleich zu den Radarmessungen sehr ähnlich. Diese liegt in hohen Breiten bei ~ 90 km und in mittleren Breiten bei ~ 86 km.



Figure 4.4: Wie Abbildung 4.3 für meridionale Winde.

Der Mesopausenbereich ist durch stark vertikal variierende Windgeschwindigkeiten auf kurzen Zeitskalen gekennzeichnet. Messungen des vertikalen Windes in der mittleren Atmosphäre mit hoher räumlicher und zeitlicher Auflösung sind aufgrund der technischen Herausforderungen schwer durchzuführen (*Hildebrand et al.*, 2017). Deshalb sind bisher keine Klimatologien der vertikalen Winde in polaren Breiten dokumentiert. Unterhalb der Mesopause ist der vertikale Wind nach oben gerichtet (positive Werte). Der Auftrieb im übersättigten Bereich weist Werte von weniger als 35 mm/s für beide Modellläufe auf. Die vertikalen Winde sind für den LIH5-Lauf im Mai (nicht gezeigt) als auch im Juli von mittleren Breiten bis zu etwa 85°N gegenüber dem REF-Lauf um nur 5 mm/s stärker ausgeprägt (Abb. 4.5). Die stärksten vertikalen Aufwinde werden im REF-Lauf in Polnähe mit Geschwindigkeiten von mehr als 50 mm/s modelliert. Die Windstruktur in hohen Breiten (polwärts ab 86°N) dieses Datensatzes deutet jedoch auf einen Artefakt hin und wird für die Analysen der natürlichen Variabilität in den nächsten Kapiteln nicht berücksichtigt.

Zusammenfassend ergeben sich in der Mesosphäre für die LIH5 Modellsimulationen gegenüber dem REF-Lauf ein etwas schwächerer zonaler Grundstrom, stärkere Winde Richtung Süden und leicht größere, positive Vertikalwinde. Für den LIH5-Modelllauf zeigt sich eine bessere Übereinstimmung mit Beobachtungsdaten.



Figure 4.5: Wie Abbildung 4.3 für vertikale Winde.

Abbildung 4.6 zeigt Temperaturen des REF und LIH5-Laufs. Im Allgemeinen sind die Temperaturunterschiede im Monat Juli im Bereich der Übersättigung geringer als 4 K. Nur am oberen Rand der Übersättigung weist der LIH5-Lauf in der Polregion bis zu 8 K geringere Temperaturen gegenüber dem REF-Datensatz auf (Abb. 4.6). Des Weiteren ist die Mesopausenhöhe im LIH5-Datensatz (90 km) am Anfang der PMC-Saison, insbesondere in der Polregion, bis zu ~4 km höher gelegen (nicht gezeigt). Im Laufe der Saison nähern sich die Mesopausenhöhen der beiden Datensätze an, so dass der breitenabhängige Verlauf im Juli sehr ähnlich ist.

Unter Annahme eines Temperaturgradienten von etwa -6,1 K/km in typischen PMC-Höhen (*Lübken et al.*, 2007) und einer vertikalen Windgeschwindigkeit von etwa 15 mm/s (Abb. 4.5) ergibt sich eine adiabatische Abkühlungsrate von etwa 7,9 K pro Tag. Dieser Wert ist um ein Vielfaches größer als die Strahlungskühlrate durch das  $CO_2$ , die bei 1-2 K pro Tag liegt (z.B. *Dickinson et al.*, 1987; *Vogel et al.*, 1989). Dies impliziert eine dominierende Wärmeübertragung durch vertikale adiabatische Strömung in der oberen Atmosphäre gegenüber einem strahlungsbasierenden Wärmeübergang durch das  $CO_2$ , die als mesosphärische Kühlung agiert.



Figure 4.6: Wie Abbildung 4.3 für Temperaturen.

Für beide Modellläufe wird zum Beginn der Eissimulation die gleiche Wasserdampfverteilung in MIMAS verwendet. Während der MIMAS-Simulation wird der Wasserdampf durch die Winde transportiert. Durch die stärkeren vertikalen Winde im LIH5-Lauf gegenüber dem REF-Lauf ist Eintrag des Wasserdampfs in die Mesosphärenregion stärker als im Referenzdatensatz. Im Höhenbereich zwischen 84 und 90 km haben beide Modellläufe fast identische Werte (Abb. 4.7). Unterhalb dieser Höhe hingegen ist das Juli-Profil im REF-Lauf mit mehr H<sub>2</sub>O angereichert. Dieser scheinbare Widerspruch zu dem erhöhten Wasserdampftransport in die Mesosphäre im LIH5-Lauf wird im Unterkapitel 4.2.2 geklärt. Das maximale Wasserdampfmischungsverhältnis im dargestellten Höhenbereich beträgt 11 ppmv und befindet sich bei ~82 km Höhe. Darin spiegelt sich zum einen wieder, wie Wasserdampf durch das Wachstum von PMC-Partikeln und durch Sublimation in niedrigeren Höhen neu verteilt wird und zum anderen deutet dies darauf hin, dass im LIH5-Lauf mehr Wasserdampfmoleküle in den Eiswolken gebunden werden.

Die geringeren Temperaturen in LIH5 verbunden mit einem größeren H<sub>2</sub>O-Eintrag in die Mesosphäre sowie einer stärkeren meridionalen Windkomponente in Richtung Süden resultieren in einen größer ausgedehnten, übersättigten Bereich im Juli (Abb. 4.3-4.7). Die Berechnung des übersättigten Bereichs (S > 1, eingeschlossene Fläche der durchgezogenen schwarzen Konturlinie) im dargestellten Höhenbreitenschnitt erfolgt mit dem "Satz von Green", mit dem sich ein ebener Flächeninhalt durch ein Kurvenintegral bestimmen lässt (z.B. *Walter*, 1991). Dabei zeigt sich, dass diese Fläche potentieller Eisbildung für den LIH5-Modelllauf um etwa 12 % größer ist als die Fläche für den REF-Lauf.



Figure 4.7: Wie Abbildung 4.3 für Wasserdampfmischungsverhältnisse.

In den folgenden Kapiteln werden weiterhin beide Modellversionen betrachtet. Damit sollen bereits vorhandene Parametrisierungen im Modell detailliert hinterfragt und die Modellentwicklung voran getrieben werden. Ziel ist letztendlich die Implementierung neuer Modellkomponenten zur Optimierung des Eismodells.

#### 4.1.3 Validierung von Temperatur und Wasserdampf

In Abbildung 4.8 werden die mit LIMA modellierten Temperaturprofile mit Messungen fallender Kugeln und Beobachtungen des Eisen-Lidars bei 69°N für den Monat Juli verglichen. In Lübken (1999) werden die Messungen mit fallenden Kugeln, die mittels Höhenforschungsraketen in die Mesosphäre gebracht wurden, genauer beschrieben. Die Modelldaten wurden zonal und für ein Breitenband von 65 bis 75°N gemittelt. Unterhalb von 84 km ist die mittlere thermische Struktur der LIH5-Simulation und der Raketenmessungen identisch. In typischen PMC-Höhen (~83 km) liegt die mittlere LIH5-Temperatur bei ~145 K. Der REF-Lauf weicht nur um 3 K davon ab. Tabelle 4.1 listet mittlere Mesopausenhöhen und -temperaturen von Raketen, dem Eisen-Lidar, sowie von LIMA und Satelliteninstrumenten für die Jahre 2007–2009 bei 69°N auf. Die Mesopausentemperatur des REF-Laufs ist im Höhenbereich  $79-93 \,\mathrm{km}$  durchschnittlich  $0.5-4 \,\mathrm{K}$  höher als im LIH5-Lauf. Diese Abweichung liegt innerhalb der natürlichen Variabilität beider Datensätze. Die Mesopause des REF-Laufs weist durchschnittlich einen Wert von etwa 129 K auf und befindet sich bei etwa 88,4 km. Diese Werte sind der beobachteten Temperaturklimatologie aus Raketenmessungen bei ALOMAR im Sommer sehr ähnlich (Lübken, 1999; Schöch et al., 2008). Für das Jahr 2008 ergibt sich ebenfalls eine gute bis sehr gute Übereinstimmung der Mesopausenhöhe des LIH5-Laufs (89 km) mit den Eisen-Lidarmessungen und Satellitenbeobachtungen von SOFIE (engl.: Solar Occultation for Ice Experiment) und SABER (engl.: Sounding of the Atmosphere using Broadband Emission Radiometry). Die Mesopausenhöhen des Satelliteninstruments MLS (engl.: Microwave Limb Sounder)

sind gegenüber den anderen beobachteten und modellierten Mesopausenhöhen bis zu 1 km höher gelegen, wobei MLS eine vergleichsweise geringe vertikale Auflösung ( $\sim 3$  km) in dem dargestellten Höhenbereich aufweist. Die Variationen der Monatsmitteltemperaturen zwischen den Jahren betragen in allen PMC-Höhen 1-2 K und sind damit geringer als innerhalb einer PMC-Saison (5-9 K).



Figure 4.8: Zonale Mittel der Temperaturen von fallenden Kugeln (Raketen), Eisen-Lidarmessungen von 2008 (Fe Lidar) und LIMA bei ~ $65^{\circ}$ N für den Monat Juli. Die Modelldaten wurden über die Jahre 2007–2009 gemittelt. Die ausgewählten Fehlerbalken entsprechen der Standardabweichung der gemittelten Werte.

Datensatz	Profile	Mesopausen- höhe (km)	Mesopausen- temp. (K)
MLS 2007	5691	89.9	$138.4 \pm 8.9$
MLS 2008	6115	89.0	$130.7\pm8.5$
MLS 2009	6105	88.9	$132.0 \pm 7.7$
LIMA LIH5 2007	124	87.6	$129.5 \pm 5.9$
LIMA LIH5 2008	124	89.0	$126.3 \pm 5.7$
LIMA LIH5 2009	124	88.4	$125.8 \pm 5.7$
LIMA REF 2007	744	88.1	$129.2 \pm 5.3$
LIMA REF 2008	744	88.5	$130.5 \pm 5.2$
LIMA REF 2009	744	88.5	$128.5 \pm 5.0$
SOFIE 2007	403	87.0	$143.7 \pm 7.3$
SOFIE 2008	361	88.2	$136.4\pm6.8$
SOFIE 2009	388	88.0	$137.6 \pm 7.2$
Raketen	4	88.0	$130.2 \pm 1.6$
SABER 2008	3082	89.0	$133.5 \pm 14.2$
Fe Lidar 2008	9	89.2	$129.4 \pm 2.3$

Table 4.1: Mittlere Mesopausenhöhe, -temperatur und Standardabweichung verschiedener Beobachtungen und der LIMA Modellläufe LIH5 und REF in einem Breitenband von 65 bis 75°N im Juli.

Zur Verdeutlichung der Variabilität in den Temperaturen sind in Abbildung 4.9 jeweils 20 modellierte und beobachtete Einzelprofile im Juli 2009 gezeigt. Die Daten beziehen sich auf ein Breitenband von 65 bis 75°N. Die 20 Einzelprofile des LIH5-Laufs entsprechen dabei 20 aufeinander folgenden Höhenprofilen, immer zur vollen Stunde, hier zum Beispiel

vom 01.07.2019, 1 Uhr bis 21 Uhr für die ALOMAR Breite und Länge (69°N, 16°O). Die Modellausgabe des REF-Laufs erfolgt immer alle 6 Stunden, somit sind hier jeweils 4 Höhenprofile eines Tages für 5 aufeinander folgende Tage dargestellt. SOFIE misst 15 Höhenprofile pro Tag, d.h. mit den 20 Einzelprofilen sind 1,5 Tage in einem geografischen Bereich von  $65^{\circ}N - 75^{\circ}N$  und  $6^{\circ}O - 26^{\circ}O$  abgedeckt und SABER beobachtet in etwa 1440 Profile pro Tag, so dass die gezeigten Höhenprofile zusammen 20 Minuten entsprechen. Für SABER sind ebenfalls Höhenprofile um ALOMAR (65°N-75°N, 15°O-17°O) gezeigt. Durch die Mittlung alle Profile des Modells erscheinen die Höhenprofile in Abbildung 4.8 sehr geglättet. Die Betrachtung einzelner, nicht gemittelter Höhenprofile (Abb. 4.9) unabhängig von der unterschiedlichen zeitlichen Auflösung der Datensätze zeigt deutlich, dass die Wellensignaturen im Modell weniger ausgeprägt sind, als in den beobachteten Profilen. Auch Messungen mit dem Eisenlidar auf der Südhalbkugel und Einzelprofile der 69°N, die aus fallenden Kugeln abgeleitet wurden, zeigen dass die Temperaturvariabilität im Bereich der oberen Mesosphäre viel größer  $(\pm 10 \text{ K})$  als die Modellierungen sind (Lübken et al., 2014; Lübken, 1999). Temperaturschwankungen im Bereich von 10 K, wie sie auch in SABER und SOFIE zu sehen sind, können durch Schwerewellen induziert werden. In Kapitel 7 wird der Einfluss einer zu geringeren Wellenaktivität im Modell auf PMC-Parameter ausführlich diskutiert.



Figure 4.9: Jeweils 20 Einzelprofile im Juli 2009 der beiden Modellläufen LIH5 und REF und der Satellitenmessungen von SOFIE und SABER, die in die mittleren Profile aus Abb. 4.8 eingehen. Die durchgezogenen stärkeren Linien entsprechen den gemittelten Höhenprofilen ebenfalls aus Abb. 4.8. Weitere Details siehe Text.

Abbildung 4.10 zeigt die mit LIMA modellierten Wasserdampfprofile im Vergleich mit Satellitenmessungen von SOFIE und MLS bei  $\sim 69^{\circ}$ N für den Monat Juli. Die modellierten Wasserdampfwerte sind den Beobachtungen relativ ähnlich und weisen eine Differenz von nur 1 bis 2 ppmv auf. SOFIE zeigt wie auch die Modellsimulationen das Maximum des Wasserdampfmischungsverhältnisses zwischen 81 und 82 km, was auf die Deposition des mesosphärischen Eises zurückzuführen ist. MLS hat eine deutlich geringere vertikale Auflösung ( $\sim 3 \text{ km}$ ) im Vergleich zu SOFIE (0,2 km) und den Modelldaten (0,12 km) im dargestellten Höhenbereich, wodurch das Wasserdampfmischungsverhältnis bei 81 km von Unsicherheiten geprägt ist. Bei gleicher vertikaler Auflösung wie MLS würde sich das Maximum im REF-Lauf um 2 ppmv und im LIH5-Lauf um etwa 1 ppmv verringern und mit MLS identisch sein. Die MIMAS Modellläufe zeigen beide geringe Wasserdampfmischungsverhältnisse zwischen 84 und 90 km und leicht höhere Werte bei etwa 82 km gegenüber den Satellitendaten. Dies deutet auf eine etwas stärkere Hydration und eine stärkere Sublimation im Modell hin. Dennoch sind die Daten angesichts der großen Schwierigkeiten von Wasserdampfmessungen in Höhen über 80 km (siehe Kapitel 2.2) und unter Berücksichtigung der Standardabweichung gut mit den Messungen vergleichbar. Bei den SOFIE-Messungen müssen die von der Untersuchungsmethode verursachte Verzerrungen (Bias) durch die Temperatur berücksichtigt werden, da die Ableitung der Wasserdampfkonzentrationen temperaturabhängig ist (*Rong et al.*, 2016).



Figure 4.10: Zonale Mittel der Wasserdampfmischungsverhältnisse von MLS, SOFIE und von MIMAS für ein Breitenband bei ALOMAR  $(65-75^{\circ}N)$  im Monat Juli. Die ausgewählten Fehlerbalken entsprechen der Standardabweichung der gemittelten Werte über die Jahre 2007–2009.

### 4.2 Modellierung von PMC-Strukturen

MIMAS erlaubt es, die Entstehung und Entwicklung von Eiswolken, die durch verschiedene Eisparameter beschrieben werden, im Detail zu untersuchen. In den folgenden Abschnitten werden die mittleren Eigenschaften der PMC-Schicht, wie sie mit MIMAS LIH5 simuliert werden, untersucht. Anschließend wird der modellierte Eisgehalt der PMCs mit unterschiedlichen Hintergründen des LIH5- und REF-Laufs in Relation gesetzt, wobei eine Analyse der PMC-Abhängigkeit von Temperatur und Wasserdampf erfolgt.

#### 4.2.1 Mittlerer Zustand von Eisschichten

Abbildung 4.11 zeigt die gemittelte Auftrittswahrscheinlichkeit von PMCs, mit einem Grenzwert von 1 cm<sup>-3</sup> für die Anzahldichte der Eisteilchen, als Funktion von geometrischer Höhe und geografischer Breite. Es ist eine Zunahme der PMC-Auftrittswahrscheinlichkeit von mittleren zu polaren Breiten zu sehen. Zudem zeigt sich, dass die modellierten Eispartikel auch südwärts von 47°N in einer Höhe von 81 bis 86 km auftreten können, während im Monatsdurchschnitt eine Übersättigung nur bis 54°N geografischer Breite zu finden ist. Die Dokumentation von visuellen Beobachtungen mit dem bloße Auge (z.B. Avaste et al., 1980b) und Bilder von Kameranetzwerken (z.B. Baumgarten und Müller, 2009) bestätigen wiederholte Beobachtungen von PMCs in niederen Breiten um 45°N. Sogar bei 41,7°N konnten PMCs beobachtet und durch Messungen mit dem Lidar eindeutig nachgewiesen werden (Wickwar et al., 2002). Gerding et al. (2013) haben herausgefunden, dass südwärts gerichtete Winde mit den gelegentlichen PMC-Ereignissen in südlicheren Breitengraden im Zusammenhang stehen. Durch den meridionalen Wind werden Eisteilchen von Norden in niedere Breiten transportiert, wo sie auch bei einer mittleren Sättigung unter Eins kurzweilig bestehen können. Ein weiterer Aspekt ist die Variation der Hintergrundtemperatur und des Wasserdampfes in Abhängigkeit von der Tageszeit, welche zur Übersättigung südwärts von 47°N führen kann. Die Variationen der Sättigung innerhalb eines Tages erlauben im Allgemeinen auch die Existenz von Eisschichten zwischen 80 und 82 km außerhalb des Bereiches der mittleren Übersättigung.



Figure 4.11: Zonale Monatsmittel der Auftrittswahrscheinlichkeit von Eisteilchen modelliert mit MIMAS LIH5 mit mindestens 2 Teilchen pro cm<sup>3</sup> für Juli 2009. Mesopausenhöhen (gestrichelte Linie) und Sättigungsbedingungen (S = 1; durchgezogene Linie) sind äquivalent zu Abbildung 4.3.

In Abbildung 4.12 sind zonal gemittelte Monatsmittel (Juli) von Eisanzahldichte, Eisradius, Eismassendichte (IWD) und Rückstreukoeffizient bei einer Wellenlänge von 532 nm gezeigt. Die größte Eisanzahldichte (900 bis  $1000 \text{ cm}^{-3}$ ) der Modellierung ist etwas unterhalb

der Mesopausenhöhe vorzufinden(Abb. 4.12a). Das ist die Höhe, in der das größte Sättigungsverhältnis auftritt und die höchste Wahrscheinlichkeit einer Nukleation besteht. Sie dient als Reservoir für kleine Eispartikel.

Generell nimmt der mittlere Radius (Abb. 4.12b) vom oberen Rand des Sättigungsbereichs nach unten und in Süd-Nord-Richtung polwärtig zu. Aus Abbildung 4.12b wird ebenfalls ersichtlich, dass in Höhen über 84 km der mittlere Radius der Eispartikel meist unter 10 nm bleibt. Durch Deposition von Wasserdampfmolekülen erfährt ein Teil dieser kleinen Eispartikel ein verstärktes Wachstum. Die Zunahme der Partikelmasse verstärkt die Sedimentation nach unten. Mit abnehmenden Höhen steigt die Menge an freien Hintergrundwassermolekülen exponentiell an, da die Luftdichte exponentiell zunimmt. Somit wird das Wachstum des Eises während der Sedimentation weiter angeregt, bis Eispartikel den übersättigten Bereich verlassen. Im Allgemeinen erreicht der Radius seinen Höhepunkt am unteren Rand des übersättigten Bereichs. Zu beachten ist jedoch, dass der Mode-Radius der gesamten Partikelpopulation auch unter der Höhe einer mittleren Sättigung unter Eins erreicht werden kann. Wie später gezeigt wird, kann dies durch Variationen innerhalb eines Tages erklärt werden (siehe Kapitel 5). Der Mode-Radius gibt den am häufigsten auftretenden Radius einer Verteilung wieder, welcher bei einer Gaußverteilung dem arithmetischen Mittel entspricht. Die maximalen Eisradien liegen im Bereich von 30 bis 35 nm. Diese Werte stimmen mit den SOFIE Beobachtungen überein (*Hervig et al.*, 2009a).

Ähnlich wie die Eisradien, steigt das IWD (Abb. 4.12c) von der Mesopause mit abnehmender Höhe und von niederen zu höheren Breiten an. Dabei werden Werte von mehr als 35 g km<sup>-3</sup> am Pol erreicht, was sich mit Satellitenbeobachtungen von SOFIE deckt (*Hervig et al.*, 2009a). Der Beitrag zu dieser spezifischen Breitenabhängigkeit wird durch mehrere Faktoren beeinflusst wie von (1.) niedrigeren Temperaturen in polaren Mesopausenhöhen, (2.) größeren vertikalen Weglängen, die den Eispartikeln für Kondensation und Wachstum zur Verfügung stehen und (3.) stärkeren Aufwinden, welche die Sedimentationsgeschwindigkeit der Eispartikel stärker dämpfen.

Die maximalen Werte der Rückstreuung bei einer Wellenlänge von 532 nm befindet sich im unteren Bereich der übersättigten Region bei 82-83 km und nimmt von niederen Breitengraden zum Pol hin zu (Abb. 4.12d). In diesem Höhen- und Breitenbereich sind die mittleren Eisradien am größten (> 20 nm). In Höhe des größten Rückstreukoeffizienten fallen die Eispartikelanzahldichten in einen Bereich von 50 bis 200 cm<sup>-3</sup>, was mit den Ergebnissen von von Cossart et al. (1999), Baumgarten et al. (2008) und Hervig et al. (2009a) gut übereinstimmt.

Die Abbildung 4.13 zeigt die Auftrittsraten in Abhängigkeit von verschiedenen Grenzwerten der Eisanzahldichte, des mittleren Radius, des Eisgehalts (IWC, engl.: ice water content) und der Helligkeit  $\beta_{\text{max}}$  (maximaler Rückstreukoeffizient). Der IWC entspricht der integrierten Eismasse über eine Höhensäule mit einer Grundfläche von einem Quadratkilo-



Figure 4.12: Zonale Monatsmittel von Eisanzahldichte, Eispartikelradius, Eismassendichte und Rückstreukoeffizient bei 532 nm modelliert mit MIMAS LIH5 mit mindestens 2 Teilchen pro cm<sup>3</sup> für Juli 2009. Mesopausenhöhen (gestrichelte Linie) und Sättigungsbedingungen (S = 1; durchgezogene Linie) sind äquivalent zu Abb. 4.3.

meter. Alle Auftrittsraten sind mit steigenden Grenzwerten antikorreliert. Helle PMCs mit IWC-Werten größer als  $40 \,\mathrm{g \, km^{-2}}$  treten nur sehr selten in mittleren Breiten auf, während in polaren Breiten die Auftrittswahrscheinlichkeit auf etwa 80% ansteigt. Zwischen mittleren und polaren Breiten entwickelt sich ein stärkerer Gradient, d.h. innerhalb weniger Breitengrade (weniger als 5°) verdoppelt sich die Auftrittswahrscheinlichkeit.

Abbildung 4.14 zeigt den Eisgehalt in Abhängigkeit verschiedener Grenzwerte. Es ist zu erkennen, dass der IWC der modellierten PMCs in Abhängigkeit vom Grenzwert rapide in Richtung höherer Breiten ansteigt. Beispielsweise hat sich der Eisgehalt in hohen Breiten im Vergleich zu mittleren Breiten mehr als verdreifacht, wenn man für den IWC-Grenzwert IWC<sub>th</sub> > 40 g km<sup>-2</sup> annimmt. Dieser Effekt ist bei einem kleineren Grenzwert noch stärker. Der direkte Vergleich des modellierten IWC mit beobachteten IWC-Werten ist durch den geringen Gradienten, bezogen auf geografische Breiten, weniger fehlerbehaftet als die Auftrittsraten in Abbildung 4.13. Dies ist ein wichtiges Ergebnis, welches auch in die Interpretation beim Vergleich mit Lidar- und Satellitendaten in Kapitel 6 mit einfließt.



Figure 4.13: Zonale Monatsmittel der Auftrittsraten in Abhängigkeit von verschiedenen Grenzwerten der Einanzahldichte, des Radius, des Eisgehalts (IWC) und der Helligkeit ( $\beta_{\text{max}}$  in  $10^{-10} \text{ m}^{-1} \cdot \text{sr}^{-1}$ ), modelliert mit MIMAS LIH5 für Juli 2009.



Figure 4.14: Zonale Monatsmittel des Eisgehalts modelliert mit MIMAS LIH5 für verschiedene Grenzwerte des Eisgehalts (IWC) für Juli 2009.

#### 4.2.2 IWC zweier Modellkonfigurationen

Der vorangegangene Abschnitt bezog sich auf den zonal gemittelten Zustand von Eisschichten im Juli für den LIH5-Modelllauf. Nun erfolgt ein Vergleich der beiden Modellkonfigurationen REF und LIH5, wobei tägliche Variationen des IWC im Juli betrachtet werden. Die Assimilation unterschiedlicher Reanalysedaten in LIMA und die weiteren Änderungen der LIH5 Modellversion gegenüber der REF Modellkonfiguration wirken sich erwartungsgemäß auch auf den Eisgehalt der PMCs aus, wie in Abbildung 4.15 für drei Jahre zu sehen ist. Es ist der zonal gemittelte Eisgehalt (IWC) als Funktion der Temperatur in 83 km Höhe sowie des Wasserdampfmischungsverhältnisses für jeden Tag im Juli dargestellt. Der Wasserdampf wurde dabei über eine Höhe von 80 bis 92 km gemittelt, um den gesamten PMC-Höhenbereich und die Wasserdampfumverteilung durch die Eisbildung und Sublimation einzubeziehen.



Figure 4.15: Zonale und täglich gemittelte Werte des Eisgehalts (IWC) in Abhängigkeit von der Temperatur in 83 km (a) und vom mittleren Wasserdampfmischungsverhältnis im Höhenbereich von 80 bis 92 km (b) im Monat Juli für verschiedene Jahre der Modellläufe LIH5 und REF. Die Werte beziehen sich auf ein Breitenband von  $65^{\circ}N - 75^{\circ}N$ .

MIMAS zeigt eine starke Abhängigkeit des PMC-IWC von der Temperatur in 83 km Höhe. Die geringen Temperaturen in dem Breitenband  $65-75^{\circ}$ N im Modelllauf LIH5 gegenüber REF resultieren in einen höheren Eisgehalt. Des Weiteren ist ein geringeres Wasserdampfmischungsverhältnis in LIH5 mit einem größeren Eisgehalt verbunden. Hervorgerufen wird dieser Effekt durch stärkere Gefriertrocknung, die zur Reduktion des mesosphärischen Hintergrundwasserdampfs und einer erhöhten Einschließung der H<sub>2</sub>O-Moleküle in den Eiswolken führt. Zusammenfassend ist die Eismasse nicht nur mit den mesosphärischen Temperaturen verbunden, sondern auch stark von der Gefriertrocknung abhängig, die wiederum durch geringe Temperaturen und dem nicht in den Eiswolken gebundenen Wasserdampf beeinflusst wird.

## 4.3 Zusammenfassung

In dieser Arbeit wurden für die Analysen zwei verschiedene Konfigurationen des Modells verwendet, die durch verschiedene Aspekte der Dynamik der mittleren Atmosphäre beschrieben werden. Zum Verständnis der grundlegenden Abhängigkeiten zwischen den PMC-Parametern erfolgte zunächst die Beschreibung des mittleren Zustandes von Eismassendichte, Radius, Eispartikelanzahlendichte, Rückstreukoeffizient und Auftrittswahrscheinlichkeiten. Des Weiteren wurde gezeigt, dass die Wechselwirkung von Staub, Eispartikeln und Wasserdampf mit den veränderten Hintergrundfeldern der beiden Modellläufe auch Einfluss auf PMC-Parameter nimmt. Die zwei MIMAS-Modellläufe werden im weiteren Verlauf verwendet, um die Effekte von unterschiedlichen wellengetriebenen Hintergrundfeldern auf die Eismikrophysik zu untersuchen und um abschließend allgemeingültige Aussagen für die Modellentwicklung treffen zu können.

## Chapter 5

## PMC-Abhängigkeit von der Lokalzeit

Um die Variationen von PMCs zu verstehen und diese als Tracer kleinskaliger Prozesse der mittleren Atmosphäre zu verwenden, müssen Variationen auf kurzen Zeitskalen untersucht werden. Das Modell wird dabei verwendet, Variationen von PMCs als Funktion der Lokalzeit (LT) in der nördlichen Hemisphäre im Zeitraum von 1979 bis 2013 zu analysieren. Die Ergebnisse werden in den folgenden Abschnitten diskutiert. Teile der in diesem Kapitel vorgestellten Ergebnisse wurden in *Schmidt et al.* (2018) veröffentlicht.

### 5.1 Harmonische Analyse der täglichen Variationen

Für die harmonische Analyse der täglichen Variationen der Hintergrundtemperatur, des Wasserdampfs ( $H_2O$ ) und der PMC-Parameter werden zwei Methoden verwendet, die in den Abbildungen 5.1 und 5.2 schematisch dargestellt sind.

Auf Basis einer stündlichen Modellausgabe von LIMA und MIMAS wurden die Parameter eines 1° x 3° x 100 m Breiten-Längen-Höhen-Gitters ermittelt. Dabei wurde über einen Zeitraum von einem Monat (Juli) bei einem vorgegebenen Breitenband alle Längen, in denen die gleiche Lokalzeit herrscht, gemittelt. Man erhält somit mittlere Stundenwerte, aus denen Tagesmittelwert, Maximum und Minimum sowie die entsprechende LT ermittelt werden. Zudem erfolgt eine harmonische Analyse dieses Datensatzes. Dafür wird ein sinusförmiger Fit mit 24, 12 und 8 h Perioden angewandt, aus dem dann die Amplituden und Phasen abgeleitet werden (Abb. 5.1b). Im Folgenden wird dieses Verfahren "Methode 1" genannt, welches die Identifizierung mittlerer LT-Schwankungen basierend auf monatlichen Mittelwerten ermöglicht.

Eine weitere Möglichkeit, Strukturen in Abhängigkeit der LT zu untersuchen, besteht darin, Zeitreihen eines einzelnen Tages auf Basis von Stundendaten für einzelne Breitenund Längenpunkte zu analysieren ("Methode 2", Abb. 5.2). Die spezifischen Parameter wie Mittelwert, Maximum und Minimum einschließlich der entsprechenden LT werden dann aus jeder täglichen Datenprobe berechnet. Zusätzlich wird auf jeder täglichen Stichprobe ein sinusförmiger Fit angewendet, um die 24, 12 und 8h Gezeitenamplituden und -phasen



Figure 5.1: Schematische Darstellung der "Methode 1": Tagesmittelwert (Mittel), -maximum (Max), -minimum (Min) und die entsprechenden Lokalzeiten werden auf Basis der mittleren Stundenwerte berechnet. Für die harmonische Analyse wird eine sinusförmige Fitfunktion mit 24, 12 und 8h Perioden an die mittlere Tageszeitreihe angepasst. Daraus lassen sich die 24 und 12-stündige Amplitude ( $A_{24}, A_{12}$ ) und Phase ( $p_{24}, p_{12}$ ) ableiten.

zu berechnen. Dieser Vorgang wurde für jeden Rasterpunkt unter Berücksichtigung der Ortszeitdifferenz an verschiedenen Längenpositionen und für jeden Tag im Juli wiederholt. Nach der Durchschnittsberechnung erhält man schließlich die Mittelwerte der Parameter, welche monatliche LT-Schwankungen auf Basis lokaler Tageszeitreihen beschreiben.



Figure 5.2: Schematische Darstellung der "Methode 2": Für die harmonische Analyse wird eine sinusförmige Fitfunktion mit 24, 12 und 8 h Perioden an jede einzelne Tageszeitreihe angepasst. Das Mittel, Maximum (Max), Minimum (Min) und die entsprechenden Lokalzeiten erhält man aus der Durchschnittsberechnung der einzelnen Parameter. Zum Beispiel ergibt sich das Maximum aus den einzelnen Maxima jeder Tageszeitreihe (rot). Die Gezeitenparameter ergeben sich aus Mittlung der einzelnen Amplituden und Phasen aller Fits.

Im Allgemeinen erzeugt Methode 1 kleinere Werte der mittleren LT-Variationen als Methode 2, da die Parameter aus einem geglätteten Zustand bestimmt werden. Es ist festzuhalten, dass diese Methode 1 der Mittelwertbildung den mittleren sonnensynchronen Anteil der migrierenden Gezeitenschwingungen erfasst. Während Methode 2 eintägige Zeitreihen verwendet und damit auch Schwankungen von einem Tag auf den anderen Tag und Variationen innerhalb eines Tages aufzeichnet. Diese Variation kann aus Überlagerungen verschiedener Gezeiten, wie migrierenden oder nicht-migrierenden bestehen. Zudem hängen diese nicht nur von der variablen Aktivität der Gezeitenwellen ab, sondern auch von der variablen planetaren und großräumigen Schwerewellenaktivität, wie z.B. von *Baumgarten et al.* (2018) beobachtet wurde. Die MIMAS-Simulationen werden durch stündliche Eingangsdaten und nicht durch einen monatlichen Mittelwert gesteuert. Aus diesem Grund sollten die Ergebnisse von Methode 2 die mittleren LT-Schwankungen der Hintergrundbedingungen, welche die Eisbildung beeinflussen, besser beschreiben.

## 5.2 Variationen der atmosphärischen Hintergrundtemperatur mit der Lokalzeit

In MIMAS werden Abhängigkeiten der Eisbildung von der LT hauptsächlich durch tägliche Variationen der Hintergrundtemperatur und des Wasserdampfs erzwungen. Die Hintergrundtemperatur und der Wasserdampf sind von übergeordneter Bedeutung und kontrollieren die Eisbildung in der Mesopausenregion. Die Gezeitenstrukturen in einer älteren Modellkonfiguration von LIMA wurden bereits von *Herbort et al.* (2007) und *Fiedler et al.* (2011) beschrieben. Im Folgenden werden die Charakteristiken der täglichen Variationen der Hintergrundtemperatur für die LIMA-Modellläufe REF und LIH5 präsentiert.

In Abbildung 5.3 sind monatlich gemittelte Temperaturfelder in Abhängigkeit von der LT des REF- und LIH5-Laufs für Juli 2009 gezeigt. Diese Ergebnisse entstammen der Methode 1 und beziehen sich auf die Höhenregion 81-84 km, um typische Hintergrundbedingungen, wie die Temperatur in PMC-Höhen, aufzulösen. Es wurde ein einzelnes Jahr (2009) gewählt, um nicht von möglichen Schwankungen des LT-Verhaltens von Jahr zu Jahr betroffen zu sein. Darüber hinaus wurde das Jahr 2009 durch frühere Studien detailliert hinsichtlich des Lebenszyklus der Eisteilchen in *Kiliani et al.* (2013) und *Kiliani et al.* (2015) für den REF-Lauf analysiert. Im Allgemeinen zeigen die Temperaturen des REF-und LIH5-Laufs sehr ähnliche Abhängigkeiten von der Lokalzeit. Diese sind durch ein Minimum am Morgen und einem Maximum in den Nachmittagsstunden geprägt. Für den Modelllauf LIH5 ergeben sich im Vergleich zum Temperaturfeld des REF-Laufs im Mittel 2-4 K höhere Werte.

Tabelle 5.1 und 5.2 fassen relevante Zahlen des REF- und LIH5-Modelllaufs zusammen, die den mittleren Zustand und die LT-Variationen der Temperatur beschreiben, die der Methode 2 entstammen. Die Analyse wurde für PMC-Höhen und Mesopausenhöhen sowie für drei spezifische Breiten (54, 69 und 78°N) vorgenommen. Im Mittel weichen die Temperaturen beider Modellläufe bei 83 km um 1-4 K voneinander ab. In 90 km ist die Differenz der mittleren Temperaturen von LIH5 zu REF in etwa doppelt so groß wie in typischen PMC-Höhen. Beide Mittelungsverfahren (Methode 1, Abb. 5.3a und Methode 2, Tabelle 5.1, dritte Spalte) führen zu identischen Monatsmittelwerten der Temperaturen.



Figure 5.3: REF und LIH5-Modelllauf, Methode 1: Monatsmittel der Temperatur in Abhängigkeit von der Lokalzeit im Breitenband 67–71°N für Juli 2009. Die gestrichelte Linie dient dem Vergleich mit Parametern der Gezeitenanalyse aus Tabelle 5.1 und 5.2. Die Abbildung (a) ist aus *Schmidt et al.* (2018) reproduziert.

Abbildung 5.3a und Tabelle 5.1 zeigen auch die mittleren täglichen Temperaturschwankungen. Die mit Methode 1 berechneten LT-Variationen haben einen Wert von etwa  $\pm 1-1,5$  K bei 83 km in einem Breitenband von 67° bis 71°N. Die Verfahrensweise der Methode 2 führt hier zu ähnlichen LT-Variationen. Für den Modelllauf LIH5 ergeben sich systematisch größere LT-Variationen (Tabelle 5.2).

Breite (°N)	Höhe (km)	Mittel (K)	Max. (K)	Min. (K)	Max Min. (K)	LT <sub>Max.</sub> (hh:mm)	$ m LT_{Min.}$ (hh:mm)	A <sub>24</sub> (K)	A <sub>12</sub> (K)	p <sub>24</sub> (h)	p <sub>12</sub> (h)
54	83	148,3	149,6	147,0	2,6	15:29	06:01	1,1	0,3	15,4	6,6
69	83	$146,\! 6$	148,1	145,3	$^{2,8}$	16:34	03:40	1,3	$^{0,2}$	15,3	$^{5,6}$
78	83	$147,\! 6$	148,7	146,5	$^{2,2}$	15:15	01:52	$^{1,1}$	$^{0,1}$	$14,\!8$	$^{5,4}$
54	90	159,6	162,0	157,3	4,7	15:19	18:15	1,3	1,0	16,2	$5,\!6$
69	90	132,4	134,2	130,9	$^{3,3}$	12:48	00:34	1,2	$^{0,5}$	15,9	$^{6,0}$
78	90	$124,\!8$	$127,\!1$	$122,\!8$	4,3	14:56	01:44	$^{2,0}$	$^{0,4}$	$15,\!8$	6,9

Table 5.1: REF-Modelllauf, Methode 2: Mittelwerte und LT-Variationen der Temperaturen für zwei geometrische Höhen verschiedener Breitengrade für Juli 2009. Die Werte beziehen sich auf Monatsmittel über 31 Tageszyklen. Mittel: Mittelwert über den gesamten Tag; Max.: Maximum des Tages; Min.: Minimum des Tages; Max.-Min.: Differenz zwischen Maximum und Minimum des Tages;  $LT_{Max}$ .: Lokalzeit des Maximums;  $LT_{Min}$ .: Lokalzeit des Minimums;  $A_{24}$ : tägliche Amplitude eines harmonischen Fits, welcher die 24 und 12stündige Komponente einschließt;  $A_{12}$ : halbtägige Amplitude;  $p_{24}$ : Phase der ganztägigen Komponente;  $p_{12}$ : Phase der halbtägigen Komponente. Der grau markierte Bereich dient dem Vergleich mit Methode 1 und beschreibt Gezeitenparameter in Höhe der gestrichelten Linie in Abbildung 5.3a.

Die Analyse für LIH5 zeigt, dass im Höhenbereich 83-90 km die LT-Schwankungen der Temperatur zum Pol hin abnehmen. Es ergeben sich Werte von  $\pm (4,5-9) \text{ K}$  bei 54°N,  $\pm (2-8) \text{ K}$  bei 69°N und  $\pm (1,5-5) \text{ K}$  bei 78°N. Im Bereich der Mesopause sind die Amplituden der 24 h und 12 h Perioden im Vergleich zu den Werten in PMC-Höhen größer. Die thermischen Amplituden des LIH5-Modellaufs verringern sich polwärtig mit zunehmender Höhe. Diese räumlichen Charakteristiken wurden ebenfalls in Stevens et al. (2017) diskutiert, die für ihre Analysen das Prognose- und Assimilationssystem NOGAPS-ALPHA (engl.: Navy Operational Global Atmospheric Prediction System Advanced Level Physics High Altitude) verwendet haben. Die Absolutwerte der ganztägigen und halbtägigen Amplituden aus LIH5 wurden wie in der Modellstudie von Stevens et al. (2010) und Stevens et al. (2017) berechnet. Auch die Variationen der Temperaturgezeiten, die aus den Beobachtungen des Meteorradars im Sommer über 90 km abgeleitet wurden, zeigen Amplituden von etwa 4-8 K für die ganztägige und 2-4 K für die halbtägige Gezeitenkomponente in den höheren Breiten (69°N) (Singer et al., 2003). Diese Beobachtungen entsprechen in etwa den Werten der von MIMAS LIH5 berechneten Amplituden (siehe Tabelle 5.2). In PMC-Höhen sind die ganztägigen Gezeitenamplituden bis zu einem Faktor 3 stärker als die halbtägigen Amplituden. Im Bereich der Mesopause unterscheiden sie sich um einen Faktor von 2. Das bedeutet, dass lokale Temperaturschwankungen hauptsächlich durch ganztägige Gezeiten beeinflusst werden und dass der Einfluss der halbtägigen Gezeit mit zunehmender Höhe größer wird.

Breite (°N)	Höhe (km)	Mittel (K)	Max. (K)	Min. (K)	Max Min. (K)	LT <sub>Max.</sub> (hh:mm)	$LT_{Min.}$ (hh:mm)	A <sub>24</sub> (K)	A <sub>12</sub> (K)	p <sub>24</sub> (h)	$\stackrel{p_{12}}{(h)}$
54	83	146,5	151,8	142,1	9,7	14:44	05:46	$^{2,4}$	1,0	15,9	5,9
69	83	$142,\! 6$	145,0	140,5	$^{4,5}$	15:46	03:03	$1,\!6$	$^{0,5}$	15,1	$^{7,1}$
78	83	144,1	145,9	142,5	$^{3,4}$	14:56	01:07	$^{1,3}$	$^{0,5}$	15,0	$^{6,3}$
54	90	167,9	175,7	158,8	16,9	16:17	01:50	4,2	$^{3,7}$	15,0	6,4
69	90	130,2	138,0	123,1	14,9	15:44	01:03	$^{4,5}$	$^{2,3}$	15,1	$^{6,2}$
78	90	119,4	123,5	$114,\!8$	8,7	16:50	01:42	$^{3,3}$	$^{1,7}$	$14,\! 6$	$^{6,0}$

Table 5.2: LIH5-Modelllauf, Methode 2: Mittelwerte und LT-Variationen der Temperaturen für Juli 2009 wie in Tabelle 5.1. Der grau markierte Bereich dient dem Vergleich mit Methode 1 und beschreibt Gezeitenparameter in Höhe der gestrichelten Linie in Abbildung 5.3b.

In LIH5 ergeben sich im Höhenbereich zwischen 83 und 90 km stärkere Temperaturvariationen, die durch den Einfluss von Schwerewellen erklärt werden können. Im Allgemeinen zeigt die Gezeitenanalyse der Temperaturen für beide Datensätze, dass die ganztägigen und halbtägigen Gezeiten überwiegend vorhanden sind, während die tertiäre Gezeitenkomponente vernachlässigt werden kann (nicht gezeigt). Ebenfalls ist in beiden Modellläufen bei 83 km eine Verschiebung des lokalen Minimums in die frühen Morgenstunden hin zu höheren Breiten vorzufinden.

Interessanterweise ändern sich in PMC-Höhen die Phasen der Temperatur mit dem Breitengrad. Insbesondere wird die Lokalzeit des täglichen Minimums des REF-Laufs in den frühen Morgenstunden (Tabelle 5.1, achte Spalte) zeitlich in Richtung höherer Breitengrade von 06:01 LT (54°N) auf 03:40 LT (69°N) und 01:52 LT (78°N) verlagert. Für den LIH5-Datensatz ergeben sich ähnliche Werte. Im Gegensatz zur Verschiebung des Minimums scheint die Zeit des Temperaturmaximums stets zwischen 15:15 LT und 16:36 LT (REF) bzw. 14:44 LT und 15:46 LT (LIH5) zu liegen. Die Überlagerung von ganztägigen und halbtägigen thermischen Gezeiten führt zu überwiegend niedrigeren Temperaturen in den frühen Morgenstunden und höheren Temperaturen in den Nachmittagsstunden.

## 5.3 Variationen des Wasserdampfs und der Sättigung mit der Lokalzeit

Neben den Temperaturen spielt der Wasserdampf (H<sub>2</sub>O) eine wesentliche Rolle bei der PMC-Bildung. In diesem Abschnitt werden die wichtigsten MIMAS-Ergebnisse hinsichtlich der Charakteristiken der täglichen Variationen des H<sub>2</sub>O präsentiert. Abbildung 5.4 zeigt H<sub>2</sub>O-Mischungsverhältnisse von MIMAS-Eissimulationen der Modellkonfigurationen REF und LIH5 für ein Breitenband von  $67^{\circ} - 71^{\circ}$ N und Juli 2009. Das mittlere vertikale H<sub>2</sub>O-Profil des REF-Laufs hat bei etwa 81,5 km ein Maximum, während das Maximum im LIH5-Lauf etwa 0,5 km unterhalb dieser Höhe ist. In beiden Modellläufen ist das Maximum in den Morgenstunden vorzufinden. Hier sublimieren Eispartikel und bilden eine Zone erhöhter Hydration. Aus Tabelle 5.3 geht hervor, dass die Auswirkungen der Hydration



Figure 5.4: REF und LIH5-Modelllauf, Methode 1: Monatsmittel des Wasserdampfs in Abhängigkeit von der Lokalzeit im Breitenband 67–71°N für Juli 2009. Die gestrichelte Linie dient dem Vergleich mit Parametern der Gezeitenanalyse aus Tabelle 5.3 und 5.4. Die Abbildung (a) ist aus *Schmidt et al.* (2018) reproduziert.

durch Sublimation von Eisteilchen bei 81,5 km und Dehydration durch Gefriertrocknung bei 84 km in Richtung höherer Breiten intensiviert werden. Dies geschieht aufgrund geringerer Mesopausentemperaturen, die größere Nukleationsraten von Eispartikeln erlauben und zu größeren Sedimentationswegen führen. Das Resultat ist ein verstärktes Wachstum von Eispartikeln, was wiederum zu einer erhöhten Sublimation führt.

Breite (°N)	Höhe (km)	Mittel (ppmv)	Max. (ppmv)	Min. (ppmv)	Max Min. (ppmv	LT <sub>Max.</sub> (hh:mm)	$ m LT_{Min.}$ (hh:mm)	A <sub>24</sub> (ppmv)	$\begin{array}{c} A_{12} \\ (ppmv) \end{array}$	p <sub>24</sub> (h)	p <sub>12</sub> (h)
54	$^{81,5}$	$^{4,5}$	4,6	4,3	0,3	10:34	00:03	$_{0,1}$	0,1	7,9	$^{4,1}$
69	$^{81,5}$	9,8	12,0	7,7	$^{4,3}$	07:01	20:23	$^{2,0}$	0,4	$^{7,0}$	$^{4,9}$
78	$^{81,5}$	15,5	20,4	10,2	10,2	05:29	21:23	$^{4,5}$	1,3	$^{6,8}$	$^{3,7}$
54	84	2,7	2,9	$^{2,6}$	0,3	18:13	03:32	0,1	0,1	18,3	$^{8,6}$
69	84	$^{2,1}$	$_{3,0}$	$1,\!4$	$^{1,6}$	21:05	04:54	0,7	$^{0,2}$	18,0	$^{8,1}$
78	84	1,8	2,7	1,1	$1,\!6$	18:38	03:30	0,8	$^{0,2}$	$18,\! 6$	$^{9,0}$

Table 5.3: REF-Modelllauf, Methode 2: Mittelwerte und LT-Variationen des Wasserdampfs für zwei geometrische Höhen verschiedener Breitengrade für Juli 2009. Die Werte beziehen sich auf Monatsmittel über 31 Tageszyklen. Mittel: Mittelwert über den gesamten Tag; Max.: Maximum des Tages; Min.: Minimum des Tages;  $LT_{Max}$ : Lokalzeit des Maximums;  $LT_{Min}$ : Lokalzeit des Minimums;  $A_{24}$ : tägliche Amplitude eines harmonischen Fits, welcher die 24 und 12-stündige Komponente einschließt;  $A_{12}$ : halbtägige Amplitude;  $p_{24}$ : Phase der ganztägigen Komponente;  $p_{12}$ : Phase der halbtägigen Komponente. Der grau markierte Bereich beschreibt Gezeitenparameter in Höhe der gestrichelten Linie in Abbildung 5.4a.

Die MIMAS-Ergebnisse zeigen relativ große LT-Variationen des  $H_2O$  in Bezug auf die absoluten Werte. Bei 69°N beträgt die LT-Variabilität des Hintergrundwasserdampfs vom REF-Lauf (Max. - Min.) bei 81,5 km Höhe 4,3 ppmv, was einer 44 %igen Variation bezüglich des Mittelwertes (9,8 ppmv) entspricht (abgeleitet aus Tabelle 5.3). Der LIH5-Datensatz zeigt im Vergleich zum REF-Datensatz eine geringere LT-Variabilität im H<sub>2</sub>O. Bei 81,5 km liegen die H<sub>2</sub>O-Variationen des LIH5-Modelllaufs bei etwa 24 % (abgeleitet aus Tabelle 5.4). Sowohl im REF- als auch im LIH5-Lauf ist in niederen Breiten der Einfluss der 12-stündigen Periode genauso groß wie bei der 24-stündigen Periode ( $A_{24}/A_{12} = 1$ ). Dies ändert sich mit zunehmender Breite, so dass in beiden Modellkonfigurationen eine dominierende 24-stündige Periode vorzufinden ist.

Breite (°N)	Höhe (km)	Mittel (ppmv)	Max. (ppmv)	Min. (ppmv)	Max Min. (ppmv	${ m LT_{Max.} \ (hh:mm)}$	$ m LT_{Min.}$ (hh:mm)	A <sub>24</sub> (ppmv)	$\begin{array}{c} A_{12} \\ (ppmv) \end{array}$	p24 (h)	p12 (h)
54	81,5	4,4	5,1	$^{3,6}$	$^{1,5}$	09:15	21:01	$^{0,2}$	$_{0,2}$	6,5	$^{3,0}$
69	$^{81,5}$	$^{7,4}$	8,2	6,4	1,8	08:25	01:54	$^{0,4}$	$^{0,2}$	$6,\!6$	$^{5,2}$
78	$^{81,5}$	9,3	10,5	8,0	$^{2,5}$	04:50	19:54	0,9	$^{0,5}$	$^{6,5}$	$^{5,3}$
54	84	$^{2,5}$	3,1	1,9	1,2	15:17	00:15	$^{0,2}$	0,2	18,2	7,8
69	84	1,0	$^{2,0}$	$^{0,4}$	$^{1,6}$	17:38	05:01	$^{0,5}$	$^{0,2}$	18,9	$^{7,8}$
78	84	$^{1,0}$	$1,\!6$	$0,\!6$	$^{1,0}$	15:29	04:09	$^{0,4}$	$^{0,2}$	18,4	$^{7,8}$

Table 5.4: LIH5-Modelllauf, Methode 2: Mittelwerte und LT-Variationen des Wasserdampfs für Juli 2009 wie in Tabelle 5.3. Der grau markierte Bereich beschreibt Gezeitenparameter in Höhe der gestrichelten Linie in Abbildung 5.4b.

Das LT-Verhalten des  $H_2O$  bei 81,5 km weist ein breitenabhängiges ausgeprägtes Maximum zwischen 05:30 LT und 10:30 LT (Tabelle 5.3) auf. Das  $H_2O$ -Maximum des REF-Laufs verschiebt sich wie das Minimum der Temperaturen mit zunehmender Breite hin zu früheren Morgenstunden, zeigt jedoch im Vergleich zu den Zeiten der Temperaturminima  $(LT_{Min})$  eine Verzögerung von etwa 4 h. Die H<sub>2</sub>O-Werte des LIH5-Laufs weisen ein etwas zeitlich versetztes Maximum gegenüber dem REF-Datensatz bei 81,5 km zwischen 04:50 und 09:15 LT am Morgen auf. Die Verzögerung im Vergleich zu LT<sub>Min</sub> in LIH5 ist etwas geringer und liegt bei 3 h. Dennoch stimmen sowohl die Zeiten der Temperaturminima als auch die Zeiträume hoher H<sub>2</sub>O-Mischungsverhältnisse in beiden Modellkonfigurationen annähernd überein.

Die Sättigung ist ein kombinierter Effekt aus Umgebungstemperatur,  $H_2O$ , Luftdruck, Partikelgröße und Partikeltemperatur. Demzufolge wirken sich die Variationen des Wasserdampfs und der Hintergrundtemperatur innerhalb des Tages auf die Sättigungsbedingungen aus. Abbildung 5.5 zeigt das Sättigungsverhältnis S bei einer festen Höhe von 82,7 km, welches der mittleren PMC-Höhe der MIMAS-Simulation für das Jahr 2009 entspricht. Der Monatsdurchschnitt zeigt fast permanent übersättigte Bedingungen über den Tag



Figure 5.5: REF-Modelllauf, Methode 1: Stündliche Mittelwerte des Sättigungsverhältnisses bei einer festen Höhe von 82,7 km (mittlere PMC-Höhe) in Abhängigkeit von der Ortszeit im Breitenband  $67-71^{\circ}$ N für Juli 2009. Die grauen Linien stellen einzelne Tage und die blaue Linie deren Mittelwert dar. Diese Abbildung ist aus *Schmidt et al.* (2018) reproduziert.

hinweg. Die Variationen des  $H_2O$  und der Hintergrundtemperatur führen zu einer Änderung des Sättigungsverhältnisses von etwa 1,8 um Mitternacht auf 1 am Nachmittag. Der Sättigungsgrad fällt an einigen Tagen im Juli auch unter 1. Dadurch können Eisteilchen, die durch den meridionalen Wind in niedere Breiten transportiert wurden, auch außerhalb des mittleren übersättigten Bereichs südlich von etwa 54°N existieren (siehe Abb. 4.11). Zu beachten ist, dass die vertikale Ausdehnung der übersättigten Bereiche aufgrund kälterer und höherer Mesopausenbedingungen polwärts zunimmt, wie bereits in Kapitel 4.1 diskutiert wurde. Im Folgenden werden die Modellergebnisse verschiedener PMC-Parameter vorgestellt.

### 5.4 Eisparameter in Abhängigkeit von der Lokalzeit

In den vorangegangenen Abschnitten wurden LIMA und MIMAS-Simulationen von Temperatur und  $H_2O$  hinsichtlich der Lokalzeit quantitativ analysiert. Nun werden die LT-Schwankungen in verschiedenen Eisparametern wie Eispartikelanzahldichte, Eispartikelradius, Eismassendichte (IWD), Rückstreukoeffizient und Eisgehalt (IWC) genauer untersucht.

In Abbildung 5.6 sieht man den mittleren Eisradius, die Eisanzahldichte, die Helligkeit und die Eismassendichte in der Höhe des maximalen Rückstreukoeffizienten für das Breitenband 67°-71°N im Juli, wobei ein Grenzwert für die maximale Helligkeit von  $\beta_{\text{max}} > 0, 4 \cdot 10^{-10} \,\text{m}^{-1} \text{sr}^{-1}$  angenommen wird. Dies ist die Höhe, in welcher der Radius der Eispartikel maximiert wird und somit die größten Eismassendichten und Rückstreukoeffizienten auftreten. Die Diagramme zeigen sowohl Medianwerte, als auch arithmetische Mittel. Der Median und das arithmetische Mittel unterscheiden sich, was bedeutet, dass die zugrunde liegende Verteilung nicht symmetrisch ist. Bei der Untersuchung der Eisparameter in Abhängigkeit von der LT ist festzustellen, dass die Eisanzahldichte in den Morgenstunden zwischen 03:00 LT und 05:00 LT maximiert wird, das entspricht den Maxima der Eismassendichte und von  $\beta_{\text{max}}$ . Der mittlere Radius zeigt eine kleinere Variation mit der Lokalzeit und kein ausgeprägtes Maximum am Morgen. Dies deutet darauf hin, dass das LT-Verhalten der Eismassendichte hauptsächlich durch die Anzahl der Eisteilchen, welche beide ein ausgeprägtes Maximum in den Morgenstunden aufweisen, bestimmt wird und weniger durch den Eispartikelradius. Die Modellergebnisse werden durch AIM-Beobachtungen bestätigt, die zeigen, dass ein Anstieg der Eismasse signifikant mit zunehmender Eispartikelanzahldichte und weniger mit der Größe der Eispartikel korreliert (Hervig et al., 2009b). Die Modellrechnungen, welche mit dem 1D-Eismodell CARMA durchgeführt wurden, zeigen hingegen, dass die Partikelanzahldichte keinen Einfluss auf die Eismasse und Helligkeit hat (Megner, 2011).

In MIMAS werden Eisparameter in Abhängigkeiten von der LT hauptsächlich durch Gezeitenvariationen der Hintergrundtemperatur und des H<sub>2</sub>O erzwungen, wie im ersten Abschnitt dieses Kapitels angedeutet wurde. Die Helligkeit ( $\beta_{max}$ ) in Abhängigkeit von der LT zeigt ein Tagesmaximum bei 04:00 LT, welches der Temperaturstruktur mit einem Tagesminimum bei 03:40 LT folgt (Tabelle 5.1). Das maximale H<sub>2</sub>O ist bei 07:00 LT und damit etwa 3 h hinter dem Auftreten des Helligkeitsmaximum zu finden (vgl. Tabelle 5.3). Dies gilt auch für das H<sub>2</sub>O-Minimum, welches ebenfalls 3 h hinter dem Helligkeitsminimum auftritt. Die Schlussfolgerung ist, dass die Phasen der Temperatur- und H<sub>2</sub>O-Gezeiten der Hauptantrieb für die Ausbildung der Phasenstruktur in Eisparametern ist.

Abbildung 5.7 zeigt die LT-Variation des Eisgehalts (IWC) für das Breitenband  $67-71^{\circ}$ N. Es wurde kein Grenzwert angenommen, was bedeutet, dass der IWC bezüglich der Frequenz gewichtet wurde und IWC-Werte von Null (keine PMCs) enthalten sind. Daraus ergibt



Figure 5.6: Eisparameter modelliert mit MIMAS REF für die Höhe 83 km für ein Breitenband von 67°N-71°N aller Juli-Monate 2003-2013: Eismassendichte (a), Eispartikelradius (b), Eisanzahldichte (c) und maximaler Rückstreukoeffizient (d). Es wurden nur Profile mit  $\beta_{\text{max}} > 0, 4 \cdot 10^{-10} \text{ m}^{-1} \text{sr}^{-1}$  genutzt. Die Kästen stellen das untere und das obere Quartil, den Median (rote Linie) und das arithmetische Mittel (grüne Linie) dar. Die gestrichelten vertikalen Balken zeigen das Minimum und das Maximum an. Diese Abbildung ist aus *Schmidt et al.* (2018) reproduziert.

sich eine IWC-Variation über den Tag um den Faktor 10, welche mit den von Stevens et al. (2010) veröffentlichten Modellergebnissen übereinstimmt. Der harmonische Fit ist stark mit den Medianwerten korreliert (Korrelationskoeffizient von 0,99), was bedeutet, dass das LT-Verhalten der IWC-Medianwerte durch die harmonische Fitfunktion mit 24, 12 und 8 h Perioden nahezu perfekt repräsentiert wird. Die Amplitudenverhältnisse sind  $A_{24}/A_{12} = 2,66$  und  $A_{24}/A_8 = 5,84$ . Die ganztägige Gezeitenkomponente ist mehr als doppelt so groß wie die halbtägige und um ein Vielfaches größer als die tertiäre Komponente, welche somit eine untergeordnete Rolle spielt.



Figure 5.7: Stündliche Medianwerte des Eisgehalts (IWC) in Abhängigkeit von der Lokalzeit für 67–71°N, modelliert mit MIMAS REF für Juli 2007-2013. Es wurde kein Grenzwert angewendet. Die vertikalen Balken repräsentieren das untere und obere Quartil der Daten. Die schwarze Kurve ist eine harmonische Anpassung an die Daten mit Perioden von 24, 12 und 8 h. Diese Abbildung ist aus *Schmidt et al.* (2018) reproduziert.

## 5.5 Breiten- und Grenzwertabhängigkeit der Lokalzeitvariationen

Im folgenden Abschnitt werden die LT-Variationen von PMC-Parametern für verschiedene Breitenbänder analysiert. Dem schließt sich eine Untersuchung der täglichen Variationen für unterschiedliche Grenzwerte an, womit verschiedene Sensitivitäten von Instrumenten simuliert werden.

**Breitenabhängigkeit** Die numerischen Simulationen mit MIMAS ergeben, dass die LT-Schwankungen von PMCs signifikanten Breitenabhängigkeiten unterliegen. Abbildung 5.8 zeigt modellierte IWC-Werte in Abhängigkeit vom Breitengrad für ausgewählte Lokalzeiten im Juli 2003–2013. Es wurde kein Grenzwert angewendet. Das heißt, die Medianwerte beinhalten dadurch PMC-Ereignisse mit dem Wert Null. Um 06:00 LT steigt der IWC fast linear von 60°N bis 84°N an, während der Anstieg bei den übrigen Lokalzeiten sehr unterschiedlich ist. Dies deutet darauf hin, dass sich die Phase des LT-Verhaltens mit dem Breitengrad ändert.

Abbildung 5.9 zeigt die Variation in den Phasen detaillierter für verschiedene Breitenbänder. Es stellt sich heraus, dass (1.) die Amplitude der Gezeiten in absoluten IWC-Werten zum Pol hin zunimmt, (2.) das Verhältnis von maximalem zu minimalem IWC zum Pol hin abnimmt (siehe Tabelle 5.5) und (3.) mit abnehmender Breite eine leichte Phasenverschiebung zu erkennen ist. Das IWC-Maximum um Mitternacht bei 81°N bewegt sich zeitlich gesehen nach vorne auf 04:00 LT bei 63°N. Wie in den vorherigen Abschnitten bereits erläutert, bewegen sich Phasenpositionen der Minimaltemperaturen in PMC-Höhen in den frühen Morgenstunden teilweise zeitlich gesehen rückwärts in Polrichtung. Auch die Phase des täglichen  $H_2O$ -Maximums neigt dazu, dieser Zeitverschiebung zu folgen. Schlussfolgernd lässt sich sagen, dass sowohl Temperatur- als auch  $H_2O$ -Phasen die allgemeine früh-morgendliche Struktur im IWC und dessen Phasenverschiebung hin zu höheren Breitengraden verursachen. Die IWC-Mittelwerte in mittleren Breiten sind



Figure 5.8: Medianwerte des Eisgehalts (IWC) in Abhängigkeit vom Breitengrad modelliert mit MIMAS REF für verschiedene Ortszeiten für Juli 2003–2013. Es wurde kein Grenzwert angewendet, d.h. es werden IWC-Werte gleich Null (keine PMCs) mitgezählt. Die vertikalen Balken repräsentieren das untere und obere Quartil der Daten. Diese Abbildung ist aus *Schmidt et al.* (2018) reproduziert.

viel kleiner (etwa 100-fach) als in hohen Breiten. Daher wird das Verhältnis der täglichen maximalen zu den minimalen IWC-Werten verwendet (siehe Tabelle 5.5). Im Durchschnitt liegen die Werte des Verhältnisses von Tagesmaximum zu -minimum bei etwa 10 und nehmen zum Pol hin ab. Tabelle 5.5 enthält auch die Verhältnisse der Gezeitenamplituden, die sich aus Fits mit 24, 12 und 8 h harmonischen Komponenten ergeben. Es ist festzustellen, dass für die drei höchsten Breitengrade die tägliche Komponente im Allgemeinen etwa doppelt so groß ist wie die halbtägige Komponente. Das Verhältnis  $A_{24}/A_{12}$  scheint relativ unabhängig vom Breitengrad zu sein. Es gibt eine tertiäre Komponente. Diese liegt in der Größenordnung von 20 % der 12 h Amplitude und hat daher einen vernachlässigbaren Einfluss. Es ist zu beachten, dass Schwerewellen den Einfluss der Gezeiten, insbesondere für die tertiäre Komponente, überlagern können. Schwerewellen sind in der MIMAS-Modellkonfiguration LIH5 und teilweise auch im REF-Lauf enthalten (siehe Kapitel 3.1.1),

Breitenband	$\frac{A_{24}}{A_{12}}$	$\frac{A_{24}}{A_8}$	Max/Min
$\begin{array}{c} 61 - 65^\circ\mathrm{N} \\ 67 - 71^\circ\mathrm{N} \\ 73 - 77^\circ\mathrm{N} \\ 79 - 83^\circ\mathrm{N} \end{array}$	7,6	6,0	12,6
	2,2	4,1	18,3
	2,1	4,8	10,4
	2,7	7,8	6,9

Table 5.5: Verhältnis der IWC-Gezeitenamplituden modelliert mit MIMAS REF für verschiedene Breitenbänder und Juli 2009. Es wurde kein Grenzwert angewendet. Die Verhältnisse von maximalen zu minimalen IWC-Werten zeigen die Variabilität über den Tag hinweg.

aber eine differenzierte Betrachtung ihrer Auswirkungen auf das Gezeitenverhalten von PMCs, erfordert weitere detaillierte Untersuchungen. Zu erwarten ist jedoch, dass die Breitenvariationen der Gezeitenamplituden robust sind und helfen, Langzeitbeobachtungen mit unterschiedlichen Breitengraden und festen oder variablen Lokalzeiten zu interpretieren.



Figure 5.9: Tägliche Variation stündlicher Medianwerte des Eisgehalts (IWC) modelliert mit MIMAS REF für ausgewählte Breitenbänder und Juli 2003–2013. Es wurde kein Grenzwert angewendet. Die durchgezogenen Linien entsprechen harmonischen Fits mit Perioden von 24, 12 und 8 h. Diese Abbildung ist aus *Schmidt et al.* (2018) reproduziert.

**Grenzwertabhängigkeit** Im Folgenden wird die Struktur der IWC-Werte in Abhängigkeit von der LT und ihre Breitenabhängigkeit in Bezug auf unterschiedliche IWC-Grenzwerte (IWC<sub>th</sub> in g km<sup>-2</sup>) untersucht. Hierbei werden IWC-Daten gleich *Null* nicht miteinbezogen. Zusätzlich wird der zu analysierende Zeitraum auf 1979 bis 2013 erweitert, womit eine 35-jährige Klimatologie der täglichen Variationen präsentiert wird, die darauf abzielt, mittlere LT-Schwankungen zu beschreiben. Solche Spezifikationen können für die Satellitendatenanalyse nützlich sein, um Korrekturen bezüglich der LT durchzuführen. Die Ergebnisse sind in Tabelle 5.6 dargestellt. Die IWC-Daten wurden über drei Breitenbänder und für drei Grenzwerte mit IWC > 0 g km<sup>-2</sup>, IWC > 10 g km<sup>-2</sup> und IWC > 40 g km<sup>-2</sup> berechnet. Der letztgenannte Grenzwert wurde in SBUV-Trendanalysen von *DeLand und Thomas* (2015b) sowie in *Hervig und Stevens* (2014) verwendet. Sowohl die absoluten Mittelwerte als auch die absoluten LT-Schwankungen, hier ausgedrückt als Differenz zwischen

Maximal- und Minimalwert, nehmen zum Pol hin zu. Ebenfalls steigt das Verhältnis von Maxima- zu Minima, welches ein Maß für die relative LT-Variation ist, polwärts an. Zudem verringern sich die IWC-Verhältnisse mit höheren Grenzwerten, z.B. für das Breitenband  $64-74^{\circ}$ N von 10 (IWC<sub>th</sub> = 0 g km<sup>-2</sup>) zu 2 (IWC<sub>th</sub> = 40 g km<sup>-2</sup>) (siehe Tabelle 5.6; siebte Spalte). Zu beachten ist, dass die Häufigkeit des Auftretens einen großen Einfluss auf den Mittelwert hat. Dies ist insbesondere in niederen Breiten von Bedeutung, in dem eher kleinere PMC-Auftrittswahrscheinlichkeiten modelliert werden. Unter der Annahme eines IWC-Grenzwerts von 20 g km<sup>-2</sup> liegt die PMC-Auftrittswahrscheinlichkeit im Breitenband  $50^{\circ}-64^{\circ}$ N beispielsweise im Juli nur in der Größenordnung von 0-40%, während sie bei  $64^{\circ}-74^{\circ}$ N auf etwa 80% und bei  $74^{\circ}-82^{\circ}$ N auf 100% steigt (siehe Abbildung 4.13). Damit wird ein relativ steiler Anstieg hin zu höheren Breiten beschrieben, wohingegen der breitenabhängige Verlauf der Häufigkeiten für einen Grenzwert von IWC<sub>th</sub> = 40 g km<sup>-2</sup> einen flacheren Anstieg aufweist und mit geringeren Unsicherheiten behaftet ist.

Breiten- band (°N)	Grenz- wert $(g  \mathrm{km}^{-2})$	$\stackrel{\rm Mittel}{(gkm^{-2})}_{2)}^{\rm Mittel}$	$_{\rm (gkm^{-2})}^{\rm Max}$	$_{\rm (gkm^{-2})}^{\rm Min}$	$\begin{array}{c} {\rm Max-} \\ {\rm Min} \\ ({\rm gkm^{-2}}) \end{array}$	Max/ Min	$LT_{Max}$ (hh:mm)	$LT_{Max}$ (hh:mm)	${ m A}_{24} \ ({ m gkm^{-2}})$	$_{\rm (gkm^{-2})}^{\rm A_{12}}$	p24 (h)	p12 (h)
$50-64 \\ 64-74 \\ 74-82$	0 0 0	$1,9 \\ 19,5 \\ 51,1$	3,8 43,1 107,3	$0,6 \\ 4,3 \\ 17,8$	3,2 38,8 89,5	6,3 10,0 6,0	07:00 02:56 01:03	17:21 17:21 14:40	1,4 17,9 41,0	0,4 4,9 12,3	3,3 2,7 3,3	1,0 2,4 2,1
$50-64 \\ 64-74 \\ 74-82$	10 10 10	$16,9 \\ 34,3 \\ 57,5$	22,0 57,2 108,3	$11,2 \\ 17,3 \\ 26,6$	10,9 39,9 81,7	2,0 3.3 4,1	04:48 02:50 01:03	15:38 17:21 14:30	$^{6,4}_{17,6}_{37,1}$	2,4 5,3 10,8	3,3 2,6 3,2	$0,4 \\ 3,3 \\ 1,6$
$50-64 \\ 64-74 \\ 74-82$	40 40 40	48,5 64,7 81,7	54,4 85,1 121,1	41,7 43,2 53,4	12,741,967,7	1,3 2,0 2,3	06:05 02:38 01:46	09:18 16:54 14:50	50,5 18,4 30,4	19,1 5,1 7,7	3,1 2,7 2,5	$2,0 \\ 0,6 \\ 2,1$

Table 5.6: Klimatologie der LT-Schwankungen des Eisgehalts (IWC), modelliert mit MIMAS REF für drei Grenzwerte (IWC > 0 g km<sup>-2</sup>, IWC > 10 g km<sup>-2</sup> und IWC > 40 g km<sup>-2</sup>) und verschiedene Breitenbänder für Juli 1979–2013. Mittelwert: mittlerer IWC über einen Tageszyklus; Max: maximaler IWC über einen Tageszyklus; Min: minimaler IWC über einen Tageszyklus; Max-Min: Differenz zwischen maximalem und minimalem IWC; Max/Min: Verhältnis zwischen maximalem und minimalem IWC; LT<sub>Max</sub>: Lokalzeit (LT) in Stunden des Maximums; LT<sub>Min</sub>: Lokalzeit (LT) in Stunden des Minimums; A<sub>24</sub>: tägliche Amplitude eines harmonischen Fits, welcher die 24 und 12 h-Komponente einschließt; A<sub>12</sub>: halbtägige Amplitude; p<sub>24</sub>: Phase der ganztägigen Komponente; p<sub>12</sub>: Phase der halbtägigen Komponente.

Maximale Werte des IWC treten im Allgemeinen in den frühen Morgenstunden auf, während minimale Werte in den Nachmittagsstunden vorzufinden sind. Die Lokalzeiten vom IWC-Maximum und -Minimum sind unabhängig vom gewählten Grenzwert. Die Zeitdifferenz zwischen IWC-Maximum und -Minimum ist mit 12 h in allen Breitengraden und für alle drei Grenzen ungefähr konstant. Dies hebt hervor, wie wichtig es ist die Variationen der täglichen Daten hinsichtlich ihrer Gezeitenkomponenten aufzuschlüsseln. Tatsächlich werden alle täglichen Zeitreihen des IWC in hohem Maße durch harmonische Fits einer dominanten 24 h- und einer kleinen 12 h-Komponente approximiert. Das Verhältnis  $A_{24}/A_{12}$  variiert zwischen 2,6 und 3,9. Daher sind halbtägige Schwankungen des IWC von geringerer Bedeutung. Dies kann wiederum durch kleinere halbtägige Gezeitenamplituden in Temperatur und Wasserdampf erklärt werden.

Stevens et al. (2017) veröffentlichten Modellergebnisse von PMC IWC-Berechnungen in Abhängigkeit von der LT mit dem NOGAPS-ALPHA-Modell (engl.: Navy Operational Global Atmospheric Prediction System) unter Verwendung eines einfachen 1D-Bulk-Modells (Hervig et al., 2009a). Zur Berechnung von PMC-Auftrittswahrscheinlichkeiten und dem Eisgehalt werden dynamische Prozesse wie Auftrieb und der advektive Transport von Wasserdampf sowie eine detaillierte Mikrophysik wie die Nukleation vernachlässigt (Stevens et al., 2017; Russell et al., 2014). Die Autoren zeigen, dass der IWC für Juli 2009 in hohen Breiten am größten ist und ein Morgenmaximum zwischen 05:00 und 07:00 LT und ein Minimum am späten Nachmittag äquatorwärts von 80°N unabhängig vom Grenzwert vorhanden ist. Die LT-Berechnungen wurden in MIMAS auch für das einzelne Jahr 2009 durchgeführt, um nicht von möglichen langfristigen Schwankungen des lokalen Zeitverhaltens betroffen zu sein (siehe Anhang B). Die täglich gemittelten IWC-Werte des NOGAPS-ALPHA-Modells (IWC<sub>th</sub> =  $40 \,\mathrm{g \, km^{-2}}$ ) liegen bei  $100 \,\mathrm{g \, km^{-2}}$ , was durch die Berechnungen von MIMAS bestätigt wird. Die NOGAPS-ALPHA-Ergebnisse des IWC über einen Tageszyklus zeigen bei 68°N ein Verhältnis von IWC-Maximum zu -Minimum von etwa 1,5, was etwas geringer ist als das von MIMAS berechnete Verhältnis von 2,0. Gleichzeitig nehmen absolute LT-Schwankungen des IWC des NOGAPS-ALPHA Modells in Richtung höherer Breitengrade zu und sind unabhängig vom Grenzwert. Unter Berücksichtigung der Annahmen zur Vereinfachung des NOGAPS-ALPHA-Modells werden auch diese Charakteristiken durch MIMAS bestätigt. Es ist zu beachten, dass die Analysen auf Basis eines sehr einfachen eindimensionalen Modells gemacht wurden. Die Variationen von PMC-Parametern in allen Breitenbereichen wurden aus der Extrapolation des begrenzten Datensatzes abgeleitet. MIMAS ist deutlich komplexer und erlaubt eine detaillierte Analyse der PMC-Variationen für alle Breiten.

Zusammenfassend kann man sagen, dass diese Ergebnisse hervorheben, wie bedeutend eine Berücksichtigung von LT-Variationen in PMCs sind, speziell bei der Gegenüberstellung von verschiedenen Datensätzen, die über Breitengrade und Lokalzeit variieren. Die Analysen erfolgten auch für ein einzelnes Jahr (2009) mit dem Modelllauf LIH5 (siehe Anhang B), deren Ergebnisse mit denen im REF-Lauf übereinstimmen. Im Allgemeinen stellt sich heraus, dass die täglichen IWC-Variationen durch drei wichtige Punkte charakterisiert werden können:

- (1) LT-Variationen hängen vom Grenzwert ab, z.B. nehmen relative LT-Variationen mit größeren Grenzwerten ab.
- (2) LT-Variationen hängen vom Breitengrad ab, z.B. nehmen absolute LT-Schwankungen zum Pol hin zu.
(3) Es existiert eine Phasenverschiebung zum Pol hin, die unabhängig vom Grenzwert ist, z.B. bewegt sich das IWC-Maximum der mittleren Breiten von etwa 07:00 LT auf 01:00 LT in hohen Breiten.

Das LT-Verhalten des IWC weist sowohl Variationen von Jahr zu Jahr als auch Langzeitvariabilität auf, welche die in Tabelle 5.6 dargestellten 35-jährigen Mittelwerte beeinflussen können. Dies wird detaillierter im nächsten Unterkapitel untersucht.

# 5.6 Langfristige IWC-Variationen in Abhängigkeit von der Lokalzeit

Im vorherigen Abschnitt wurde eine 35-jährige Klimatologie der IWC-Variationen in Abhängigkeit von der LT von 1979 bis 2013 diskutiert. Nun wird untersucht, ob diese Variationen eine längerfristige Anderung aufweisen. Abbildung 5.10 zeigt eine Zeitreihe der monatlichen mittleren Amplituden der Juli-Monate für die 24-stündige und 12-stündige Gezeitenkomponente im Breitenband 67°-70°N für den MIMAS REF-Datensatz mit  $\rm IWC>0\,g\,km^{-2}.$  Die Zeitreihen weisen von Jahr zu Jahr erhebliche Schwankungen von bis zu 100 % auf, was mit den Beobachtungen der Gezeitenamplituden in PMC-Parametern bei ALOMAR vergleichbar ist (*Fiedler et al.*, 2011). Die ganztägige Komponente dominiert über alle Jahre hinweg, ihre Amplitude ist etwa doppelt so hoch wie die der halbtägigen Komponente. Beide Amplitudenzeitreihen sind hoch korreliert (r = 0.97). Die IWC-Werte steigen über den gesamten Zeitraum um den Faktor 3,8 an, dieser Anstieg stammt jedoch hauptsächlich aus den Jahren nach 1999. Das Ergebnis entspricht dem inhomogen Trendverlauf des PMC-Höhendatensatzes bei 83 km in Lübken et al. (2009a) und der SBUV IWC-Daten in *DeLand und Thomas* (2015b). Aus der linearen Regressionsanalyse folgen Steigungen von 3.4 und 1.4 g km<sup>-2</sup> pro Dekade für die ganztägige und halbtägige Amplitude. Die allgemeine Zunahme der Amplituden wird durch eine zunehmende Übersättigung aufgrund abnehmender Temperaturen in der Mesopausenregion beeinflusst (DeLand und Thomas, 2015b). Dies führt zu robusteren mittleren Bedingungen für die Bildung von Eispartikeln und einem größeren Eisgehalt. D.h. es ändert sich nicht die Modulation von PMCs durch Gezeiten, sondern der Absolutbetrag des Eisgehalts nimmt zu. Die Analyse zeigt, dass es in dem Breitenbereich 67°-71°N signifikante Variationen der 24-h und 12-h Komponente von Jahr zu Jahr gibt, die größer sind als die berechneten Tendenzen im Zeitraum 1979–2013. Das Verhältnis ganztägiger zu halbtägiger Amplitude bleibt zeitlich nahezu konstant. Interessanterweise bleiben die Phasen der 24-h und 12-h Komponente des IWC im Laufe der Jahre ebenfalls recht konstant (nicht dargestellt). Die robusten Amplitudenverhältnisse und die konstanten Phasen lassen darauf schließen, dass die im vorherigen Abschnitt vorgestellte mittlere Klimatologie über einen Zeitraum von 35 Jahren zuverlässige mittlere Bedingungen in Abhängigkeit von der Lokalzeit beschreibt.



Figure 5.10: Jahr-zu-Jahr Variationen der mittleren Amplituden für die 24-h und 12-h Gezeitenkomponente des Eisgehalts (IWC) modelliert mit MIMAS REF für das Breitenband  $67^{\circ} - 71^{\circ}$ N und Juli-Monate im Zeitraum 1979 – 2013. Es wurde kein Grenzwert angewendet. Die grauen Bereiche geben die Standardabweichungen der Daten wieder. Gestrichelte Linien zeigen die durch lineare Regression nach der Methode der kleinsten Quadrate berechneten Steigungen.

### 5.7 Zusammenfassung

In diesem Abschnitt wurde eine detaillierte Untersuchung der Gezeiteneinflüsse auf PMC-Eismassendichte, Radius, Eisanzahldichte, Helligkeit und Eisgehalt vorgestellt, welche mit der MIMAS-Modellversion REF und LIH5 berechnet wurden. Alle Größen zeigen das Maximum um eine Ortszeit von etwa  $3LT \pm 2h$ . Im Allgemeinen tragen die ganztägigen und halbtägigen Gezeitenkomponenten der Temperatur und des Wasserdampfs zum Gezeitenverhalten von PMC-Parametern bei, während die tertiären Gezeitenstrukturen von untergeordneter Bedeutung sind.

Es wurde eine Klimatologie der IWC-Variationen in Abhängigkeit von der Lokalzeit aus einem 35-jährigen Durchschnitt von 1979 bis 2013 für verschiedene Grenzwerte und Breitengrade mit der Modellversion REF berechnet. LT-Variationen hängen vom Breitengrad und vom Grenzwert des Eisgehalts ab. Es ist festzustellen, dass die absolute LT-Variation des IWCs im Allgemeinen mit dem Breitengrad zunimmt. Für das Breitenband  $64^{\circ}$  – 74°N und einen Grenzwert des IWC > 0 g km<sup>-2</sup> treten IWC Maxima und Minima mit einem Verhältnis von 10 auf. Für einen Grenzwert von IWC > 40 g km<sup>-2</sup> ändert sich das Verhältnis zu 2,0 (Max/Min). Mit zunehmender Breite tritt der maximale IWC in früheren Morgenstunden auf. Diese Phasenverschiebung sowie die Lokalzeiten für das Maximum und Minimum sind unabhängig vom Grenzwert. Die gleichen Charakteristiken sind auch in den Ergebnissen der LIH5-Modellsimulationen wiederzufinden.

Die PMC-Gezeitenamplituden zeigen erhebliche, jährliche Schwankungen sowie eine durchschnittliche Steigung von 1979 bis 2013 um ca. 30 % pro Dekade. Die Phasen beider Gezeitenkomponenten sind über den gesamten Datensatz nahezu konstant. Die Ergebnisse dieser Gezeitenanalyse sollten in Zukunft bei der Auswertung von langfristigen Variationen in Satellitenmessungen, die nur feste Lokalzeiten abdecken, verwendet werden.

# Chapter 6

# Vergleich von PMC-Parametern mit Beobachtungsdaten

Methoden zur qualitativen und quantitativen Verbesserung von MIMAS sind die Validierung und Kalibrierung des Modells. Diese sollen die Realitätstreue des Eismodells überprüfen und verbessern. Dazu erfolgt in diesem Kapitel der Vergleich von modellierten PMC-Parametern mit Beobachtungsdaten. Die Abschätzung von PMC-Parametern ist (1.) aus Messungen des Rückstreukoeffizienten (z.B. *DeLand und Thomas*, 2015a; *Fiedler et al.*, 2003a; von Cossart et al., 1999), (2.) des Extinktionsspektrums (z.B. *Debrestian et al.*, 1997; *Hervig und Gordley*, 2010) und (3.) aus Messungen der Streuphasenfunktion (z.B. *Gumbel und Witt*, 2001; *Bailey et al.*, 2009) möglich. Diese Messmethoden beziehen sich auch auf die PMC-Detektion mit Lidargeräten des IAP in 69°N und 54°N (1. zuzuordnen) und AIM-Satelliteninstrumenten SOFIE (2.) und CIPS (3.), welche in diesem Kapitel betrachtet werden.

### 6.1 Vergleich mit Lidardaten

Bodengestützte Messungen mit Lidars sind geografisch begrenzt, können aber einen vollständigen lokalen Tageszyklus abdecken. Das Institut für Atmosphärenphysik in Kühlungsborn betreibt Lidars an verschiedenen Standorten in mittleren und hohen Breiten. Hierzu zählt das Rayleigh-Mie-Raman-Lidar (RMR-Lidar) im Arctic Lidar Observatory for Middle Atmosphere Research (ALOMAR) auf der nordnorwegischen Insel Andøya (69°N), welches auch bei Tageslicht betrieben wird. Das RMR-Lidar dient der Messung von Temperaturen und Winden in der mittleren Atmosphäre, Aerosolschichten in der Stratosphäre, polaren Stratosphärenwolken in der unteren Stratosphäre im Winter sowie PMCs in der Mesopausenregion im Sommer. Seit 2010 wird ebenfalls ein tageslichtfähiges RMR-Lidar routinemäßig bei wolkenfreiem Himmel in Kühlungsborn (54°N) betrieben (z.B. *Gerding et al.*, 2016). Dieses ersetzt das frühere RMR-Lidar, das für nächtliche NLC-Beobachtungen von 1997 bis 2013 eingesetzt wurde. Aus den Messungen werden

stratosphärische Aerosole, Temperaturen und PMCs abgeleitet. Die Fähigkeit beider RMR-Lidars, auch unter Tageslichtbedingungen zu messen, erlaubt die Abdeckung eines ganzen Tageszyklus. In dieser Qualität heben sie sich weltweit von anderen Lidargeräten ab.

### 6.1.1 Vergleich mit ALOMAR Lidardaten ( $69^{\circ}N$ )

Im vorherigen Kapitel wurde gezeigt, dass PMCs bevorzugt während der Morgenstunden auftreten, was auf thermische Gezeiten der Hintergrundtemperaturen in der Mesopausenregion zurückzuführen ist. Um die Struktur der LT-Variationen in MIMAS zu validieren, werden die Modellergebnisse zunächst mit Beobachtungen des RMR-Lidars bei ALOMAR verglichen. Das RMR-Lidar befindet sich im ALOMAR Observatorium bei 69°N und 16°E (z.B. *von Zahn et al.*, 2000; *Fiedler et al.*, 2017). Die MIMAS-Ergebnisse werden auf einen Breiten- und Längenbereich von 67–71°N und 10–20°O beschränkt, um in der Nähe der Lidarposition zu sein. Es werden hier Modell- und Beobachtungsdaten aus 11 Jahren von 2003 bis 2013 verwendet.

Der maximale Rückstreukoeffizient der PMC ( $\beta_{max}$ ), in Einheiten von  $10^{-10} \,\mathrm{m^{-1} \, sr^{-1}}$ , wird als Maß für die Wolkenhelligkeit verwendet. Um verschiedene Wolkenklassen und die Detektionsempfindlichkeit des Lidars in die Analyse einzubeziehen, wurden die Messungen und die Modellergebnisse verschiedenen Helligkeitsbereichen zugeordnet:  $1 < \beta_{\max} < 4$ (schwache Wolken),  $\beta_{\text{max}} > 4$  (Langzeitnachweisgrenze des Lidars) und  $\beta_{\text{max}} > 13$  (starke Wolken) (Fiedler et al., 2003a; Baumgarten et al., 2008). Für die Umwandlung der Modellausgabe von MIMAS in Volumenrückstreukoeffizienten wurden Berechnungen der Mie-Theorie bei einer Wellenlänge von 532 nm und einem Streuwinkel von 180° für jedes Eispartikel im Modell angewandt. Die simulierte mittlere Helligkeit ist kleiner als die beobachtete Helligkeit mit dem Lidar bei einer Wellenlänge von 532 nm. Die PMC-Helligkeit ist proportional zur Anzahl der Eispartikel und mit  $r^5-r^6$  vom Radius der Eisteilchen abhängig. So würde eine Erhöhung des mittleren Radius um nur 25 % z.B. von 32 auf 40 nm zu einer Helligkeitsänderung um einen Faktor 4 führen. Es ist gerade die hohe Empfindlichkeit der Wolkenhelligkeit gegenüber der Partikelgröße, die einen hohen Anspruch an die Eismodellsimulationen bildet. Einerseits wird eine kleine Unterschätzung des mittleren Eisradius die Helligkeit drastisch verringern, während andererseits eine kleine Überschätzung des Radius die Helligkeit um einige Faktoren erhöht. Um dennoch den saisonalen sowie tageszeitlichen Verlauf von starken und schwachen Wolken mit den Lidardaten vergleichen zu können, wird die Wolkenhelligkeit im Modell bei der Einteilung der Wolkenklassen um den Skalierungsfaktor 4 reduziert. Der Skalierungsfaktor ist aufgrund der systematischen Abweichungen zur mittleren beobachteten Helligkeit für starke und schwache Wolken gleich groß. Dadurch enthalten die modellierten Auftrittswahrscheinlichkeiten einen systematischen Bias. Wie bereits in Abschnitt 4.2 erläutert wurde, sind auch die Häufigkeitsraten stark breitenabhängig. In einem kleinen Breitenbereich, insbesondere um

69°N, können sich die Auftrittswahrscheinlichkeiten leicht verdoppeln. Dieser Einfluss ist hier von untergeordneter Bedeutung, da sich die LT-Analyse auf relative Abweichungen von einem Mittelwert bezieht. Der Skalierungsfaktor für die Helligkeitsklassen wird nur für die Vergleiche mit den Lidardaten verwendet.

Abbildung 6.1 zeigt die mittleren saisonalen Schwankungen der PMC-Parameter, wie sie von MIMAS berechnet und vom Lidar beobachtet werden. Im Allgemeinen ergibt sich eine gute Übereinstimmung der modellierten und beobachteten PMC-Auftrittswahrscheinlichkeiten (Abb. 6.1 oben). Es sind Maximalwerte in den langfristigen und starken Wolkenklassen Mitte Juli um 20 bis 30 Tage relativ zur Sonnenwende vorzufinden. Schwache Wolken, die vom Lidar beobachtet werden, treten früher in der Saison auf als modellierte schwache Wolken. Dies deutet darauf hin, dass das Modell den mikrophysikalischen Prozess der Nukleation vielleicht unterschätzt, der im Wesentlichen das Auftreten schwacher PMCs aus kleinen Eispartikeln bestimmt. Eine weitere mögliche Erklärung wären fehlende Schwerewellen im LIMA. Diese könnten zu häufiger auftretenden sporadischen Ereignissen (Nukleation/Sublimation) am Anfang und am Ende der Saison durch Störungen in den Temperatur- und Windfeldern führen.

In Abbildung 6.1 (Mitte) sind modellierte und beobachtete PMC-Höhen zu sehen, die eine gute Übereinstimmung aufweisen. Die Unterschiede liegen in der Größenordnung von wenigen hundert Metern und sind kleiner als die geophysikalische Variabilität (Lidar:  $\pm 1.3$  km; Modell:  $\pm 0.7$  km - nicht gezeigt). Im Allgemeinen befinden sich schwache PMCs in größeren Höhen als starke PMCs. Diese Höhentrennung wird durch zwei Faktoren verursacht. Erstens brauchen größere Teilchen eine gewisse Zeit zum Wachsen, die durch einen langen Sedimentationsweg und turbulente Durchmischung gegeben wird. In dieser längeren Zeit fallen sie weiter herunter und können so zu starken PMCs in geringeren Höhen führen. Zudem sind die Sedimentationsgeschwindigkeiten der Eispartikel abhängig von ihrer Größe. Schwache PMCs bestehen aus Eispartikelverteilungen mit kleineren mittleren Radien, typischerweise um 20 nm, während starke PMCs aus größeren mittleren Radien, z.B. 40 nm bestehen. Da die Sedimentationsgeschwindigkeit mit der Partikelgröße (Masse) zunimmt, können größere Partikel entlang ihres Sedimentationspfades geringere Höhen erreichen. Zweitens beginnen kleinere Eispartikel aufgrund des Kelvin-Effekts bei tiefen Temperaturen früher zu sublimieren als größere. So bewirkt der negative vertikale Temperaturgradient der Atmosphäre, dass kleinere Partikel in größeren Höhen sublimieren als größere Partikel. Infolgedessen werden in niedrigeren Höhen größere Eispartikel gefunden, die eine höhere Helligkeit verursachen.

Abbildung 6.1 (unten) zeigen modellierte und beobachtete PMC-Helligkeiten. Auch hier scheint das Modell den Beginn und das Ende der Saison zu unterschätzen. Die Einteilung in Helligkeitsbereiche führt zu niedrigeren modellierten Werten in den verschiedenen Wolkenklassen als in den Lidardaten. Durch Multiplikation der modellierten Werte mit dem Skalierungsfaktor 4 werden die von dem Lidar beobachteten Helligkeitswerte annähernd wiedergegeben. Zusammenfassend ist der saisonale Verlauf der Auftrittswahrscheinlichkeit, Höhe und Helligkeit in guter Übereinstimmung mit den Lidarbeobachtungen, insbesondere für Juli-Bedingungen. Daher konzentriert sich die LT-Analyse im folgenden Abschnitt auf diese Kernzeit der nördlichen PMC-Saison (Monat Juli).



(a) MIMAS Modelldaten

(b) Lidarbeobachtung

Figure 6.1: Mittlere saisonale Variationen der PMC-Auftrittswahrscheinlichkeit, Höhe und Helligkeit ( $\beta_{max}$ ) bei ALOMAR für schwache (rot), langfristige (blau) und starke (grün) Wolken von 2003–2013 (Details siehe Text). (a) zeigt Modellergebnisse (MIMAS REF) für 67–71°N und 10–20°O und (b) Lidarbeobachtungen von ALOMAR. Die Kurven stellen Polynomanpassungen dritter Ordnung dar, die auf Tagesmitteln basieren. Die Zahlen in den Abbildungslegenden sind saisonale Mittelwerte. Zu beachten ist die unterschiedliche Skalierung der Helligkeitsachse für Modell- und Lidardaten. Diese Abbildung ist aus Schmidt et al. (2018) reproduziert.

Abbildung 6.2 zeigt die Variation der Häufigkeit, Höhe und Helligkeit der PMCs über den Tag hinweg für den modellierten und beobachteten Datensatz vom Juli 2003–2013 und die vorher definierten Helligkeitsklassen. Die Kurven sind jeweils Überlagerungen von vier harmonischen Funktionen mit Perioden von 24, 12, 8 und 6 h, die an die Stundenmittelwerte gefittet wurden, wie in *Fiedler et al.* (2017) beschrieben. Zu sehen sind teils ausgeprägte und persistente Variationen mit der Lokalzeit, die auf einen deutlichen Einfluss der Gezeiten auf die PMC-Parameter hinweisen. Die Variationen der Auftrittswahrscheinlichkeiten über

einen Tag sind bei starken Wolken sowohl in MIMAS als auch in Beobachtungen am größten. Wie in den Beobachtungen zeigen die Modellergebnisse das höchste Wolkenvorkommen während der Morgenstunden. Die Variationen der Höhe und Helligkeit innerhalb eines Tages sind antikorreliert, d.h. im Durchschnitt finden sich in niedrigeren Höhenlagen Eiswolken mit höherer Helligkeit. Im Allgemeinen ist eine vorherrschende ganztägige Oszillation vorzufinden, was in Übereinstimmung mit den Lidarbeobachtungen ist. Die Lidarbeobachtungen zeigen zusätzlich halbtägige Variationen in allen drei PMC-Parametern, welche vom Modell unterschätzt werden. Die modellierten Helligkeiten geben ein deutliches Maximum in den Morgenstunden um 04:00 LT wieder, welches in den Beobachtungen nicht vorhanden ist. Um diese unterschiedlichen Strukturen zu untersuchen, wurde das Verhältnis von ganztägigen zu halbtägigen Gezeitenamplituden berechnet ( $A_{24}/A_{12}$ ).



(a) MIMAS Modelldaten

(b) Lidarbeobachtung

Figure 6.2: Mittlere Variationen in Abhängigkeit von der Lokalzeit (LT) der PMC-Auftrittswahrscheinlichkeiten, Höhen und Helligkeiten ( $\beta_{max}$ ) bei ALOMAR für schwache (rot), langfristige (blau) und starke (grün) Wolken der Juli-Monate 2003–2013 (Details siehe Text). (a) zeigt Modellergebnisse (MIMAS REF) für 67–71°N und 10–20°O und (b) Lidarbeobachtungen von ALOMAR. Die Linien stellen einen Fit mit Perioden von 24, 12, 8 und 6 h, angewendet auf Stundenmittelwerte, dar. Die Zahlen in den Abbildungslegenden sind Tagesmittelwerte. Zu beachten ist die unterschiedliche Skalierung der Helligkeitsachse für Modell- und Lidardaten. Diese Abbildung ist aus *Schmidt et al.* (2018) reproduziert. Die Werte in Tabelle 6.1 zeigen, dass sowohl Modell- als auch Lidarfits für eine Reihe von Wolkenparametern und -klassen nahezu die gleichen Amplitudenverhältnisse aufweisen. Beispielsweise liegen die Verhältnisse für die Helligkeit der Langzeitnachweisgrenze des Lidars bei 1,82 (Modell) und 1,88 (Lidar), was bedeutet, dass die Gezeitenparameter in beiden Datensätzen sehr ähnlich sind. Somit sind die Phasenunterschiede von modellierten und beobachteten Daten, insbesondere für die halbtägige Gezeit (hier nicht dargestellt), hauptsächlich für die in Abbildung 6.2 sichtbaren Unterschiede verantwortlich. Die Überlagerung von ganztägigen und halbtägigen Gezeiten ergibt ein stärkeres Morgenmaximum im Modell im Vergleich zur beobachteten Helligkeit. Zusammenfassend lässt sich sagen, dass die beobachteten LT-Variationen der PMC-Auftrittswahrscheinlichkeit und der Helligkeit bei ALOMAR von MIMAS gut reproduziert werden.

	MIMAS Modelldaten			Lidarbeobachtung		
	AW	Höhe	Helligkeit	AW	Höhe	Helligkeit
schwach	1,40	2,25	5,71	0,89	0,67	0,71
langfristig	$2,\!45$	$2,\!36$	$1,\!82$	$2,\!51$	0,77	$1,\!88$
stark	$2,\!00$	1,75	1,96	$1,\!59$	3,02	$2,\!44$

Table 6.1: Verhältnis von ganztägiger und halbtägiger Gezeitenamplitude  $(A_{24}/A_{12})$ , jeweils für Modelldaten (MIMAS REF) und Lidarbeobachtungen von Auftrittswahrscheinlichkeiten (AW), Höhen und Helligkeiten. Die Werte sind für verschiedene Wolkenklassen (Details siehe Text) bei ALOMAR nach Abbildung 6.2 für Juli-Monate der Jahre 2003– 2013 berechnet. Fettgedruckte Zahlen kennzeichnen Werte, die innerhalb der relativen Unsicherheit von etwa 15% übereinstimmen (Konfidenzniveau von 95%).

### 6.1.2 Vergleich mit Lidardaten aus Kühlungsborn (54°N)

In diesem Abschnitt werden PMC-Parameter in mittleren Breiten (54°N) näher untersucht. Hierfür wird im Folgenden der PMC-Datensatz der maximalen Rückstreukoeffizienten einer Saison, gemessen mit dem Kühlungsborner RMR-Lidar, in dem Zeitraum 2010–2018 analysiert. Verglichen werden diese Beobachtungen mit den beiden Modellläufen REF und LIH5 für einen Breitenbereich von  $54^{\circ}N \pm 3^{\circ}N$ . Das in Kühlungsborn stationierte RMR-Lidar emittiert Licht bei einer Wellenlänge von 532 nm. Das Lidar ist seit 2010 für Messungen bei Tag optimiert und ist derzeitig das einzige tageslichtfähige Lidar in mittleren Breiten. Die Lidardaten überschneiden sich mit den verfügbaren Modelldaten über 4 Jahre (2010–2013). Dieser Datensatz wird auch für den Vergleich mit den Modellergebnissen verwendet. MIMAS nutzt Daten vom Zirkulationsmodell LIMA, welches ab 45 km Höhe frei laufend ist. Somit ist nicht zu erwarten, dass ein bestimmtes Jahr eines Modelllaufs exakt mit einem bestimmten Jahr der Beobachtungen übereinstimmt. Deshalb erfolgt zusätzlich der Vergleich von Mittelwerten über einen längeren Zeitraum. Für die statistische Analyse der maximalen Rückstreukoeffizienten muss die für das Instrument spezifische Sensitivität berücksichtigt werden. Das RMR-Lidar in Kühlungsborn ist im Allgemeinen empfindlich für Rückstreukoeffizienten größer als  $0,2 \cdot 10^{-10} \text{ m}^{-1} \text{sr}^{-1}$ . Unabhängig vom Sonnenstand können PMCs eindeutig bei Werten größer als  $0,5 \cdot 10^{-10} \text{ m}^{-1} \text{sr}^{-1}$  identifiziert werden (*Gerding et al.*, 2013). Alle 33 s wird fortlaufend ein Mittelwert über 15.000 Impulse berechnet, was einer Integrationszeit von 8 Minuten entspricht. MIMAS gibt die Rückstreukoeffizienten bei gleicher Wellenlänge routinemäßig jede Stunde aus.

In den Abbildungen 6.3 und 6.4 sind beobachtete und mit MIMAS REF modellierte Häufigkeitsverteilungen für die Höhe und die Helligkeit der PMC dargestellt. Es sind Wahrscheinlichkeitsdichten gezeigt, welche die relative Häufigkeit pro Intervall angeben. Das heißt, die Fläche unter dem Histogramm beträgt Eins. Abbildung 6.3 zeigt eine symmetrische Verteilung der PMC-Höhe, deren arithmetisches Mittel in etwa dem Median entspricht. Die Histogramme zeigen speziell für häufig auftretende Ereignisse eine sehr gute Übereinstimmung. Die Höhe der am meisten auftretenden maximalen Rückstreukoeffizienten ist in beiden Datensätzen annähernd gleich ( $\sim 83 \,\mathrm{km}$ ). Lediglich die Streubreite, die durch die Spannweite zwischen dem größten und kleinsten Wert des gesamten Datensatzes definiert ist, variiert etwas. MIMAS zeigt eine Streubreite von 80,5 bis 86,0 km, wohingegen das Lidar auch mittlere PMC-Höhen bis zu  $\sim$ 79 km beobachtet. Die breitere Verteilung der Beobachtungen kann durch den Einfluss von Schwerewellen erklärt werden, die in MIMAS nicht ausreichend vorhanden sind und zu einer geringeren Variabilität führen. Diese gemessenen Ereignisse unterhalb von 80,5 km treten sehr selten auf. Wenn man diese seltenen Ereignisse vernachlässigen würde, stimmen die Verteilungen fast perfekt überein. Die Rückstreukoeffizienten in Abbildung 6.4 deuten auf eine exponentielle Häufigkeitsverteilung der Helligkeit hin. Dies wird durch die Darstellung der Datenpunkte auf der semilogarithmischen Skala (Abb. 6.5), die um die Gerade streuen, bestätigt. Die Steigungen des linearen Fits der modellierten und beobachteten Helligkeiten sind für Werte größer 1,7 · 10<sup>-10</sup>m<sup>-1</sup>sr<sup>-1</sup> im Vergleich zu den Lidarbeobachtungen sehr ähnlich. Für sehr kleine Helligkeiten scheint die Approximation einer exponentiellen Verteilung nicht zu gelten. Auch hier ist, wie beim Vergleich mit den Lidardaten bei 69°N, anzumerken, dass die simulierte mittlere Helligkeit kleiner als die beobachtete Helligkeit mit dem Lidar bei einer Wellenlänge von 532 nm ist und sich sogar um zwei bis drei Größenordnungen unterscheidet. Der Einfluss der betrachteten unterschiedlichen Zeiträume auf die Häufigkeitsverteilungen ist erwartungsgemäß sehr gering.

In Abbildung 6.6 sind Zeitreihen von 2003 bis 2018 der mittleren Eigenschaften wie PMC-Höhe und Helligkeit sowie die Anzahl der in die Mittlung eingehenden Profile gezeigt. Die mittlere PMC-Höhe des REF-Laufs bei 54°N ( $83,1 \pm 0,2 \text{ km}$ ) ist etwas höher gelegen als die mittlere PMC-Höhe der Beobachtungsdaten ( $82,5 \pm 0,3 \text{ km}$ ). Es ist zu sehen, dass die mittlere PMC-Höhe eines Datensatzes im Allgemeinen relativ konstant ist. Die mittlere



Figure 6.3: Relative Häufigkeiten pro 0,1 km Intervallbreite ( $\Delta x$ ) der Höhe der maximalen Rückstreukoeffizienten (Helligkeit), gemittelt über mehrere PMC-Saisons. (a) zeigt Modellergebnisse (MIMAS REF) für 54°N ± 3°N und (b) Lidarbeobachtungen von Kühlungsborn für  $\beta_{\text{max}} = 0, 5 \cdot 10^{-10} \text{ m}^{-1} \text{sr}^{-1}$ . Der rote Bereich gibt die Standardabweichung der gemittelten Jahre wieder und die gestrichelte rote Linie markiert den Modus der Verteilung (2010–2013).



Figure 6.4: Wie Abbildung 6.3 für maximale Rückstreukoeffizienten mit einer Intervallbreite von  $0, 1 \cdot 10^{-10} \text{ m}^{-1} \text{ sr}^{-1}$ .

PMC-Höhe des LIH5-Laufs liegt bei etwa  $82,5 \text{ km} \pm 0,1 \text{ km}$  und ist identisch mit der beobachteten Höhe. Wie im Kapitel 4 diskutiert wurde, ist der übersättigte Bereich im LIH5-Lauf gerade bei 54°N gegenüber dem REF-Lauf größer und in geringeren Höhen vorzufinden. Dadurch sedimentieren die Eisteilchen im LIH5-Lauf weiter nach unten und sublimieren in geringeren Höhen als im REF-Lauf. Der Vergleich der mittleren modellierten PMC-Höhen bei 54°N und 69°N für schwache PMCs (Abb. 6.1) zeigt, dass die PMC-Höhe in polaren Breiten nur um 400 m höher gelegen ist. Lübken et al. (2008) haben mit den vom IAP betriebenen Lidargeräten einen kleinen Anstieg der PMC-Höhe in Abhängigkeit von der geografischen Breite beobachtet, der aber nicht signifikant ist. Auch in *Chu et al.* (2006) wurde eine Zunahme der PMC-Höhe hin zu höheren Breiten festgehalten, was



Figure 6.5: Logarithmus der Wahrscheinlichkeitsverteilung der Helligkeit modelliert mit MIMAS REF der gesamten PMC-Sasion im Vergleich mit Lidarbeobachtungen bei 54°N für  $\beta_{\text{max}} = 0, 5 \cdot 10^{-10} \,\mathrm{m^{-1} sr^{-1}}$ . Der Punktabstand beträgt  $0, 1 \cdot 10^{-10} \,\mathrm{m^{-1} sr^{-1}}$ ; m gibt die Steigung des linearen Fits (Methode der kleinsten Quadrate) pro  $10^{-10} \,\mathrm{m^{-1} sr^{-1}}$  an.

im Gegensatz zu den Ergebnissen in *Carbary et al.* (2001) ist, die keine systematische Variation der Wolkenhöhen mit dem Breitengrad aufweisen. Wie bei den PMC-Höhen ist die Auswirkung der unterschiedlichen Zeiträume auf den Medianwert der Helligkeit gering zu bewerten, wodurch die Werte auch für alle verfügbaren Jahre der jeweiligen Datensätze vergleichbar werden. Es zeigt sich, dass der Medianwert der Helligkeit (2010–2013) in den Lidardaten gegenüber dem REF-Wert um einen Faktor 6 größer ist. Der LIH5-Medianwert ist etwa  $(0.8 \pm 0.59) \cdot 10^{-10} \,\mathrm{m^{-1} sr^{-1}}$  geringer als die Beobachtungen und beträgt  $(0.57 \pm 0.06) \cdot 10^{-10} \,\mathrm{m^{-1} sr^{-1}}$ . Durch die geringeren Temperaturen im LIH5-Lauf gegenüber dem REF-Lauf (siehe Kapitel 4) ergeben sich robustere Bedingungen für die Eisbildung, so dass mehr Eispartikel gebildet werden können. Diese resultieren in größere Helligkeit zu den PMC-Höhen wieder.

Während PMCs in hohen Breiten relativ häufig sind, treten sie bei 54°N nur mit einer mittleren jährlichen Wahrscheinlichkeit von 10% und weniger auf (*Gerding et al.*, 2013). Die statistische Signifikanz der Lidarergebnisse wird durch die geringe Auftrittswahrscheinlichkeit der Eiswolken in mittleren Breiten und zusätzlich durch die Messbedingungen, die einen wolkenfreien Himmel voraussetzen, begrenzt (*Gerding et al.*, 2013). Wie beim Vergleich mit den Lidardaten von ALOMAR werden auch die Helligkeitswerte im Modell gegenüber Lidarmessungen in 54°N zu gering berechnet. Die geringen Auftrittswahrscheinlichkeiten potenzieren die Unsicherheiten in der Helligkeitsberechnung im Modell. Um dennoch die Strukturen der Auftrittswahrscheinlichkeiten in Abhängigkeit von der Lokalzeit vergleichen zu können, wurde die Grenze für die modellierte Helligkeit um den Faktor 40 reduziert. Dies entspricht einem Grenzwert von  $0,0125 \cdot 10^{-10} \,\mathrm{m^{-1} sr^{-1}}$ . Die Auftrittswahrscheinlichkeiten sind in Abbildung 6.7 dargestellt, welche die LT-Variationen wiedergeben. Diese variieren in den Beobachtungen im Zeitraum 2010–2013 zwischen 10%



Figure 6.6: Jahresmittelwerte der PMC-Höhe sowie Jahresmedianwerte der Helligkeit für Lidarbeobachtungen und modellierte Daten des MIMAS REF- und LIH5-Laufs von Kühlungsborn für  $\beta_{\rm max} > 0, 5 \cdot 10^{-10} \, m^{-1} sr^{-1}$ . Die schattierten Bereiche geben die Standardabweichung für die Höhen und das 25-ste und 75-ste Perzentil für die Helligkeiten an.

(4 LT) und 2,4 % (20 LT). Das LT-Maximum in MIMAS tritt gegenüber den Beobachtungen versetzt (8 LT) auf. Der Verlauf in Abhängigkeit von der Lokalzeit variiert im Modell von Jahr zu Jahr weniger als in den Beobachtungen, bei denen die LT-Variation zwischen den einzelnen Jahren sehr variabel ist. *Gerding et al.* (2013) haben bereits beschrieben, dass sich die saisonalen Durchschnittsereignisse der Lidarbeobachtungen stark zwischen den Jahren unterscheiden. Dennoch sind die mittleren tageszeitlichen Variationen ähnlich, was nachfolgend für verschiedene Grenzwerte diskutiert wird.



Figure 6.7: Mittelwerte der Auftrittswahrscheinlichkeiten bei 54°N in Abhängigkeit von der Lokalzeit (LT) für Lidarbeobachtungen und MIMAS REF Modelldaten für maximale Rückstreukoeffizienten ( $\beta_{\text{max}}$ ) mit Werten größer als  $0.5 \cdot 10^{-10} \text{ m}^{-1} \text{sr}^{-1}$  (Lidar) bzw.  $0.0125 \cdot 10^{-10} \text{ m}^{-1} \text{sr}^{-1}$  (MIMAS). Die Linien entsprechen sinusförmigen Anpassungsfunktionen (Methode der kleinsten Quadrate) mit 24-h und 12-h Perioden. Die schattierten Flächen entsprechen der Standardabweichung der gemittelten Jahreswerte.

In Abbildung 6.8 sind die Auftrittswahrscheinlichkeiten gemittelt über mehrere Jahre für verschiedene Grenzwerte wiedergegeben. Die Lidarbeobachtungen weisen auf eine erhöhte Häufigkeit am frühen Morgen und eine Verringerung am Abend hin. Das Modell scheint die halbtägige Gezeitenkomponente auch wie bei  $69^{\circ}$ N in mittleren Breiten bei  $54^{\circ}$ N gegenüber den Lidardaten zu unterschätzen. In MIMAS ist eine abnehmende 24 und 12 h Amplitude mit größer werdendem Grenzwert zu verzeichnen, wohingegen in den Lidardaten nur die 24 h Gezeitenamplitude abnimmt und die 12 h Amplitude relativ konstant bleibt (hier nicht gezeigt). Somit sind die Unterschiede zwischen Modell- und Lidardaten nicht nur durch Phasenunterschiede und der Überlagerung von halbtägiger und ganztägiger Gezeit wie bei 69°N zu erklären. In Gerding et al. (2013) wurde festgehalten, dass die täglichen Schwankungen der Helligkeit bei Kühlungsborn von den Windverhältnissen und der Advektion aus dem Norden dominiert werden. Die REF Modellkonfiguration zeigt im Allgemeinen gegenüber Meteorradarmessungen einen geringeren meridionalen Wind (siehe Kapitel 4.1). Eine bessere Übereinstimmung mit den Lidarbeobachtungen sollte sich aufgrund der realistischeren Winde für den LIH5 Modelllauf ergeben. Dies kann hier nicht überprüft werden, da diese Daten nur bis 2009 verfügbar sind.



Figure 6.8: Stündliche Mittelwerte der Auftrittswahrscheinlichkeiten maximaler Rückstreukoeffizienten bei 54°N für unterschiedliche Helligkeitsgrenzen für  $\beta_{\text{max}}$  in  $10^{-10}$  m<sup>-1</sup>sr<sup>-1</sup> der Lidarbeobachtungen und Modelldaten MIMAS REF für 2010 bis 2013. Die Linien entsprechen sinusförmigen Anpassungsfunktionen (Methode der kleinsten Quadrate) mit 24-h und 12-h Perioden.

## 6.2 Vergleich mit AIM-Satellitendaten

Neben den bodengebundenen Beobachtungen bieten Satellitenmessungen eine gute Vergleichsgrundlage für die MIMAS Simulationen. Die Modellergebnisse werden mit Juli-Medianwerten und Wahrscheinlichkeitsverteilungen, abgeleitet von Messungen der Aeronomy of Ice in the Mesosphere (AIM) Satelliteninstrumente, verglichen. Eine Beschreibung der Instrumente des AIM-Satelliten ist im Anhang D zu finden. In den beiden folgenden Abschnitten werden zunächst die Modellergebnisse im Vergleich mit dem CIPS-Instrument und anschließend mit SOFIE präsentiert.

### 6.2.1 CIPS

In dieser Arbeit werden CIPS Level 3c Daten der Version v4.2 verwendet. Diese sind eine Zusammenfassung der CIPS-Daten für jede PMC-Saison ab 2007 (*LASP*, 2011). Die Daten liegen mit hoher Auflösung vor, beziehen sich immer auf nur eine einzige Umlaufbahn und sind für ein Breitenband von einem Grad von 50° bis 85° Breite verfügbar. Für die wissenschaftliche Analyse wird der aufsteigende und der absteigende Teil der Satellitenumlaufbahn getrennt voneinander betrachtet, welches mit der Sensitivität der CIPS-Wolkenerkennung, die mit dem solaren Zenitwinkel (SZA) variiert, begründbar ist (*Lumpe und Randall*, 2011). Die Empfindlichkeit der CIPS-Wolkenerkennung variiert mit dem solaren Zenitwinkel aus zwei Gründen: Mit zunehmendem solaren Zenitwinkel nimmt das Rayleigh-Hintergrundsignal ab, während gleichzeitig die zur Sonne gerichtete CIPS Kamera mehr vorwärts gerichtete Streuwinkel erfasst (*Lumpe und Randall*, 2011). Beide Faktoren erhöhen den Unterschied zwischen Wolken- und Hintergrundbeiträgen im gemessenen Streuprofil und damit auch die Detektionsempfindlichkeit. Der absteigende Ast der CIPS Umlaufbahn umfasst geringere SZA-Werte, welche wiederum mit einer geringen Wolkendetektion verbunden sind (*Lumpe und Randall*, 2011). Mit der getrennten Analyse der beiden Blickrichtungen soll zudem vermieden werden, dass sich Messungen zu unterschiedlichen Ortszeiten vermischen. Unter Berücksichtigung der zeitlichen Abdeckung von CIPS für die Nordhalbkugel wurde für die Auswertung zum einen der Zeitraum 18 bis 24 Uhr betrachtet, was dem aufsteigenden Ast des Instruments entspricht und zum anderen 12 bis 18 Uhr, als Approximation für den absteigenden Ast des Instruments (siehe Anhang D). Für quantitative Analysen der Albedo für die Wellenlänge  $\lambda = 265 \text{ nm} (A_{265})$ , Radien und des IWC wird empfohlen, nur Daten mit einer Albedo größer als  $2 \cdot 10^{-6} \text{sr}^{-1}$ und zusätzlich für die Analyse der Radien und des IWC nur Partikel mit einem Radius größer 20 nm zu verwenden (Cora Randal, private Kommunikation, 2015).

# Vergleich von Albedo, Auftrittswahrscheinlichkeit, IWC und Radien

Für den Vergleich wurde das MIMAS Modell durch die Berechnung der Albedo  $(A_{265})$  für die Wellenlänge  $\lambda = 265$  nm und des Streuwinkels, der durch die Nadir-Blickrichtung und den jeweiligen Sonnenstand gegeben ist, erweitert. Zusätzlich wurde in MIMAS die Berechnung des Medianradius einer Gitterbox integriert. In den älteren Modellversionen erfolgte vom Modell nur die Ausgabe des mittleren Radius einer Gitterbox. Median und arithmetisches Mittel unterscheiden sich bis zu 5 nm und sind zudem von der geografischen Breite abhängig (nicht gezeigt). Dies lässt auf eine asymmetrische Verteilung der Radien innerhalb einer Modellgitterbox schließen und spricht somit gegen eine gaußförmige Verteilung. Um mit den Satellitendaten konsistent zu bleiben, wird für den Vergleich der Medianwert verwendet. Auf welche Faktoren es bei der Gegenüberstellung von Satellitenbeobachtungen mit anderen Messungen oder Modellierungen ankommt, ist im Anhang C zusammengestellt. Dazu gehören beispielsweise die Beobachtungsgeometrie, die zeitliche und räumliche Abdeckung der Messungen sowie die Sensitivität der Instrumente. Für den Vergleich mit CIPS wurden Streubedingungen, Beobachtungsgeometrie und Instrumentenempfindlichkeit berücksichtigt.

Die Stärke von CIPS ist die horizontale Auflösung und eine großflächige Abdeckung, die einen Vergleich der PMC-Parameter als Funktion der geografischen Breite mit MI-MAS erlaubt. In Abbildung 6.9 ist die Auftrittswahrscheinlichkeit (AW) von PMCs mit  $A_{265} > 2 \cdot 10^{-6} \text{sr}^{-1}$  der CIPS Messungen und der MIMAS Modellversionen REF und LIH5 dargestellt. Die generelle Struktur, wie eine Zunahme mit der geografischen Breite, sind im Modell und in den Beobachtungen sehr ähnlich. Die Unterschiede zwischen den Modellkonfigurationen, können durch die geringeren Temperaturen im LIH5-Lauf gegenüber dem REF-Lauf erklärt werden, die robustere Bedingungen für die Eisbildung ergeben. Im Mittel ist die AW des REF-Laufs bis zu 20 % geringer und des LIH5-Laufs bis zu 20 % größer als die CIPS-Beobachtungen, wobei die Differenzen zwischen 70 und 75°N am größten und in den polaren Breiten am geringsten sind. Die Studien in Kapitel 4 haben gezeigt, dass sich die AW in diesem Bereich innerhalb weniger Breitengrade verdoppeln kann. Kleine Abweichungen gegenüber der wahren Atmosphäre, wie eine geringe Verzerrung im Wasserdampf, eine mögliche Verzerrung der Temperatur, fehlende oder zu geringe Wellenaktivitäten im subskaligen Bereich, die vom Modell nicht aufgelöst werden, aber auch durch große Temperaturschwankungen in der Nähe der Mesopause, die entweder zu wenig oder zu klein sind, um Nukleationsprozesse zu beeinflussen, können sich stark auf die AW auswirken. Angesichts dieser Sensitivität der AW in Abhängigkeit von der geografischen Breite, stimmen die Modelldaten im Allgemeinen gut mit den CIPS-Daten überein.



Figure 6.9: Auftrittswahrscheinlichkeiten modelliert mit MIMAS (rot) im Vergleich zu CIPS (blau) mit dem aufsteigenden Ast für 2007–2009. Gestrichelte rote Linie: Modelldaten für alle Lokalzeiten; Durchgezogene rote Linie: Modelldaten unter Berücksichtigung der von CIPS gemessenen Lokalzeit (18–24 LT). Schattierte Flächen kennzeichnen die Standardabweichung der gemittelten Jahre.

In Abbildung 6.10 ist die Albedo, der Eisgehalt und der Medianradius in Abhängigkeit von der geografischen Breite dargestellt. Es zeigt sich, dass die Albedo der beste übereinstimmende Parameter zwischen Modell- und CIPS-Daten ist. Unter Berücksichtigung des 25. und 75. Perzentils ist die Albedo des REF-Laufs mit den Beobachtungen für alle Breiten gleich groß, wohingegen die Albedo im LIH5-Lauf unterhalb von 75°N höhere Werte als CIPS aufweist. Der breitenabhängige Verlauf der Albedo und des IWCs verhalten sich ähnlich und zeigen eine größere Variation sowie eine allgemeine Zunahme der Werte hin zu polaren Breiten. Wie in vielen PMC-Satellitenbeobachtungen müssen für die Ermittlung der Partikelgröße auch für CIPS einige Annahmen gemacht werden. Es werden Parameter, wie die Verteilungsform, die Verteilungsbreite und das Verhältnis der Achsen, die auf anderen Messungen und theoretischen Arbeiten beruhen, adaptiert (*Carstens et al.*, 2013). Die Form der Partikelgrößenverteilung ist Gegenstand aktueller Forschung. Derzeitig ist für die Form die Annahme einer Gaußverteilung weit verbreitet (*Berger und von Zahn*, 2002; *Rapp und Thomas*, 2006; *Baumgarten et al.*, 2010). Messungen mit dem Lidar ergaben eine starke Korrelation zwischen dem Radius und der Verteilungsbreite für Partikelgrößen unter 40 nm. Diese in *Baumgarten et al.* (2010) dokumentierte Beziehung zwischen dem mittleren Radius und der Verteilungsbreite wird auch für die Ableitung der Radien aus den CIPS Messungen (*Lumpe et al.*, 2013) und SOFIE-Auswertungen verwendet. Eine Änderung dieser Annahmen hat somit auch eine Veränderung in den CIPS Radien und dem IWC zur Folge. Der IWC wird gegenüber MIMAS in mittleren Breiten unterschätzt und die Radien überschätzt. Diese Unterschiede sind eher gering zu bewerten mit dem Verweis, dass der IWC und die Radien des CIPS-Instruments abgeleitete Größen sind. *Bailey et al.* (2015) erklären, dass das CIPS IWC kleiner als das von SOFIE gemessene IWC ist, was aus Messungen eines gemeinsamen Volumens hervorgeht. Wie später gezeigt wird, stimmen die Modellergebnisse des mittleren IWC gut mit SOFIE-Messungen überein.

Auffällig sind die relativ großen Radien von CIPS zwischen 70° und 78°N gegenüber den modellierten Werten, wohingegen die Radien ab 78°N zum Pol hin wieder kleiner werden. Für säulenintegrierende Messungen, wie die Nadirmessungen mit CIPS, sind sehr große Partikel oft nicht sichtbar, da hellere Teile der Wolke mit kleineren Partikeln entlang der Sichtlinie dominieren. Populationen sehr großer Partikel werden für säulenintegrierende Messungen erst sichtbar, wenn sie "losgelöst" von den helleren Regionen auftreten. Daher können Beobachtungen von sehr großen Partikeln mit Beobachtungen von relativ geringer Wolkenhelligkeit zusammen fallen (Rusch et al., 2017). In mittleren Breiten liegen die MIMAS-Eisradien bis zu 8 nm niedriger als die CIPS-Daten. In Rusch et al. (2017) wird angegeben, dass eine Reduzierung von einem Prozent der Hintergrundamplitude der Rayleigh-Streuung zu einem Partikelgrößenfehler von 10 nm führt. Typische Fehler in der Amplitude der Hintergrundstrahlung (Rayleigh) sind während der PMC-Saison etwas kleiner als 1%, können aber die Unsicherheiten gegenüber der Simulation begründen. Des Weiteren fällt auf, dass die Radien in niederen Breitengraden in CIPS zunächst abnehmen und dann wieder mit zunehmender Breite größer werden. In diesen niederen Breiten ist CIPS nicht so sensitiv wie in polaren Breiten (Lumpe und Randall, 2011).

Die CIPS-Daten dienen zur Validierung der modellierten Breitenabhängigkeit von PMC-Parametern. Zusammenfassend lässt sich sagen, dass MIMAS realistische Eiswolken im gesamten PMC-Bereich der Nordhemisphäre reproduziert. Im Allgemeinen sind die Simulationen unter Berücksichtigung der von CIPS gemessenen Lokalzeit besser im Einklang mit den Beobachtungen. Dies gilt insbesondere in mittleren Breiten für die Albedo und das IWC.

Es ist eine bessere Übereinstimmung der Modelldaten und der Satellitendaten des aufsteigenden gegenüber dem absteigenden Astes anzumerken (nicht dargestellt). Der absteigende Ast in CIPS ist gerade in niederen Breiten von einigen Unsicherheiten geprägt, da dieser Bereich mit kleineren SZA-Werten und einer geringeren Detektionsrate verbunden ist (*Lumpe und Randall*, 2011).



Figure 6.10: Medianwerte der Albedo, des Eisgehalts (IWC) und der Radien in Höhe der größten Rückstreukoeffizienten, modelliert mit MIMAS (rot) im Vergleich zu CIPS (blau) mit dem aufsteigenden Ast für 2007–2009. Durchgezogene, rote Linien: Modelldaten mit Berücksichtigung der von CIPS gemessenen LT (18–24 LT); Gestrichelte, rote Linien: Modelldaten aller LT. Für alle Daten wurde  $A_{265} > 2 \cdot 10^{-6} \text{sr}^{-1}$  angenommen. Zusätzlich wurden für die Radien und den IWC nur Partikel mit einem Radius größer als 20 nm in die Berechnung miteinbezogen. Schattierte Flächen kennzeichnen das 25-ste und 75-ste Perzentil der natürlichen Variabilität. Links: Modelllauf REF; Rechts: Modelllauf LIH5.

#### 6.2.2 SOFIE

In diesem Abschnitt erfolgt der Vergleich von modellierten Temperaturen und Eisparametern mit Messungen des AIM-Satelliteninstruments SOFIE. Hierfür wurden in dieser Arbeit SOFIE-Daten der Version V1.3 (Hervig, 2015) verwendet. Die sogenannten "summary-Files" geben eine Übersicht jeder PMC-Saison und enthalten vertikale Profile der Temperatur, des Drucks, der Gasmischungsverhältnisse und der PMC Parameter. Die folgende Analyse bezieht sich auf das einzelne Jahr 2008. Weitere Jahre wurden ebenfalls ausgewertet und sind im Anhang D zu finden. Diese weisen ähnliche Ergebnisse auf. Die Gezeitenanalyse (Kapitel 5) zeigte deutlich die Abhängigkeit des LT-Verhaltens der PMC-Parameter von der geografischen Breite und von den Grenzwertbedingungen auf. Somit erfordern die Vergleiche mit SOFIE die Berücksichtigung der gemessenen Lokalzeit und der räumlichen Abdeckung (siehe Anhang D) sowie der Sensitivität des Satelliteninstruments. Die Modellergebnisse beziehen sich auf die tägliche Breitenposition von SOFIE. Um die Bedeutung der LT-Variation hervorzuheben, werden die Berechnungen sowohl für alle Lokalzeiten durchgeführt, als auch die gemessene LT von SOFIE ( $\sim 23 \text{ LT} \pm 1 \text{ h}$ ) ausgewertet. Zudem sind die modellierten Daten durch einen Grenzwert für die Eismassendichte (IWD  $>0.06\,\mathrm{g\,km^{-3}})$  und für den Eisgehalt (IWC  $>0.5\,\mathrm{g\,km^{-2}})$ , die durch die Sensitivität des Instruments vorgegeben werden (Herviq und Stevens, 2014; Herviq et al., 2009a), limitiert.

Abbildung 6.11 zeigt die mittleren vertikalen Profile der Temperatur für Juli 2008 sowie die mittleren Verteilungsfunktionen in Höhe der maximalen Eismassendichte von SOFIE und MIMAS. Die Temperaturen im Modell und in den Beobachtungen am unteren Rand der PMC-Region zwischen 79 und 81 km weichen maximal um 1 K voneinander ab und sind damit sehr ähnlich (Abb. 6.11a). In der Mesopausenregion ergeben sich in MIMAS deutlich geringere Temperaturen als in SOFIE. Der Vergleich verschiedener Temperaturprofile hat bereits gezeigt, dass die SOFIE-Messungen auch gegenüber anderen Beobachtungen wie SABER, MLS und Raketenmessungen höhere Werte aufweist (siehe Tabelle 4.1). Wenn das Modell das gleiche modellierte Wasserdampfmischungsverhältnis annimmt, aber auf SOFIE Temperaturen abgestimmt wäre, würde es im Mittel zu warm sein, um das Wachstum von Eisteilchen zu begünstigen und in der Nähe der Mesopause eine effektive Nukleation zu unterstützen. Im gesamten PMC-Höhenbereich würde die Temperatur im Mittel nicht unterhalb der Frostpunkttemperatur liegen und nur durch sporadische Ereignisse bzw. Variabilität innerhalb des Tages diese unterschreiten (siehe Abb. 6.11a). Abbildung 6.12 zeigt die mittleren vertikalen Wasserdampfprofile für Juli 2008 sowie die Häufigkeitsverteilungen in Höhe des maximalen Eisgehalts von SOFIE und MIMAS. Die modellierten Wasserdampfmischungsverhältnisse sind gegenüber SOFIE bei 82 km in guter Übereinstimmung. Hervorgerufen durch eine erhöhte Sublimation der Eisteilchen ergibt sich in dieser Höhe eine Anreicherung von  $H_2O$ , die auch von anderen Satelliten bereits gemessen wurde (z.B. McHugh et al., 2005), während zwischen 84 und 90 km der Wasserdampf stark dezimiert ist. In diesem Höhenbereich ist das H<sub>2</sub>O vermehrt in den



Figure 6.11: Höhenprofile der Medianwerte der Temperatur (a) und Häufigkeitsverteilungen in Höhe der maximalen Eismassendichte  $(z_{max})$  mit einer Intervallbreite von  $\Delta x = 2 \text{ K}$  (b), modelliert mit MIMAS LIH5 im Vergleich zu SOFIE für Juli 2008. MIMAS: Modelldaten unter Berücksichtigung der von SOFIE gemessenen Lokalzeit; MIMAS alle LT: Modelldaten mit allen Lokalzeiten; MIMAS Frostp.: Modellierte Frostpunkttemperatur, berechnet nach *Thomas* (1996b). Der schattierte Bereich gibt das 25. und 75. Perzentil des Medianwertes an.

PMCs gebunden. Hier zeigen sich in MIMAS bis zu 2 ppmv geringere Mischungsverhältnisse als in SOFIE. Dies deutet darauf hin, dass die Werte des initialisierten Wasserdampffeldes zu gering sind, der Wasserdampf vermutlich nicht exakt in MIMAS wiedergegeben wird und/oder eine stärkere Wasserdampfablagerung auf den Eiskernen im Modell vorhanden ist. Angesichts der geringen Anzahl verschiedener  $H_2O$ -Messungen über 80 km sind die Wasserdampfmodellierungen konsistent mit den SOFIE-Messungen. Durch den Vergleich mit Satellitendaten (Abb. 4.9) wurde ersichtlich, dass die Temperaturvariabilität im Modell unterrepräsentiert ist. Dies wird durch die größere Streubreite (Spannweite zwischen Minimum und Maximum) der SOFIE-Daten von 120 bis 167 K im Histogramm (Abb. 6.11b) bestätigt. Eine größere Variabilität in den Temperaturen wäre mit einer Sublimation über einen ausgedehnteren Höhenbereich verbunden. Dies würde in Höhe der maximalen Eismassendichte das Maximum der modellierten Verteilung (Abb. 6.12b) reduzieren und eine größere Streubreite ergeben.

In Abbildung 6.13 sind Medianwerte von PMC-Parametern für den Kern der Saison (Juli) 2008 dargestellt. Es sind Eismassendichte, der effektive und Medianradius sowie die Eisanzahldichte in einem Höhenbereich von 79 bis 92 km gezeigt. Der effektive Radius beschreibt den flächengewichteten mittleren Radius der Partikelgrößenverteilung:

$$r_{\rm eff} = \frac{\int_0^\infty \pi \cdot r^3 \cdot n(r)dr}{\int_0^\infty \pi \cdot r^2 \cdot n(r)dr}$$
(6.1)

mit der Partikelgrößenverteilung n(r) und dem Partikelradius r. Der effektive Radius gibt eine Darstellung der Partikelgröße wieder, die unabhängig von der angenommenen Form



Figure 6.12: Wie Abb. 6.11 für Wasserdampfmischungsverhältnisse und Häufigkeitsverteilungen des Wasserdampfs mit einer Intervallbreite von 0,5 ppmv.

der Größenverteilung ist (*Hervig et al.*, 2009a). Es ist zu beachten, dass Effekte durch das Instrumentensichtfeld von SOFIE (engl.: field of view, FOV) zu einer Überschätzung der Wolkenobergrenze und zu einer Unterschätzung der Wolkenuntergrenze von jeweils einem Kilometer führen können (*Hervig et al.*, 2009a). Diese möglichen systematischen Fehler wurden in MIMAS durch eine vertikale Glättung, die durch das FOV vorgegeben wird, berücksichtigt (siehe Anhang D).

Die aus MIMAS-Simulationen berechneten Eisparameter, wie die Eismassendichte, der effektive und Medianradius sowie die Eisanzahldichte, weisen statistisch ähnliche Eigenschaften im Vergleich zu den SOFIE-Daten auf, wie ähnliche Streubreiten und Medianwerte der Häufigkeitsverteilungen (siehe Anhang D). Somit sind die Medianwerte der modellierten PMC-Parameter mit den Medianwerten von SOFIE vergleichbar. Eine sehr gute Übereinstimmung der Modellierung und der Messungen ergibt sich für die Höhe der maximalen Eismassendichte, die jeweils bei 82,7 km (MIMAS) und 82,8 km (SOFIE) liegt.

Der Medianradius und der effektive Radius der Simulationen erreicht bei etwa 82,5 km einen Maximalwert von 30 nm. Im Vergleich zu den aus SOFIE-Beobachtungen gewonnenen Partikelgrößen stimmt der Medianradius unter Berücksichtigung der von SOFIE gemessenen Lokalzeit in dieser Höhe bemerkenswert gut überein. Die Modellierungen ergeben einen maximalen effektiven Radius, der in etwa 4 nm geringer ist als der maximale Medianradius. Oberhalb von 86 km und unterhalb von 81 km beobachtet SOFIE im Vergleich zu dem Modell relativ große Radien. Auch Lidarmessungen zeigen in diesen Höhen größere Eispartikel gegenüber dem Modell (*Baumgarten und Fiedler*, 2008). Dabei ist zu beachten, dass Eispartikel ab einem Durchmesser größer als 10 nm erst für Lidars sichtbar werden (*Gerding et al.*, 2018). SOFIE ist auch gegenüber Partikel kleiner als 10 nm sensitiv, hat aber aufgrund der Beobachtungsgeometrie Schwierigkeiten die Partikelgröße für optisch dünne Wolken zu bestimmen (*Hervig et al.*, 2009a). Dies führt im Allgemeinen zu größeren Medianwerten in den Beobachtungen. Die Differenzen zwischen den Beobachtungen

und MIMAS weisen darauf hin, dass im Modell einige physikalische Prozesse wie die Schwerewellenaktivität unterrepräsentiert sind, die wichtig für die Erzeugung von größeren Eispartikelradien sind. SOFIE identifiziert auch einige PMCs unterhalb von 78 km Höhe (*Hervig et al.*, 2009a), die nicht durch Lidarmessungen bestätigt werden (*Fiedler et al.*, 2009). Zudem sind sie nicht mit den modellierten und beobachteten Temperaturen in diesem Höhenbereich vereinbar, welche oberhalb der Frostpunkttemperatur liegen (siehe Abb. 6.11).

Eine gute Übereinstimmung mit SOFIE ergibt sich auch für die Eisanzahldichte in einem Höhenbereich von 82 bis 85 km. Oberhalb von 85 km ergibt sich im Modell gegenüber SOFIE eine bis zu 300 cm<sup>-3</sup> größere Eisanzahldichte. Die Eismassendichte und der Radius sind relativ robuste Parameter von SOFIE mit Unsicherheiten von jeweils ~10% und ~20% (*Hervig et al.*, 2009a). Während für die Eisanzahldichte durch die Approximation einer Größenverteilungsform (*Hervig et al.*, 2009b) eine Unsicherheit von bis zu 50% abgeschätzt wird (*Bardeen et al.*, 2010). Somit ergibt sich in SOFIE für ein vorgegebenes Höhenprofil der Eismassendichte und relativ große Eispartikel in den oberen Höhen, eine Verschiebung der Anzahldichte zu kleineren Werten. Dies wird durch die starke Abhängigkeit der Eismasse vom Radius (r<sup>3</sup>) vorgegeben. Für alle dargestellten Eisparameter unterscheiden sich die Höhenprofile unter Einbezug aller LT gegenüber Profilen unter Berücksichtigung der gemessenen LT nur wenig voneinander.

Die Abbildung 6.14 zeigt den Verlauf des Eisgehalts (IWC) in Abhängigkeit vom Tag des Jahres (2008) für SOFIE und MIMAS LIH5. Für die Berechnung des modellierten IWC wurde die Eismassendichte (IWD) mit Werten größer  $0,06 \text{ g km}^{-3}$  über die Höhe integriert. Anschließend wurde ein Grenzwert von  $0.5 \text{ g km}^{-2}$  für den IWC berücksichtigt. Die Simulationen sind für  $23 \text{ LT} \pm 1 \text{ h}$  und für alle LT dargestellt. Es ergibt sich eine sehr gute Übereinstimmung der Modellierungen mit den Satellitendaten im Kern der PMC-Saison (Abb. 6.14). Die tägliche Variabilität wird durch die Berücksichtigung der von SOFIE gemessenen LT besser vom Modell wiedergegeben und beträgt mehr als 53%. Durch die Mittlung aller Lokalzeiten zeigt sich eine Variation von nur 17%. Am Anfang und am Ende der Saison wird der IWC vom Modell unterschätzt. Dies kann auf eine zu geringe Variabilität in LIMA, die durch Schwerewellen generiert wird, zurückzuführen sein.

Zusätzlich wurde auch die Auftrittswahrscheinlichkeit des saisonalen IWCs untersucht. Es wurden die gleichen Grenzwerte wie in Abbildung 6.14 angewendet. Die saisonalen Medianwerte wurden für einer Intervallbreite von  $10 \,\mathrm{g \, km^{-2}}$  sortiert und anschließend normiert, so dass die Summe aller Häufigkeitsklassen *Eins* ergibt. In Abbildung 6.15a ist die Auftrittswahrscheinlichkeit mit einer exponentiellen Anpassung (Fit) auf einfacher Skala gezeigt. Auf den ersten Blick scheint es, dass die Fitfunktion die Daten gut beschreiben kann. Die Anpassungsgüte wird mit einem Kolmogorov-Smirnov-Test überprüft. Damit lassen sich signifikante Unterschiede zwischen Daten und angepasster Verteilung testen. Ein p-Wert < 0,05 weist darauf hin, dass die angepasste Verteilung sich statistisch von der



Figure 6.13: Höhenprofile der Medianwerte von Eismassendichte, Medianradius, effektivem Radius und Eisanzahldichte, modelliert mit MIMAS LIH5 im Vergleich mit Satellitendaten (SOFIE). Es gehen nur Höhenprofile mit einer Eismassendichte von  $> 0.06 \,\mathrm{g \, km^{-3}}$  in die Berechnung für Juli 2008 ein.  $z_{\rm max}$ : Höhe der maximalen Eismassendichte.

betrachteten Datenverteilung unterscheidet. Der Kolmogorov-Smirnov-Test gibt für die Beobachtungen einen p-Wert von 0,27 wieder und bestätigt damit, dass der Fit die Daten im hohen Maße beschreibt. Der Test auf die Anpassungsgüte für die Modelldaten ergibt hingegen einen p-Wert unter 0,05, d.h. die Modelldaten werden durch den Fit nicht gut beschrieben. Um die Abweichungen der Daten von dem Fit genauer zu untersuchen, sind in Abbildung 6.15b die Häufigkeiten auf einer semilogarithmischen Skala dargestellt. Auf dieser Skala ergibt der exponentielle Fit eine Gerade und systematische Abweichungen sind besser erkennbar. Zusätzlich ist die Standardabweichung der Modelldaten (alle LT) gezeigt, die sich aus der Wurzel der Häufigkeiten berechnen lassen. Die SOFIE-Datenpunkte streuen symmetrisch um die Gerade. Bei den Modelldaten ist zu erkennen, dass die Häufigkeitswerte ebenfalls sehr symmetrisch um den Fit streuen. Nur für große IWC-Werten (IWC >150 g km<sup>-2</sup>) liegen diese darunter. Daraus lässt sich schlussfolgern, dass ein exponentieller Fit die Verteilung des saisonalen IWC der SOFIE-Beobachtungen als auch der Modellierungen gut beschreibt. Die Analyse gibt aber auch einen Hinweis darauf, dass die seltenen Ereignisse mit großen IWC-Werten im Modell unterrepräsentiert sind.



Figure 6.14: Saisonale Variabilität des Eisgehalts (IWC), modelliert mit MIMAS LIH5 im Vergleich zu SOFIE mit einem Grenzwert von  $IWC_{th} = 0.5 \,\mathrm{g\,km^{-2}}$  für 2008. Die modellierten Daten beziehen sich auf die Orbitposition von SOFIE. Gepunktete Linie: Simulation, die alle Lokalzeiten umfasst. Durchgezogene rote Linie: Simulation, welche die gemessene Lokalzeit von SOFIE berücksichtigt.



Figure 6.15: Saisonale IWC Verteilungsfunktion zu Abbildung 6.14. Links: Einfache Skala mit exponetnitellen Fit (gestrichelte Linie) für Beobachtungsdaten und MIMAS mit der LT von SOFIE (rot gestrichelt). Rechts: Semilogarithmische Skala und Angabe der Standardabweichung der Modelldaten mit allen LT.

Zusammenfassend sind die größten Unterschiede gegenüber SOFIE in den oberen und niedrigeren Höhenlagen der PMCs bzw. am Anfang und am Ende der Saison zu finden. Hier könnte der Einfluss von Wellen im Modell unterrepräsentiert sein. Diese wirken sich auf die Nukleationsrate, die Lebensdauer und das Eiswachstum aus.

### 6.2.3 IWC-Variabilität im Vergleich mit CIPS und SOFIE

Der Vergleich von PMC-Parametern mit Daten der AIM-Satelliteninstrumente hat gezeigt, dass sich eine bessere Übereinstimmung unter Berücksichtigung der vom Instrument

89

gemessenen LT ergibt. In diesem Abschnitt wird die PMC-Variation in Abhängigkeit von der LT in Kombination mit den beobachteten IWC-Werten präsentiert. Der Eisgehalt (IWC) ist ein Parameter der von beiden AIM-Satelliteninstrumenten bereitgestellt wird. Zudem haben Stevens et al. (2005) nahe gelegt, dass die integrierte Eismasse den Vorteil hat, dass sie weniger von den instrumentalen Anordnungen abhängig ist und daher bei PMC-Vergleichen ein robusterer Parameter als die Helligkeit ist. Im Vergleich zu PMC-Helligkeitswerten verschiedener Instrumente wird der IWC nicht durch Einschränkungen in den Beobachtungen beeinflusst, z.B. durch die Beobachtungsgeometrie, Lichtverhältnisse, zeitliche Uberlappung und Wellenlänge. Im Folgenden wird der Zeitraum 2007-2013analysiert, um den gleichen Zeitraum der AIM-Satelliteninstrumente abzudecken. Der IWC wird über alle Längengrade im Breitenband 67°-71°N berechnet. Im vorherigen Abschnitt wurde gezeigt, dass die Häufigkeitsverteilung des IWC keine symmetrische Form aufweist (Abb. 6.15). Daher wird der Median berechnet, um den mittleren Eisgehalt als Funktion der LT im Juli zu charakterisieren. Zur Auflösung von Gezeitenstrukturen wird Methode 1 (siehe Kapitel 5) angewandt. Dieses Verfahren ergibt insgesamt 4 Breitengrade mal 120 Längengrade mal 31 Tage mal 24 h Werte für Juli-Bedingungen. Schließlich werden alle IWC-Medianwerte berechnet, die einer bestimmten LT entsprechen. Die lokale Zeitauflösung beträgt dabei 1 h pro Tag.

In Abbildung 6.16 werden IWC-Modellergebnisse in Bezug auf Medianwerte mit Messungen der CIPS- und SOFIE-Instrumente an Bord des AIM-Satelliten für das Breitenband  $67^{\circ}$ –71°N verglichen. Der AIM-Satellit befindet sich auf einer sonnensynchronen Umlaufbahn, daher stehen nur begrenzte Ortszeiten zur Verfügung (*Russell et al.*, 2009). Für den Vergleich werden die unterschiedlichen Sensitivitäten der beiden AIM-Instrumente (SOFIE, CIPS) in den Modellberechnungen berücksichtigt. Die Detektionsschwelle für SOFIE ist mit 0.5 g km<sup>-2</sup> angegeben (*Hervig et al.*, 2009a). Im Gegensatz zu SOFIE ist das CIPS-Instrument weniger empfindlich, so dass nur IWC-Ereignisse größer als 10 g km<sup>-2</sup> nachweisbar sind (*Lumpe et al.*, 2013). Daher sind alle IWC-Datensätze (MIMAS, SOFIE, CIPS) auf diesen Grenzwert limitiert. Es besteht eine gute Übereinstimmung zwischen den Modellergebnissen und den Messungen von SOFIE und CIPS, deren Datenpunkte im Bereich der Fehlerbalken liegen. Im Allgemeinen weist das modellierte IWC Maximalwerte zwischen 01:00 und 04:00 LT und Minimalwerte zwischen 16:00 und 20:00 LT auf. Im Durchschnitt variiert der IWC während eines Tages um den Faktor 2.

Interessanterweise stimmt die CIPS-Beobachtung um 23:00 LT nicht mit dem SOFIE-Punkt um Mitternacht überein. Es gibt eine Abweichung zwischen diesen Werten (SOFIE:  $60 \,\mathrm{g \, km^{-2}}$ , CIPS:  $30 \,\mathrm{g \, km^{-2}}$ ), die auf einige Unsicherheiten im CIPS-Grenzwert zurückzuführen sein könnten. Dennoch liegen die CIPS und die SOFIE-Datenpunkte innerhalb der Fehlerbalken. Der MIMAS-Wert von  $40 \,\mathrm{g \, km^{-2}}$  liegt genau zwischen den beiden verschiedenen Satellitenbeobachtungen und stimmt mit allen drei Datenpunkten unter Berücksichtigung der Fehlerbalken überein. Es kann zusammengefasst werden, dass die Ergebnisse von MIMAS hinsichtlich des PMC-Eisgehalts in hohem Maße mit den Satellitenbeobachtungen kompatibel sind.



Figure 6.16: Stündliche Medianwerte des Eisgehalts (IWC) in Abhängigkeit von der Lokalzeit, modelliert mit MIMAS REF für einen IWC-Grenzwert von  $10 \,\mathrm{g\,km^{-2}}$  und  $67^\circ - 71^\circ \mathrm{N}$  für Juli 2007 – 2013. Die vertikalen Balken repräsentieren das untere und obere Quartil der Daten. Die schwarze Kurve ist eine harmonische Anpassung an die Daten mit Perioden von 24, 12 und 8 h. Außerdem sind Daten von den AIM-Satelliteninstrumenten mit dem 25. und 75. Perzentil für den gleichen Zeitraum dargestellt: SOFIE (rot) und CIPS (grün) für die auf- und absteigende Satellitenumlaufbahn. Diese Abbildung ist aus Schmidt et al. (2018) reproduziert.

## 6.3 Zusammenfassung

In den vorangegangenen Abschnitten wurden die Modellergebnisse mit Beobachtungen bodengebundener Lidarinstrumente und Satellitenmessungen verglichen. Es zeigt sich, dass das Modell realistische Ergebnisse hinsichtlich der LT-Variationen von Eisparametern liefert. MIMAS bildet die PMC-Variationen mit der Lokalzeit des Lidars besonders gut im Kern der PMC-Saison ab. PMC-Simulationen für ALOMAR zeigen im Breitenbereich  $67^{\circ} - 71^{\circ}$ N Helligkeitsschwankungen über den Tag bis zu einem Faktor von 7, während die Auftrittswahrscheinlichkeit schwacher bzw. starker Wolken um einen Faktor 2 bis 16 variiert. Die Messungen mittels CIPS und SOFIE zeigen ebenfalls eine gute Übereinstimmung mit den modellierten Daten. Der Vergleich mit SOFIE-Daten ergab, dass das Modell die beobachteten Eigenschaften bei 83 km Höhe gut abbildet. Im Allgemeinen wurde eine gute Übereinstimmung der Modelldaten und der Messungen in der PMC-Hauptsaison und in PMC-Höhe gefunden, wenn man die instrumentelle Empfindlichkeit und die Lokalzeit der Beobachtungen berücksichtigt. Zudem bieten die Ergebnisse eine Fehleranalyse, die in zukünftigen PMC-Studien als nützliche Referenz dienen kann.

# Chapter 7

# Subskalige Variabilitäten der PMC-Parameter

Das vorherige Kapitel dient der Validierung des Eismodells. Im Folgenden sollen die Ursachen für die Unterschiede zwischen Modellsimulationen und Beobachtungen identifiziert werden. Die Abweichungen zwischen Modell und Beobachtungen lassen darauf schließen, dass die Auflösung von atmosphärischen Wellen im Modell zu gering ist. Um die Auswirkungen fehlender atmosphärischer Wellen zu verstehen, werden die MIMAS-Modellausgaben mit einer subskaligen Variabilität in Form von einfachen Störsignalen versehen und analysiert.

### 7.1 Monte Carlo-Simulation

Die Auswertung der zusätzlichen Variabilität bezieht sich im Folgenden auf die Eismassendichte, ein robuster Parameter von SOFIE, der direkt vom Instrument gemessen wird und somit den besten Vergleich zwischen Modell und Beobachtung liefern sollte. Die Untersuchung der Auswirkung atmosphärischer Wellen auf Eisparameter ist nicht trivial. Die Erhöhung der Wellenaktivität in LIMA ist durch die zeitlichen und räumlichen Skalen des Modells begrenzt. Zudem werden die Ausbreitungen und die Wechselwirkungen von Wellen mit Eisparametern durch nichtlineare atmosphärische Prozesse beschrieben, deren Quantifizierung eine große Herausforderung darstellt. Dadurch kann das Einbringen von zufälligen Störungen in den Atmospährenzustand nicht so einfach über die LIMA-Ausgabefelder erfolgen. Durch die Nichtlinearität atmosphärischer Prozesse und das daraus resultierende Anwachsen kleiner Störungen entstehen bei der Quantifizierung von Modellergebnissen Unsicherheiten (z.B. *Rieger*, 2017). Um zufällige Störungen in den Eisparametern einzubringen und damit eine erhöhte Wellenaktivität zu simulieren, wird eine Monte Carlo-Studie durchgeführt. Es wird untersucht, ob es einen systematischen Einfluss von subskaliger Variabilität der Höhe und der Größe der Eispartikel auf die Eismassendichte gibt. Ziel ist es, Ursachen und Auswirkungen von Modellunsicherheiten

gegenüber den Beobachtungen qualitativ abzuschätzen. Dabei soll angemerkt sein, dass nicht die Wechselwirkungen aller Eisparameter berücksichtigt wird. Des Weiteren wird auch nicht der gesamte Lebenszyklus der PMC betrachtet, welcher für eine Quantifizierung des Einflusses entscheidend ist. Im Folgenden werden zwei verschiedene Ansätze und eine Kombination daraus betrachtet:

- Der erste Ansatz beschreibt eine Verschiebung der MIMAS-Ausgabeprofile in vertikaler Richtung, um subskalige Variabilitäten zu simulieren. Diese wirken nur sehr kurz auf die PMC-Parameter und äußern sich hauptsächlich in Störungen durch den vertikalen Wind durch Verschiebung einzelner Höhenschichten nach oben und unten.
- 2. Beim zweiten Ansatz erfolgt eine Verschiebung der Eisparametergröße in jeder einzelnen Höhe des MIMAS-Ausgabeprofils, so dass sich der PMC-Wert verringert oder erhöht. Damit werden Variabilitäten auf kleinen bis mittleren Skalen simuliert, deren Periodendauer so groß ist, dass die Eismikrophysik darauf reagieren kann.

Abbildung 7.1 zeigt Medianwerte der Eismassendichte (IWD) in Abhängigkeit von der Höhe und Maxima der Eismassendichten von jedem Einzelprofil  $(z_{max_i})$ . Der Medianwert wird aus den einzelnen Höhenprofilen berechnet, die 31 Tage im Juli, 120 Längen und die von SOFIE gemessene LT  $\pm 1$  h abdecken. Der Vergleich der gemessenen und modellierten maximalen Eismassendichten der Einzelprofile zeigt, dass diese in den Beobachtungen auf einen größeren Höhenbereich verteilt sind, wohingegen die modellierten Maxima um  $83 \,\mathrm{km}$  gehäuft sind. Die geringere Variabilität von  $z_{\mathrm{max}_i}$  kann durch fehlende Wellen mit hohen räumlichen und zeitlichen Frequenzen im Modell erklärt werden, die große lokale Temperaturschwankungen erzeugen können. Zur Simulation kleinskaliger Variabilität wird Ansatz 1 verwendet. Dabei wurde eine Variation jedes einzelnen modellierten Höhenprofils von  $\pm 1.5 \,\mathrm{km}$  angenommen, welches der mittleren Abweichung der modellierten und beobachteten Werte für  $z_{max_i}$  entspricht. Mittels eines Zufallszahlengenerators wurde für jedes der 11160 Höhenprofile eine zufällige Verschiebung gewählt. Dabei werden Zufallszahlen erzeugt, die auf dem vorgegebenen Intervall von a bis b [-1,5 km; 1,5 km] gleichverteilt sind. Die Standardabweichung des Zufallsprozesses von  $\frac{b-a}{2\sqrt{3}} = 0,87 \,\mathrm{km}$  ist in den Gezeitensignaturen wiederzuerkennen (Kapitel 6.1) und liegt nahe den typischen Angaben für Wolkenhöhenvariabilitäten von einem Kilometer (z.B. Fiedler et al., 2009). Unter Annahme einer Empfindlichkeit von  $0.25 \,\mathrm{km/K}$  (Temperaturgradient für  $81-88 \,\mathrm{km}$ aus Abb. 6.11a) und einer Variabilität von  $\pm 1.5$  km würde sich eine Temperaturänderung von etwa 6 K ergeben. Die Ergebnisse dieser zusätzlichen kleinskaligen Variationen sind in Abbildung 7.2 dargestellt. Im Höhenbereich von 85 bis 87 km ergeben sich geringfügige Anderungen, wohingegen das mittlere Maximum reduziert wird und eine sehr gute Übereinstimmung zu SOFIE liefert. Größere Auswirkungen sind auch im Höhenbereich der Sublimation zwischen 80 und 81 km zu sehen, in der sich der IWD erhöht. Insgesamt ist die simulierte kleinskalige Variabilität allerdings nicht ausreichend, um eine ähnlich

breite Verteilung mit der Höhe, wie sie in SOFIE zu sehen ist, zu erlangen. Ein größerer Streubereich von mehr als  $\pm 1,5$  km würde zwar zu größeren IWD-Werten im Bereich der Nukleation und am unteren Rand des PMC-Vorkommens führen, sorgt aber auch gleichzeitig für eine deutliche Reduzierung des IWD-Maximums bei 83 km.



Figure 7.1: Eismassendichte mit einem Grenzwert von  $IWD_{th} = 0.06 \text{ g km}^{-3}$  für Juli 2008. Links: MIMAS LIH5 Modelldaten für  $23 \pm 1 \text{ h}$  LT. Rechts: SOFIE Beobachtungen. Die durchgezogene Linie stellt jeweils den Medianwert aller Höhenprofile dar. Punkte zeigen die maximale Eismassendichte jedes einzelnen Höhenprofils. Die Höhe (Medianwert) der maximalen Eismassendichten aller Einzelprofile ist mit  $z_{max}$  gekennzeichnet.



Figure 7.2: Monte Carlo-Studie, Ansatz 1: Eismassendichte mit einem Grenzwert von  $IWD_{th} = 0.06 \,\mathrm{g\,km^{-3}}$  für Juli 2008. Schwarz: Medianwert der Höhenprofile der SOFIE Beobachtungen. Grau: Bereich zwischen dem 25. und 75. Perzentil der SOFIE-Werte. Rot: Medianwert der MIMAS LIH5 Modelldaten, Blau: Medianwert der MIMAS Modelldaten mit Variation der einzelnen Höhenprofile um  $\pm 1.5 \,\mathrm{km}$ . Blaue Punkte: maximale IWD der variierten Einzelprofile;  $z_{max}$ : Höhe (Medianwert) der maximalen Eismassendichten der Einzelprofile.

Eine weitere Methode die fehlenden Variationen in den modellierten PMC-Parametern zu integrieren, ist das Hinzufügen von Störungen, die zur einer Erhöhung oder Verringerung des PMC-Wertes führt. Dies wird mit dem Ansatz 2 für die Eismassendichte realisiert. Die Eismasse im Modell wird durch die Anzahl der Eisteilchen und dem Radius ermittelt. Da der Radius gegenüber SOFIE größere Abweichungen aufweist als die Eisanzahldichte, wird das Störsignal auf die einzelnen Höhenprofile des Medianradius angewandt. Die Stärke dieser Störgröße entspricht der Varianz einer Gaußverteilung, die systematisch variiert wird. Das bedeutet, die Erhöhung oder Verringerung der Werte erfolgt wieder mittels eines Zufallszahlengenerators. Dieser erzeugt hier gaussverteilte Zufallszahlen mit einer vorgegebenen Standardabweichung ( $\sigma_r$ ). Um die Sensitivität der Radien gegenüber Variationen der Standardabweichung für die Gaußverteilung zu testen, wurden verschiedene Werte angenommen. Das resultierende Signal wird dann den ursprünglichen Radien überlagert. Dies wurde für die Abbildung 7.3 umgesetzt. Man sieht mittlere modellierte und beobachtete Höhenprofile des Medianradius und des IWD. Die Ergebnisse sind hier beispielhaft für drei verschiedene Standardabweichungen ( $\sigma_r = 10, 15, 20 \,\mathrm{nm}$ ) gezeigt. Das simulierte Störsignal wird auch als additives gaußsches Rauschen bezeichnet. Für  $\sigma_{\rm r} =$ 20 nm ergibt sich ein Höhenprofil, welches in bester Näherung zu SOFIE liegt (Abb. 7.3a). Anschließend wurde eine neue Eismasse aus der Eisanzahldichte und dem gaußverrauschtem Signal der Radien berechnet (Abb. 7.3b). Dadurch erhält man eine Verbreiterung des mittleren Höhenprofils. Für  $\sigma_{\rm r} = 20 \,\rm nm$  wird die Eismasse speziell in den oberen und unteren Höhenlagen des PMC-Vorkommens gegenüber SOFIE zu groß und auch das Maximum wird noch größer als im ursprünglich modellierten mittleren Ausgangsprofil. Ein gaußsches Rauschen mit  $\sigma_{\rm r}=15\,{\rm nm}$  für die einzelnen Radienprofile scheint die bestmögliche Übereinstimmung der Eismassendichten mit der Höhe im Vergleich zu SOFIE zu liefern. Wellen, die zu einer Wachstumsänderung von 15 nm führen können, sind Schwerewellen mit einer Periode von etwa 1 h (*Kiliani et al.*, 2013) und einer Wellenlänge um 1000 km. Dennoch ist auch diese additive Methode zur Implementierung kleinskaliger Wellen bis hin zu Wellen auf mittleren Skalen nicht ausreichend, um eine optimale Übereinstimmung mit den Satellitendaten zu bekommen. Dies wird aber durch die Kombination beider vorangegangener Methoden erreicht.

Abbildung 7.4 zeigt das Ergebnis der Simulation von kleinskaligen Wellen und Wellen auf mittleren Skalen. Es ist das Ergebnis einer vertikalen Verschiebung der IWD-Höhenprofile von  $\pm 1,5$  km (Ansatz 1) und einem additiven gaußverteilten Rauschen für die Radien mit einer Standardabweichung von 15 nm (Ansatz 2). Die geringe Anzahl an Eisteilchen außerhalb des Bereichs der mittleren Sättigung zwischen 80–82 km und 90–91 km führt bei der Anwendung des additiven gaußschen Rauschens im Modell zu größeren Unsicherheiten (unrealistisch hohe Werte der Eismassendichte). Aus diesem Grund ist die Eismassendichte nur bis etwa 90 km Höhe gezeigt. Das neue mittlere Höhenprofil der Eismassendichte ist in sehr guter Übereinstimmung zum beobachteten Profil. Auch der



Figure 7.3: Monte Carlo-Studie, Ansatz 2: Mittlere Höhenprofile der modellierten (LIH5) und beobachteten Daten (SOFIE) und modellierte Profile mit zusätzlicher Variation für die Höhenprofile der Radien mit Angabe der Standardabweichung ( $\sigma_r$ ) in nm für Juli 2008 und 23 LT ±1 h. Links: Radien; Rechts: Eismassendichte (IWD).

aus den Einzelprofilen ermittelte neue Median der IWD<sub>max</sub> Werte (Median:  $14,3 \,\mathrm{g}\,\mathrm{cm}^{-3}$ ) bestätigt eine bessere Übereinstimmung mit SOFIE (Median:  $12,6 \,\mathrm{g}\,\mathrm{cm}^{-3}$ ) durch die Implementierung der beschriebenen Störungen im Modell. Der Median von den IWD<sub>max</sub> Werten der ursprünglichen Einzelprofile beträgt  $17,5 \,\mathrm{g}\,\mathrm{cm}^{-3}$ .



Figure 7.4: Höhenprofile der Eismassendichte mit Variationen, die sich aus Kombination der Ansätze 1 und 2 ergeben (siehe Text), modelliert mit MIMAS LIH5 (blau) im Vergleich zum ursprünglichen Höhenprofil (rot) und zu SOFIE (schwarz) für Juli 2008. Der graue und blaue Bereich markiert das 25. und 75. Perzentil des mittleren beobachteten Höhenprofils von SOFIE und der Modellierung mit zusätzlicher Variation.

Die Ergebnisse der Monte Carlo-Simulationen haben gezeigt, dass eine Erhöhung der Variabilität auf kleinen (keine mikrophysikalischen Änderungen, rein vertikale Auslenkung der Eispartikel) und mittleren Skalen (Änderung der Partikelgröße ohne zusätzliche Nukleation) eine gute Übereinstimmung mit den SOFIE-Messungen ergibt. Auch für die Jahre

2007 und 2009 kann das Höhenprofil der Eismassendichte durch diese Methoden an die Beobachtungen angepasst werden (hier nicht gezeigt). Dabei ist die Größe der Störungen der beiden beschriebenen Ansätze sehr ähnlich. Diese Studie konzentriert sich zwar auf den Vergleich mit SOFIE-Daten, aber auch die Abweichungen der Eismassendichte und der Radien zu anderen Messungen, wie beispielsweise des Instruments OSIRIS (engl.: Optical, Spectroscopic, and Infrared Remote Imaging System) auf dem Satelliten Odin, liegen in der gleichen Größenordnung (Megner et al., 2016). Die Region der Mesosphäre, in der sich PMCs bilden und anwachsen, ist weit von einem stationären Zustand und von durchschnittlichen Bedingungen entfernt. Sie ist durch starke Wellenaktivitäten geprägt, die zu großen Fluktuationen in den Temperatur- und Windfeldern führen. Realistische Temperatur- und Windschwankungen sind für quantitative Analysen der PMC-Parameter unerlässlich. Offensichtlich können in der variablen Atmosphäre Eisteilchen auch dann noch existieren, wenn die Durchschnittstemperatur über dem Frostpunkt liegt, was die breitere Höhenausdehnung der Eismassendichte in den Beobachtungen erklärt. Mittels der hier angewendeten einfachen Methoden kann die Größenordnung der fehlenden Temperaturvariabilitäten abgeschätzt werden und ein wichtiger Beitrag hinsichtlich der Modellentwicklung geleistet werden. Für zukünftige Modellstudien sollten nicht nur die Mittelwerte der atmosphärischen Felder, die zum Antrieb des Eismodells verwendet wurden mit Beobachtungen übereinstimmen, sondern auch die Variationen dieser Felder mit Messungen kompatibel sein. Dies erfordert sehr genaue Kenntnisse über die reale Hintergrundatmosphäre, die derzeitig durch Messfehler in den Temperaturen und im Wasserdampf sowie marginalen Messungen des vertikalen Windes in der oberen Mesosphäre im Detail nicht bekannt ist.

### 7.2 Zusammenfassung

Die größte Diskrepanz zwischen dem Modell und den SOFIE-Beobachtungen ist die Unzulänglichkeit des Modells, Eismassendichten im oberen und unteren Bereich des PMC-Vorkommens zu erzeugen, die so hoch sind wie in den Beobachtungen. In diesem Kapitel wurden mögliche Gründe für diese Unterschiede diskutiert. Fehlende Wellen auf kleinen und mittleren Skalen (Wellenlängen bis zu 1000 km) in den Eingangsfeldern von MIMAS werden als Hauptquelle für die Unterschiede zur SOFIE Beobachtung angenommen. Die Studie hat gezeigt, dass Schwerewellen auf einer zeitlichen Skala von etwa einer Stunde im Wesentlichen im Höhenbereich der Nukleation und der Sublimation größere Eismassendichten verursachen. Wellen auf sehr kleinen Skalen führen zu sporadischen PMC-Ereignissen, die im Allgemeinen eine Reduzierung der Eismassendichte in PMC-Höhe bewirken. Diese Variabilität wirkt sich auch auf die Eisbildung am Anfang und am Ende der Saison aus. Diese Erkenntnis ist ein wichtiger Faktor im Verständnis der PMC-Bildung.

# Chapter 8

# Zusammenfassung und Ausblick

### 8.1 Zusammenfassung

Das 3-d Lagrangesche Eistransportmodell (MIMAS) ermöglicht eine globale Sicht auf die physikalischen Prozesse der mesosphärischen Eisbildung. Durch die Validierung mit Lidarbeobachtungen und Satellitenmessungen konnte die Realitätstreue des Modells vor allem in der Hauptsaison polarer mesosphärischer Eiswolken (PMC) bestätigt werden. Dies ist von großer Bedeutung, da das Eismodell verwendet werden kann, um wissenschaftliche Fragestellungen zu beantworten, die außerhalb des Messbereichs von Instrumenten liegen, wie zum Beispiel das Verhalten von PMCs in Abhängigkeit von der Lokalzeit.

Staubpartikel, Wasserdampf und Eispartikel sind die wesentlichen Bestandteile in der Eisbildung im Modell MIMAS. Sie stehen in Wechselwirkung mit den initialisierten atmosphärischen Hintergrundbedingungen wie Luftdruck und -dichte sowie Temperatur und Winde. Die Entwicklung des Modells durch Einbindung von verschiedenen Reanalysedaten ermöglichte einen Vergleich von unterschiedlichen vorgegebenen Hintergrundbedingungen für die Eisbildung, die durch verschiedene Aspekte der Dynamik der mittleren Atmosphäre beschrieben werden. MIMAS wurde zudem für den Vergleich mit Satellitendaten um die Berechnung des IWC und der Albedo bei vorgegebener Wellenlänge und um die Berechnung des Medianradius erweitert. Mit diesen Modellentwicklungen und dem Vergleich mit Beobachtungsdaten konnten folgende Forschungsfragen beantwortet werden:

#### F1: Welchen Effekt hat eine modifizierte Hintergrundatmosphäre auf PMCs?

In dieser Arbeit wurden die Wechselwirkungen zwischen Eisteilchen und atmosphärischen Hintergrundbedingungen untersucht. Dafür wurden zwei Modellkonfigurationen verwendet, die durch unterschiedliche Temperatur- und Windfelder gekennzeichnet sind. Die Basis hierfür bilden unterschiedliche räumliche Auflösungen in den Reanalysedaten und eine zusätzliche Schwerewellenparametrisierung gegenüber dem Referenzdatensatz, die zu Variationen in den Temperatur- und Windfeldern führen. Die unterschiedlichen atmosphärischen Hintergrundfelder wirken sich auf die Eisparameter aus. Die Sensibilität der PMC äußert sich dabei in einer Erhöhung des Eisgehalts um mehr als 50 % bei Temperaturdifferenzen der Modellläufe von  $\sim 5 \,\mathrm{K}$  im Bereich der PMC-Haupthöhe. Es hat sich gezeigt, dass PMCs sehr empfindliche Indikatoren für Veränderungen in den mesosphärischen Hintergrundfeldern sind. Variationen in den Temperatur- und Windfeldern führen zu sporadisch auftretenden Ereignissen von Nukleation und Sublimation der PMCs. Diese durch Wellen angeregten Störungen erzeugen eine Variation der Sättigung innerhalb eines Tages. Dadurch konnte die Existenz von Eisschichten auch außerhalb des Bereiches der mittleren Übersättigung in einer Höhe zwischen 80 und 82 km erklärt werden. Das Gezeitenverhalten in den PMC-Strukturen weist für beide Modellkonfigurationen gleiche Charakteristiken auf.

#### F2: Welche Bedeutung haben Gezeiten in PMCs?

In der Arbeit wurde das PMC-Verhalten in Abhängigkeit von der Lokalzeit (LT) analysiert und quantifiziert. Die Phasenlage der ganztägigen und halbtägigen Gezeiten der Temperatur und des Wasserdampfs trägt zum Gezeitenverhalten von PMC-Parametern bei. Eine tertiäre Komponente ist ebenfalls vorzufinden, aber von unter geordneter Bedeutung. Der Vergleich der modellierten PMC-Parameter mit Beobachtungen ergab eine bessere Ubereinstimmung unter Berücksichtigung der vom Instrument abgedeckten Lokalzeit. In diesem Fall wurde die gute Replizierbarkeit von täglichen Variabilitäten des IWC in der PMC-Hauptsaison von MIMAS deutlich. Das Eismodell öffnet den Blick auf globale Perspektiven. Damit erschließt sich ein Bereich zeitlicher und räumlicher Variationen, der mittels Messungen nicht abgedeckt werden kann. Es zeigte sich, dass LT-Variationen in PMCs grenzwert- und breitenabhängig sind. Zum einen nehmen absolute LT-Schwankungen des IWC zum Pol hin zu und zum anderen existiert eine Zunahme der relativen LT-Variationen mit größerem Grenzwert. Zudem ist eine Phasenverschiebung zum Pol hin, die unabhängig vom Grenzwert ist, vorhanden. Diese Erkenntnisse spielen vor allem beim Vergleich mit Langzeitbeobachtungen verschiedener Instrumente, die nur einen Teil des Tages abdecken, eine große Rolle. Mit MIMAS wurde eine 35-jährige Klimatologie der IWC-Abhängigkeit von der Lokalzeit für verschiedene Grenzwerte und Breitengrade ermittelt. Diese kann für LT-Korrekturen von Messungen genutzt werden, bei denen die instrumentelle Empfindlichkeit und gemessene Lokalzeit berücksichtigt werden muss.

#### F3: Welche Auswirkungen haben subskalige Variabilitäten in PMCs?

Beobachtungen ergeben, dass die Nukleation und auch die Sublimation von Eisteilchen durch kleinskalige Temperaturfluktuationen bis hin zu Fluktuationen auf mittleren Skalen maßgeblich beeinflusst wird. Diese kleinskaligen Fluktuationen sind im Zirkulationsmodell LIMA unterrepräsentiert und resultieren im Vergleich zu Beobachtungen in kleineren Eismassen am Anfang und Ende der Saison sowie am oberen und unteren Rand der Eiswolken. In der Arbeit wurde die fehlenden beobachteten Variabilitäten in PMCs durch zweier Analysemethoden abgeschätzt und daraus geophysikalische Aussagen abgeleitet. Die Untersuchungen haben gezeigt, dass kleinskalige Schwerewellenaktivitäten die Eiswolken unterschiedlich beeinflussen können. Störungen durch Schwerewellen, deren Periodendauer lang genug ist, um die Mikrophysik der Eisteilchen zu beeinflussen, führen zu höheren Eismassendichten in der Nukleationszone und am unteren Rand des PMC-Vorkommens. Kleinskalige, kurz periodische Schwerewellenaktivitäten wirken sich vor allem im Bereich der PMC-Haupthöhe aus und führen hier zu einer Verringerung der Eismassendichte. Zusätzlich resultieren diese ebenfalls in eine leicht erhöhte Eismassendichte am unteren und oberen Rand des PMC-Vorkommens. Durch die Kombination beider Analysemethoden ist eine realitätsnahe PMC-Simulation möglich. Die Untersuchung von Schwerewellen ist ein sehr aktuelles und wichtiges Forschungsthema, welches maßgeblich zum Verständnis der Energie- und Impulsbilanz in der Atmosphäre beiträgt. Für die Modellierung ist die korrekte Parametrisierung von Schwerewellen wichtig, um die physikalischen Prozesse in den PMCs richtig analysieren zu können.

Die Ergebnisse dieser Arbeit tragen zum Verständnis der natürlichen PMC-Variabilität bei und zeigen, dass eine detaillierte Darstellung der atmosphärischen Hintergrundfelder mit realitätsnahen Temperatur- und Windstörungen essentiell ist.

## 8.2 Ausblick

Zur Untersuchung und zur Bestätigung der PMC-Gezeitenabhängigkeit vom meridionalen Wind in mittleren Breiten ist eine fortlaufende Simulation des LIH5 Datensatzes erforderlich. Derzeitig sind nur Daten bis 2009 verfügbar, die keine Überlappung mit den Daten des tageslichtfähigen RMR Lidars in Kühlungsborn liefern.

Bisher lag der Schwerpunkt auf der Auswertung der Eissimulationen in der nördlichen Hemisphäre, PMCs sind aber auch über der Antarktis sichtbar. Modellsimulationen mit MIMAS auf der Südhalbkugel sollten zukünftig ebenfalls durchgeführt und analysiert werden. Das SOFIE Instrument bietet für den Vergleich beider Hemisphären eine gute Datengrundlage, deren Messbetrieb noch auf unabsehbare Zeit andauern wird.

Es sind auch zukünftig viele Laborarbeiten und Modellierungen sowie Messungen in der mittleren Atmosphäre erforderlich, um die hohen Unsicherheiten im Bereich der PMC-Nukleation und einzelner Parameter wie dem Turbulenzkoeffizienten oder der Menge an Wasserdampf zu verringern.
# Appendix A

### LIMA/MIMAS Modelländerungen

Die folgenden Punkte umfassen eine Diskussion der Unterschiede beider Datensätze (Modelllauf LIH5 und REF), die in Tabelle 3.1 aufgelistet sind. Die vorangegangenen Untersuchungen und deren Einordnung in andere bereits erfolgte Studien helfen dabei darzulegen, welche Parameter bei dem Wechsel der Datensätze vom REF-Lauf zum LIH5-Lauf besonderen Einfluss auf die Eisentwicklung nehmen.

- Die Staubinitialisierung am Anfang der Saison findet im REF-Lauf im Bereich der Mesopausenhöhe statt. Diese entspricht in etwa einer fixen Staubinitialisierung des LIH5-Laufs zwischen 85 und 86 km Höhe und ist somit nur eine kleinere Änderung im Code, die für mehr Konsistenz in den mikrophysikalischen Berechnungen sorgt. Es sind keine Änderungen in den Ergebnissen durch diese Modifikation zu erwarten, da sich 48 Stunden nach der Initialisierung die Staubpartikel durch den diffusiven Prozess nahezu gleichmäßig über die gesamte Modellhöhe verteilt haben (*Berger und von Zahn*, 2002).
- Ab 2009 wurde in beiden Läufen der SBUV-Ozondatensatz in LIMA implementiert, so dass dadurch speziell für diese Jahre keine Unterschiede in den Ergebnissen erfolgen. Hinsichtlich des Wechsels des Ozondatensatzes im REF-Lauf ist auch keine markante Auffälligkeit im Vergleich zu anderen Jahren zu erkennen (siehe Abb. 4.15).
- Rapp und Thomas (2006) haben Sensitivitätsstudien zu verschiedenen Diffusionskoeffizienten (K<sub>zz</sub>, Gl. 3.1) durchgeführt. Der Referenzwert bezieht sich dabei auf Turbulenzmessungen, die bei 69°N unter polaren, sommerlichen Bedingungen mit Raketen gemacht wurden (Lübken, 1997). Dies entspricht dem im MIMAS REF-Lauf verwendeten Diffusionskoeffizienten. Für den LIH5-Lauf ist der Koeffizient zwischen 90 und 85 km Höhe identisch mit dem in REF-Lauf. Unterhalb von 85 km wurde der Wert allerdings konstant auf dem Wert gehalten, der in 85 km angenommen wird. In Rapp und Thomas (2006) sieht man, dass höhere Werte der Diffusion zu sehr ähnlichen Eispartikelradien im Vergleich zum Referenzfall führen. Große Eispartikel sind vor allem zwischen 80 und 84 km Höhe vorzufinden (Abb. 4.12b), d.h. dass die

Änderung zum REF-Lauf nur geringfügig ausfallen sollte. Die Annahme eines konstanten Diffusionskoeffizienten unterhalb von 85 km ist aufgrund von Unsicherheiten gerechtfertigt und wirkt im LIH5-Lauf einem zu starken Wasserdampfeintrag in die obere Mesosphäre entgegen.

- Rapp und Thomas (2006) haben auch eine Sensitivitätstudie zu Änderungen des Ausgangswasserdampfprofils gemacht. Die Studie ergab, dass insgesamt der Unterschied dieser Simulation zum Referenzfall bemerkenswert gering ist. Demzufolge werden auch durch die Reduzierung des Wasserdampfs im LIH5-Lauf keine bedeutenden Auswirkungen erwartet. Die Änderung im LIH5-Lauf soll auch hier ein zu großes Wasserdampfmischungsverhältnis in der Mesosphäre verhindern.
- Im Modelllauf LIH5 werden auch kleinere Staubpartikel von 0,9 nm berücksichtigt, wohingegen im REF-Lauf nur Partikel größer als 1,2 nm betrachtet werden. Die Nukleation setzt sehr selten bei Staubpartikeln kleiner als 1,2 nm ein (z.B. *Kiliani*, 2014; *Megner et al.*, 2006; *Keesee*, 1989), wodurch auch hier keine starken Änderungen in mittleren PMC-Eigenschaften zu erwarten sind.

Die genaue Bestimmung der Unsicherheiten der in dieser Arbeit diskutierten Hintergrundund Eisparameter bedarf einer detaillierten Sensitivitätstudie der beiden Modellkonfigurationen. Es ist dennoch anzunehmen, dass die Behandlung von atmosphärischen Wellen im Zirkulationsmodell LIMA die größten Auswirkungen auf die Eisparameter haben. Diese führen zu großen Abweichungen vom klimatologischen Zustand. Die Temperaturdifferenz der beiden Modellläufe zum Beispiel liegt bei  $\pm 3-4$  K. Die Folgen einer Temperaturänderung in dieser Größenordnung sind für den Eisgehalt der PMCs sehr dramatisch, so dass sich der IWC verdoppelt. Des Weiteren hat sich in verschiedenen Studien gezeigt, dass der Lebenszyklus und die vertikale Bewegung der Eispartikel stark von der Wellenaktitvität gesteuert werden (*Wilms et al.*, 2016; *Kiliani*, 2014). Die mit Schwerewellen verbundenen geringeren Temperaturen durch eine Schwerewellenparametrisierung und stärkeren vertikalen Winde in LIH5 können teilweise durch die Anpassung des Wasserdampfs, des Wirbeldiffusionskoeffizienten und der Staubverteilung im Modell kompensiert werden. Die Änderungen resultieren dennoch in einen stärkeren Eisgehalt gegenüber dem REF-Lauf (siehe Kapitel 4.2.2).

### Appendix B

## PMC-Abhängigkeit von der Lokalzeit in LIH5

Für die Gegenüberstellung der LT-Variationen in PMCs der beiden vorhandenen Modellkonfigurationen REF und LIH5 wurde das Jahr 2009 analysiert (siehe Tabelle B.1 und B.2). Im Allgemeinen werden mit dem LIH5-Datensatz höhere IWC-Werte modelliert. Zudem steigen die relativen LT-Variationen nicht wie im REF-Lauf polwärts an, sondern nehmen sogar ab bzw. sind bei einem Grenzwert von IWC > 40 g km<sup>-2</sup> relativ konstant. Die Tabellen zeigen dennoch, dass die gemachten Hauptaussagen der Punkte (1) - (3) in Kapitel 5 sowohl für das einzelne betrachtete Jahr 2009 (Tabelle B.1), als auch für den Modelllauf LIH5 für das Jahr 2009 (Tabelle B.2) erhalten bleiben.

Breiten- band (°N)	Grenz- wert $(g  \mathrm{km}^{-2})$	$\operatorname{Mittel}_{(g\mathrm{km}^{-2})}^{\mathrm{Mittel}}$	$\max_{(gkm^{-2})}$	$_{\rm (gkm^{-2})}^{\rm Min}$	$\begin{array}{c} {\rm Max-} \\ {\rm Min} \\ ({\rm gkm^{-2}}) \end{array}$	Max/ Min	LT <sub>Max</sub> (hh:mm)	LT <sub>Max</sub> (hh:mm)	$A_{24}$ (g km <sup>-2</sup> )	$A_{12} \ (g  km^{-2})$	p <sub>24</sub> (h)	p <sub>12</sub> (h)
50 - 64	0	2,3	4,4	0,8	3,6	5,5	05:07	17:17	1,5	$^{0,4}$	2,9	1,4
$64 - 74 \\ 74 - 82$	0	23,1 57,7	$^{53,1}_{126,5}$	$^{6,2}_{19,6}$	$   \frac{46,9}{106,8} $	$^{8,6}_{6,4}$	$02:21 \\ 00:40$	17:17 14:05	20,5 48,2	7,2 15,8	$^{2,5}_{4,4}$	$^{3,1}_{1,8}$
50 - 64	10	18,0	$25,\!6$	11,3	14,3	2,3	04:46	18:00	5,7	2,4	3,2	1,2
64 - 74	10	37,4	66,2	19,0	47,2	3.5	02:17	16:34	20,8	6,3	$^{2,4}$	$^{3,1}$
74 - 82	10	62,3	126,9	26,1	100,8	$4,\!9$	00:40	14:05	44,8	14,8	$^{4,1}$	$^{2,1}$
50 - 64	40	50,8	58,3	42,5	15,8	1,4	05:02	09:32	$53,\!4$	20,6	3,2	$^{1,8}$
64 - 74	40	68,4	94,8	45,3	49,5	$^{2,1}$	02:58	16:23	21,5	$4,\!6$	$^{2,5}$	$^{2,7}$
74 - 82	40	89,2	$140,\! 6$	53,4	87,2	$^{2,6}$	01:03	14:29	38,2	10,1	$^{2,7}$	$^{1,7}$

Table B.1: LT-Schwankungen des IWC, modelliert mit MIMAS REF für drei Grenzwerte (IWC > 0 g km<sup>-2</sup>, IWC > 10 g km<sup>-2</sup> und IWC > 40 g km<sup>-2</sup>) und verschiedene Breitenbänder für Juli 2009. Mittelwert: mittlerer IWC über einen Tageszyklus; Max: maximaler IWC über einen Tageszyklus; Max-Min: Differenz zwischen maximalem und minimalem IWC; Max/Min: Verhältnis zwischen maximalem und minimalem IWC; Max/Min: Verhältnis zwischen maximalem IWC; LT<sub>Max</sub>: Lokalzeit (LT) in Stunden des Maximums; LT<sub>Min</sub>.: Lokalzeit (LT) in Stunden des Minimums; A<sub>24</sub>: ganztägige Amplitude eines harmonischen Fits, welcher die 24 und 12 h-Komponente einschließt; A<sub>12</sub>: halbtägige Amplitude; p<sub>24</sub>: Phase der ganztägigen Komponente; p<sub>12</sub>: Phase der halbtägigen Komponente.

Die IWC-Differenzwerte des Maximums und Minimums nehmen mit steigendem Grenzwert polwärts ab. Ebenfalls ergibt sich eine polwärts gerichtete größere Spannweite zwischen Maximum und Minimum. Die vom Grenzwert unabhängige Verschiebung des Maximums der mittleren Breiten von den frühen Morgenstunden (4 LT) zu 0 LT in polaren Breiten unter Annahme eines Grenzwertes von 0 g km<sup>-2</sup>, ist auch im LIH5-Lauf wiederzufinden.

Breiten- band (°N)	Grenz- wert (g km <sup>-2</sup>	$\stackrel{\rm Mittel}{(gkm^{-2})}_{2)}^{\rm Mittel}$	$_{\rm (gkm^{-2})}^{\rm Max}$	$_{\rm (gkm^{-2})}^{\rm Min}$	$\begin{array}{c} {\rm Max-} \\ {\rm Min} \\ ({\rm gkm^{-2}}) \end{array}$	Max/ Min	LT <sub>Max</sub> (hh:mm)	$LT_{Max}$ (hh:mm)	$_{\rm (gkm^{-2})}^{\rm A_{24}}$	$_{(gkm^{-2})}^{A_{12}}$	p <sub>24</sub> (h)	p <sub>12</sub> (h)
50-64 64-74	0	15,4 68.9	41,3 139.2	2,1 20.0	39,2 119.0	19,8	03:56 02:19	17:23 15:09	11,0 39.5	4,1 13.7	2,9 2.3	2,9 1.7
74 - 82	0	96,7	166,2	43,5	122,7	3,8	00:07	12:54	45,9	20,2	4,7	$^{1,1}_{3,7}$
50-64	10	37,9 75 1	74,3	14,1	60,2	5,3 4 8	04:30	15:50	15,5	4,9	2,8	0,6
74 - 82	10	97,3	141,5 166,2	46,0	111,8 120,2	$^{4,0}_{3,6}$	02:03	13.40 12:58	44,8	19,9	$^{2,2}_{4,5}$	$^{3,0}_{3,5}$
50-64	40	67,2	101,5	44,4	57,1	2,3	05:40	14:36	14,7	5,9	3,0	2,1
64 - 74 74 - 82	$\frac{40}{40}$	90,6 103,5	$146,8 \\ 166,4$	51,7 58,9	95,1 107,4	$^{2,8}_{2,8}$	$01:44 \\ 00:05$	$15:15 \\ 12:54$	29,5 38,4	11,7 18,1	$^{2,3}_{4,3}$	$^{2,4}_{4,3}$

Table B.2: LT-Schwankungen des IWC, wie Tabelle B.1, modelliert mit MIMAS LIH5.

### Appendix C

### Satellitenmessungen von PMCs

Seit Ende des 20. Jahrhunderts gibt es eine Reihe von Weltraumexperimenten, welche die Eiswolken in der Mesosphäre beobachten (siehe Abbildung C.1). Die Beobachtung



Figure C.1: Zeitstrahl der Satelliteninstrumente, die polare mesosphärische Wolken beobachten. Pfeile kennzeichnen Messinstrumente, welche noch in Betrieb sind. Der graue Pfeil beschreibt ein geplantes Projekt (MATS).

polarer mesosphärischer Wolken war anfänglich nicht das Hauptziel der Satellitenmissionen. Teilweise wurden die polaren mesosphärischen Wolken erst durch die Anwendung neuer Analysetechniken in den vorhandenen Datensätzen erkannt. Satellitenbeobachtungen von PMCs sind äußerst wertvoll, da sie typischerweise eine große horizontale Abdeckung haben. Limb- und Nadirinstrumente sind dabei in den letzten Jahren zu wichtigen Werkzeugen bei der Beobachtung von PMCs geworden. Die meisten Satelliteninstrumente haben jedoch nicht die Möglichkeit einen vollständigen lokalen Tageszyklus abzudecken. In Kapitel 5 wird die Bedeutung von Variationen in Abhängigkeit von der Lokalzeit in PMCs deutlich gemacht. Diese führt zu der Schlussfolgerung, dass eine lokalzeitliche Anpassung der Messungen für den Vergleich von Datensätzen, die nicht den gleichen Tageszeitraum abdecken, notwendig ist. Die Abdeckung der Lokalzeit ist aber nur ein Parameter, der beim Vergleich mit Satellitendaten beachtet werden sollte. Es gibt noch eine Reihe von anderen instrumentellen und systematischen Unterschieden zwischen den einzelnen Datensätzen. In Tabelle C.1 sind einige instrumentelle Eigenschaften von Satelliteninstrumenten, die PMCs beobachten, aufgelistet. Es ist wichtig, eine Systematik zu entwickeln, welche unabhängigen Parameter eine wesentliche Rolle beim Vergleich von Satelliten- und Modelldaten spielen. Der Vergleich mit Satellitendaten ist nicht trivial und hängt von vielen Faktoren ab. Einige dieser Faktoren sind im Folgenden aufgeführt:

- Beobachtungsgeometrie (Nadir, Limb, Okkultation)
- Beobachtungstechnik Messung von
  - gestreuter Sonneneinstrahlung
  - Abschwächung der direkten Sonneneinstrahlung
  - reflektiertem Licht eines gepulsten Laserstrahls
- Lichtbedingungen
- zeitliche Abdeckung
  - Beginn und Ende der Messungen
  - Abdeckung der Lokalzeit
  - Zeitauflösung
- Geografische Abdeckung
  - Höhe, Breite, Länge
  - gewichtetes Sichtfeld (FOV, engl.: field of view)
  - räumliche Abdeckung (vertikal, horizontal)
- Sensitivität der Instrumente (Detektionsschwelle)
- individuell gemessene Parameter
- direkt gemessene und abgeleitete Werte
- Wellenlängen

• verschiedene Annahmen (Partikelform, Verteilungsbreite der Partikelgröße, Partikelgröße)

Die Beobachtungsgeometrie (Nadir, Limb oder Okkultation) beeinflusst die Messungen von atmosphärischen Parametern. Die verschiedenen Messmethoden sind in Abbildung C.2 dargestellt und werden hier kurz vorgestellt:

#### Nadir

Im Nadir-Modus wird die Luftsäule unterhalb des Satelliten detektiert. Er hat den Vorteil einer geringeren Wahrscheinlichkeit von Wolkeninterferenzen und einer guten horizontalen Ortsauflösung. Die Messungen sind jedoch in der vertikalen Auflösung begrenzt.

#### Limb

Bei Limb-Streulichtmessungen wird das atmosphärische Volumen entlang der Flugrichtung tangential zur Erdoberfläche beobachtet. Hier besteht der Vorteil einer besseren vertikalen Auflösung und einer erhöhten Empfindlichkeit für Spurengase. Allerdings erhält man im Gegensatz zu Nadir-Messungen eine höhere Wahrscheinlichkeit von Wolkeninterferenzen und eine vergleichsweise schlechtere räumliche Auflösung entlang der Sichtlinie.

#### Okkultation

Bei Okkultationsmessungen existieren die gleichen Geometrien wie im Limb-Modus, aber mit der Sonne oder dem Mond im Sichtfeld des Instrumentes. Die atmosphärischen Dichten werden durch den Vergleich von Messungen der transmittierten Sonnen- oder Mondstrahlung mit der ungedämpften Quelle ermittelt.

#### Limb/Nadir

Eine Kombination von Limb und Nadir hat den Vorteil, dass das gleiche atmosphärische Volumen zunächst im Limb-Modus und anschließend mit der Geometrie des Nadir-Modus beobachtet werden kann. Daraus können 3-d Informationen über die Atmosphäre gewonnen werden.



Figure C.2: Geometrie von Limb, Nadir und Okultationsmessungen entnommen aus *Feofilov und Kutepov* (2012).

Satellit	Start	Ende	Orbit	Instrument	BeobMethode	Referenz
OGO-6	June 1969	Dec. 1970	polar	-	Limb Streuung (sichtbar)	Donahue et al. (1972)
Nimbus-7, NOAA-9,- 11,-14,-16,- 17,-18,-19	Nov. 1978	operational	sonnensyn- chron	SBUV, SBUV/2	Nadir Rückstreuung	DeLand et al. (2003); McPeters (2017)
SME	Oct. 1981	Dec. 1986	sonnensyn- chron	UVS	Limb Streuung (UV)	Thomas und Olivero (1989)
METOSAT	1983	operational	geostationary	MVIRI	Limb Streuung (sichtbar)	$Gadsden \ (2000)$
ERBS	Oct. 1984	Nov. 2000	nicht- sonnensyn- chron zirkulär	SAGE II	Okkultation (UV, sichtbar, nahes IR)	Shettle et al., 2002(a)
UARS	Sep. 1991	July 1996	nicht- sonnensyn- chron fast zirkulär	Wind II	Limb Streuung (sichtbar)	Shettle et al., 2002(b)
UARS	Sep. 1991	Nov. 2005	nicht- sonnensyn- chron fast zirkulär	HALOE	Limb	Hervig et al. (2001); Hervig und Siskind (2006)
SPOT	Oct. 1993	Dec. 2005	sonnensyn- chron	POAM	Okkultation (UV, sichtbar, nahes IR)	Shettle et al., $2002(b)$
SPAS	Nov. 1994	Aug. 1997	(Shuttle)	MAHRSI	Limb Streuung (UV)	Stevens et al. (2001)
SPAS	Nov. 1994	Aug. 1997	(Shuttle)	CRISTA	thermische Emission (IR)	Stevens et al. (2003)
MSX	May 1996	Feb. 1997	fast sonnensyn- chron polar	SPIRIT III	thermische Emission (IR)	O'Neil et al. (2001)
MSX	May 1996	Dec. 1999	fast sonnen- synchron polar	UVISI	Limb Streuung	Carbary et al. (1999, 2004)
MIR	1996	Mar. 2001	erdnah	Raumstation	sichtbar und UV	Kaleri und Lazarev (1999); Ivanov et al. (2001)
SNOE	Feb. 1998	Dec. 2003	sonnensyn- chron polar fast zirkulär	UVS	Limb Streuung	Merkel et al. (2003); Bailey et al. (2005)
ENVISAT	Mar. 2002	Apr. 2012	sonnensyn- chron fast polar	SCIAMACHY	Limb/Nadir/Okkul- tation (UV, sichtbar, IR)	von Savigny et al. (2004)
Odin	Feb. 2001	operational	sonnensyn- chron zirkulär	SMR OSIRIS	Limb Streuung	Petelina et al. (2006); Hultgren und Gumbel (2014)
SciSat	Aug. 2003	operational	zirkulär stark geneigt	ACE-FTS	Okkultation (IR) und Limb Streuung (UV)	Bernath et al. $(2005)$
AIM	Apr. 2007	operational	sonnensyn- chron zirkulär	SOFIE CIPS CED	Okkultation (11 wavelengths) und Limb Streuung (UV)	Gordley et al. (2006); Lumpe et al. (2013)
Himawary-8	Oct. 2014	operational	geostationär	AHI	Limb Streuung (sichtbar)	Tsuda et al. (2018)
MATS	geplant für 2019		sonnensyn- chron zirkulär		Limb Streuung (UV, IR) und Nadir	Gumbel et al. (2018)

Table C.1: Beobachtungen von polaren mesosphärischen Wolken mit Satelliteninstrumenten (angepasste und erweiterte Tabelle von  $DeLand \ et \ al. \ (2006)$ ).

### Appendix D

## PMC Parameter im Vergleich mit Satellitendaten

AIM ist die erste Satellitenmission zur Messung von PMCs, welche auch die Umgebung in der sich die Eispartikel bilden, miteinbezieht (*Russell et al.*, 2009). Der Satellit bewegt sich auf einer zirkulären, polaren Umlaufbahn in 600 km Höhe. An Bord befinden sich die Messinstrumente SOFIE (engl.: Solar Occultation for Ice Experiment) und CIPS (engl.: Cloud Imaging and Particle Size). SOFIE bestimmt Gaskonzentrationen, Temperaturen und liefert Informationen über PMC-Eigenschaften. CIPS verfügt über vier Kameras, die in verschiedenen Winkeln positioniert sind und aus mehreren Ansichten Bilder von PMCs liefern.

#### CIPS

CIPS ist ein bildgebendes Messinstrument, welches die an Wolken und der Atmosphäre gestreute ultraviolette Strahlung der Sonne bei der Wellenlänge  $\lambda = 265 \,\mathrm{nm}$  detektiert. Verwendet werden vier Nadir-orientierte Kameras (McClintock et al., 2009). Das gesamte Sichtfeld beträgt 80° x 120° (960 km x 1140 km). Die durchschnittliche effektive räumliche Auflösung reicht von 2 km x 2,4 km für die Nadirkameras (Erklärung siehe Anhang C) bis 4,5 km x 3 km für die Vorwärts- und Rückwärtskameras. Jede Kamera macht in etwa 26 Bilder pro Umlaufbahn über der sonnenbeschienenen Polarregion im Sommer (Rusch et al., 2017). In Abbildung D.1 ist die räumliche und zeitliche Abdeckung des Instruments wiedergegeben. Mittels der Kameras werden viele Standorte mit bis zu sieben verschiedenen Streuwinkeln betrachtet, was eine Messung der Phasenfunktion der Wolkenstreuung (Wolken Albedo vs. Streuwinkel) ermöglicht. Daraus kann der Partikelradius und der IWC mit einer räumlichen Auflösung von 25 km<sup>2</sup> abgeleitet werden (Lumpe et al., 2013). Die Aufarbeitung der Messdaten schließt das Entfernen des Rayleigh-Hintergrunds aus der gemessenen Gesamtalbedo mit ein. Anschließend wird ein quantitativer Detektionsalgorithmus auf das resultierende Restsignal angewandt, um zu bestimmen, ob eine Wolke vorhanden ist oder nicht. Wenn eine Wolke erkannt wird, erfolgt die Analyse der



Figure D.1: Geografische Breite und Länge und Abdeckung der Lokalzeit von CIPS für den aufsteigenden und absteigenden Ast für 2009. Es wurde nur jeder fünfte Tag geplottet.

PMC-Streuphasenfunktion, um folgend die Ableitung von mikrophysikalischen Wolkenparametern wie IWC und Radien zu erreichen. CIPS erkennt die an den Wolken gestreute ultraviolette Strahlung unter verschiedenen Streuwinkeln, wodurch die Streuphasenfunktion für jedes Bildpixel gemessen werden kann. Dadurch kann die Albedo direkt bestimmt werden. Die vorgestellten CIPS-Ergebnisse werden für die solaren Zenitwinkel mit Hilfe der normalisierten Streuphasenfunktion berechnet (Lumpe et al., 2013). Dabei werden für die Nordhalbkugel im Juli 2009 solare Zenitwinkel in einem Bereich von etwa  $70^{\circ}$  bis  $90^{\circ}$  für den aufsteigenden und 40° bis 70° für den absteigenden Ast abgedeckt (Abb. D.2). Diese umfassen für die Nordhalbkugel im Juli 2009 nur geringe Normierungsfaktoren zwischen 0,5 und 1,2. Dadurch ist der Vergleich mit MIMAS-Daten, die nicht für alle Streuwinkel normiert wurden, mit den CIPS-Daten gerechtfertigt. Die modellierte Albedo wurde für diesen Teil der Auswertung für eine Wellenlänge von  $\lambda = 265 \,\mathrm{nm}$  und einen Streuwinkel, der durch die Nadir-Blickrichtung und den jeweiligen Sonnenstand gegeben ist, berechnet. Dieser Streuwinkel entspricht dabei in etwa 90°. Durch die Ableitung der Eismasse aus den gestreuten Beobachtungen des Sonnenlichts, bestehen signifikante Unsicherheiten in dem beobachtetem IWC. Dies ist die Folge der r<sup>6</sup>-Abhängigkeit des Streuquerschnitts, die unter diesen Bedingungen gilt.

Sowohl Albedo als auch IWC hängen linear von der Anzahldichte der Eispartikel ab. In Abbildung D.3 sind Korrelationen zwischen der Albedo und dem IWC von CIPS und MIMAS dargestellt. Die Regressionsanalyse dient dazu, den Zusammenhang von PMC-Parametern besser zu verstehen und zur Ableitung des IWC aus Albedo-Messungen. Beide Datensätze zeigen, dass die Albedo linear mit der integrierten Eismassendichte der Säule verbunden ist. Je weniger die Punkte um die Regressionsgerade streuen, je höher ist die Abhängigkeit von der Eisanzahldichte und desto geringer ist der Einfluss des Radius. Dies lässt sich damit begründen, dass der IWC und die Albedo eine unterschiedliche Abhängigkeit vom Radius aufweisen, aber gleichermaßen von der Partikelanzahldichte abhängig sind. In die Berechnung der Albedo bei 265 nm geht der Radius mit r<sup>4</sup>-r<sup>6</sup> ein, in die Berechnung des IWC mit r<sup>3</sup>. Im Modell erhält man eine größere Streuung gegenüber CIPS um den linearen Fit, dennoch ist auch hier der lineare Zusammenhang



Figure D.2: CIPS-Abdeckung des solaren Zenitwinkels mit einer Intervallbreite von  $\Delta x = 2^{\circ}$  für verschiedene Breitenbänder des aufsteigenden (links) und absteigenden (rechts) Astes der Satellitenumlaufbahn für die Nordhalbkugel Juli 2009.

sichtbar und wird durch den hohen Korrelationswert bestätigt. Somit wird die Variabilität dieser Parameter im Wesentlichen durch die Eisanzahldichte beeinflusst. Dies deckt sich mit den Aussagen in Kapitel 5, in dem festgehalten wurde, dass das LT-Verhalten der Eismassendichte hauptsächlich durch die Anzahl der Eisteilchen bestimmt wird und weniger durch den Eispartikelradius. Gleichzeitig werden damit die Ergebnisse von *Hervig et al.* (2009b) und *Hervig und Stevens* (2014) bestätigt.

#### SOFIE

Das Messinstrument SOFIE führt seit Mai 2007 Okkultationsmessungen (siehe Anhang C) in 16 Spektralbändern zwischen 0,29 und 5,32  $\mu$ m durch. Diese werden verwendet, um vertikale Profile der Temperatur, O<sub>3</sub>, H<sub>2</sub>O, CO<sub>2</sub>, CH<sub>4</sub>, NO und PMC-Extinktion zu erhalten (Hervig et al., 2009a). Das Instrument liefert täglich 15 Messungen des Sonnenuntergangs auf der Südhalbkugel und 15 Messungen des Sonnenaufgangs auf der Nordhalbkugel in einem Breitenbereich von  $65^{\circ}-85^{\circ}S/N$ . Die von SOFIE gemessenen solaren Intensitäten werden durch die Mittlung über das Instrumentensichtfeld (engl.: field of view, FOV) beeinflusst. Das FOV am Tangentenpunkt liegt bei  $\sim 1.6 \,\mathrm{km}$  vertikal (Abb. D.4) und  $\sim 4.5 \,\mathrm{km}$  horizontal (Marshall et al., 2011). Das FOV von SOFIE wurde für den Vergleich auch in den Modellergebnissen von MIMAS integriert. Die Länge des Messvolumens (line of sight) beträgt 290 km. Neben der Bestimmung von Gaskonzentrationen und Temperatur liefert SOFIE auch PMC-Eigenschaften als Funktion der Höhe: Teilchengrößen, Teilchenform, Eismassendichte, IWC und Meteorstaub durch Transmissionsmessungen. Zudem wird ein Sonnensenor zur Bestimmung der Position der Sonne verwendet. Für eine detaillierte Instrumentenbeschreibung siehe Hervig et al. (2009a). SOFIE lieferte von 2007 bis 2015 kontinuierliche Messungen von PMCs. Ein Drift in der Umlaufbahn des



Figure D.3: Korrelationen von Albedo mit Werten  $> 2 \cdot 10^{-6} \text{sr}^{-1}$  und Eisgehalt (IWC) von Partikeln > 20 nm, modelliert mit MIMAS LIH5 (blau) im Vergleich zu CIPS (rot) für Juli 2009. Links: CIPS aufsteigender Ast und Lokalzeiten von 18 bis 24 LT für drei verschiedene Breitenbänder von mittleren (oben) zu polaren Breiten (unten). Rechts: CIPS absteigender Ast und Lokalzeiten von 12 bis 18 LT für äquivalente Breitenbänder.

Satelliten AIM hat zu Veränderungen in der geografischen Abdeckung von SOFIE geführt, so dass ab 2015 Messungen im Sommer außerhalb des Polargebietes gemacht wurden (Abb. D.5). Ein Vorteil, den man daraus erhält, ist der Vergleich der modellierten Eisschichten mit Messungen in mittleren Breiten, beispielsweise über Kühlungsborn für das Jahr 2015 (*Hervig et al.*, 2016b). Ab 2016 wurden mit SOFIE keine PMCs mehr beobachtet, da



Figure D.4: Vertikales Instrumentensichtfeld von SOFIE mit einer Halbwertsbreite (engl.: Full Width at Half Maximum, FWHM) von 1,6 km.

die Messung im Sommer auf Breitengraden stattfinden, die außerhalb des PMC-Bereichs liegen. Voraussichtlich soll das Instrument 2020 wieder PMC-Messungen durchführen können. Dabei ist zu beachten, dass die Sonnenaufgangsbeobachtungen von der nördlichen Hemisphäre zur südlichen Hemisphäre wechseln wird. Umgekehrt gilt das auch für die Messungen der Sonnenuntergänge.

Dieser Anhang dient einer Ergänzung des Kapitels 6.2.2. Es werden die Ergebnisse von weiteren Jahren präsentiert. Im Folgenden werden die Höhenprofile und Verteilungsfunktionen der Temperaturen und des Wasserdampfs in Höhe der maximalen Eismassendichte gezeigt (Abb. D.6 und D.7). Ebenfalls werden Höhenprofile und statistische Eigenschaften der PMC Parameter bereitgestellt (Abb. D.8–D.11). Hierzu gehören die Auftrittswahrscheinlichkeiten der Eismassendichte, des mittleren und Medianradius sowie der Eisanzahldichte und des Eisgehalts.



Figure D.5: Breiten- und LT-Abdeckung von SOFIE in Abhängigkeit der Saison.

Die Eismassendichte, der Eisradius und die Eisanzahldichte haben keine gemeinsame Verteilungsform (Abb. D.9). Dies ist mit der funktionellen Verbindung der Parameter zu erklären, die keine lineare Beziehung zueinander aufweist.



Figure D.6: Höhenprofile der Medianwerte der Temperatur und Häufigkeitsverteilungen in Höhe der maximalen Eismassendichte  $(z_{max})$  mit einer Intervallbreite von  $\Delta x = 2 \text{ K}$ , modelliert mit MIMAS LIH5 im Vergleich zu SOFIE für Juli 2007–2009. MIMAS: Modelldaten unter Berücksichtigung der von SOFIE gemessenen Lokalzeit; MIMAS alle LT: Modelldaten mit allen Lokalzeiten.



Figure D.7: Wie Abb. D.6 für Wasserdampfmischungsverhältnisse und Häufigkeitsverteilungen des Wasserdampfs mit einer Intervallbreite von 0,5 ppmv.

Die Auswertung von SOFIE PMC-Beobachtungen erfordert eine Annahme der Formparameter der Partikelgrößenverteilung (*Hervig et al.*, 2009a). Lidarbeobachtungen sowie Modellstudien geben einen Hinweis auf gaußförmige Eispartikelverteilung in Höhe der maximalen Rückstreukoeffizienten (z.B. *Berger und von Zahn*, 2002; *Rapp und Thomas*, 2006; *Baumgarten et al.*, 2010). Die Verteilung wird durch die Gesamtkonzentration der Partikel, den mittleren Radius und die Verteilungsbreite beschrieben. Es gibt verschiedene Anwendungen der Gaußfunktion mit unterschiedlichen Formparametern, oftmals wird aber auch von einer exponentiellen oder Log-Normalverteilung ausgegangen. Die Verteilungsform hängt von verschiedenen Faktoren ab, wie z.B. der Empfindlichkeit des Instruments und den unterschiedlichen Geometrien der Instrumente, die auch unterschiedliche atmosphärische Volumina messen.

Für die Modellierung von Eisteilchen ist es wichtig die Verteilung genau abzuschätzen, da speziell große Eispartikel das optische Signal dominieren und die größte Eismasse enthalten. *Berger et al.* (2019) haben in ihrer Arbeit eine einheitliche Methode vorgestellt, mit der sich die Verteilungen verschiedener PMC-Datensätze darstellen lassen. Die Methode erlaubt eine Analyse von Skalen- und Formparameter eines Datensatzes, mit denen eine Verteilung abgeschätzt werden kann. Dadurch können verschiedene Eisparameterdaten von unterschiedlichen Instrumenten in Verbindung gebracht werden, zum Beispiel aus Satellitenbeobachtungen und bodengebundenen Messungen mit dem Lidar. Dies ist ein Verfahren, was speziell im Hinblick auf Trendanalysen, sehr wichtig sein kann.



Figure D.8: Höhenprofile der Medianwerte von Eismassendichte, Medianradius, effektivem Radius und Eisanzahldichte, modelliert mit MIMAS LIH5 im Vergleich mit Satellitendaten (SOFIE). Es gehen nur Höhenprofile mit einer Eismassendichte von  $> 0,06 \,\mathrm{g \, km^{-3}}$  in die Berechnung für Juli der Jahre 2007–2009 ein.



Figure D.9: Häufigkeitsverteilungen der Eismassendichte, des Medianradius, des effektiven Radius und der Eisanzahldichte in Höhe der maximalen Eismassendichte ( $z_{max}$ ) mit einem Grenzwert IWC<sub>th</sub> > 0,06 g km<sup>-3</sup> und Angabe der Intervallbreite ( $\Delta x$ ), modelliert mit MIMAS LIH5 im Vergleich zu SOFIE für Juli 2007–2009. MIMAS: Modelldaten unter Berücksichtigung der von SOFIE gemessenen Lokalzeit; MIMAS alle LT: Modelldaten mit allen Lokalzeiten.



Figure D.10: Saisonale Variabilität des Eisgehalts (IWC) und Verteilungsfunktion auf einfacher und semilogarithmischer Skala, modelliert mit MIMAS LIH5 im Vergleich zu SOFIE mit einem Grenzwert von IWC<sub>th</sub> =  $0.5 \,\mathrm{g \, km^{-2}}$  für 2007–2009. Die modellierten Daten beziehen sich auf die Orbitposition von SOFIE. Gepunktete Linie (oben): Simulation, die alle Lokalzeiten umfasst. Durchgezogene rote Linie (oben): Simulation, welche die gemessene Lokalzeit von SOFIE berücksichtigt. Rote Fehlerbalken (unten): Angabe der Standardabweichung der Modelldaten mit allen LT.



Figure D.11: Eismassendichte mit einem Grenzwert von IWD<sub>th</sub> = 0,06 g km<sup>-3</sup> für Juli 2007–2009. Oben: SOFIE Beobachtungen. Unten: MIMAS LIH5 Modelldaten für 23±1 h LT. Die durchgezogene Linie stellt jeweils den Medianwert aller Höhenprofile dar. Punkte zeigen die maximale Eismassendichte jedes einzelnen Höhenprofils. Die Höhe des Medianwertes der maximalen Eismassendichte aller Einzelprofile ist mit  $z_{max}$  gekennzeichnet.

### Bibliography

- Asmus, H., H. Wilms, B. Strelnikov, und M. Rapp, On the heterogeneous nucleation of mesospheric ice on meteor smoke particles: microphysical modeling, *Journal of Atmospheric and Solar-Terrestrial Physics*, ff. 180–189, doi: 10.1016/j.jastp.2014.03.009, 2014.
- Avaste, O. A., A. V. Fedynsky, G. M. Grechko, V. I. Sevastyanov, und C. I. Willmann, Advances in noctilucent cloud research in the space era, *pure and applied geophysics*, 118(1), 528–580, doi: 10.1007/BF01586466, 1980a.
- Avaste, O. A., A. V. Fedynsky, G. M. Grechko, V. I. Sevastyanov, und C. I. Willmann, Advances in noctilucent cloud research in the space era, *Pageoph.*, 118(1), 528 – 580, doi: 10.1007/ BF01586466, 1980b.
- Bailey, S. M., A. W. Merkel, G. E. Thomas, und J. N. Carstens, Observations of polar mesospheric clouds by the Student Nitric Oxide Explorer, *Journal of Geophysical Research: Atmospheres*, 110(D13), doi: 10.1029/2004JD005422, 2005.
- Bailey, S. M., G. E. Thomas, D. W. Rusch, A. W. Merkel, C. D. Jeppesen, J. N. Carstens, C. E. Randall, W. E. McClintock, und J. M. Russell, Phase functions of polar mesospheric cloud ice as observed by the CIPS instrument on the AIM satellite, *Journal of Atmospheric and Solar-Terrestrial Physics*, 71(3), 373 380, doi: https://doi.org/10.1016/j.jastp.2008.09.039, global Perspectives on the Aeronomy of the Summer Mesopause Region, 2009.
- Bailey, S. M., G. E. Thomas, M. E. Hervig, J. D. Lumpe, C. E. Randall, J. N. Carstens, B. Thurairajah, D. W. Rusch, J. M. Russell, und L. L. Gordley, Comparing nadir and limb observations of polar mesospheric clouds: The effect of the assumed particle size distribution, *Journal of Atmospheric and Solar-Terrestrial Physics*, 127, 51 – 65, doi: https://doi.org/10. 1016/j.jastp.2015.02.007, layered Phenomena in the Mesopause Region, 2015.
- Bardeen, C. G., O. B. Toon, E. J. Jensen, M. E. Hervig, C. E. Randall, S. Benze, D. R. Marsh, und A. Merkel, Numerical simulations of the three-dimensional distribution of polar mesospheric clouds and comparisons with Cloud Imaging and Particle Size (CIPS) experiment and the Solar Occultation For Ice Experiment (SOFIE) observations, *Journal of Geophysical Research: Atmospheres*, 115(D10), doi: 10.1029/2009JD012451, d10204, 2010.
- Bauer, S. J., R. Gutdeutsch, M. Hantel, H. Reuter, H. O. Rucker, G. Siedler, T. Spohn, R. Steinacker, und W. Zenk, Band 7 Erde und Planeten, Wilhelm Raith, 2001.

- Baumgarten, G., Leuchtende Nachtwolken an der polaren Sommermesopause: Untersuchungen mit dem ALOMAR Rayleigh/Mie/Raman Lidar, Doktorarbeit, Bonn University, Bonn, Germany, 2001.
- Baumgarten, G., und J. Fiedler, Vertical structure of particle properties and water content in noctilucent clouds, *Geophysical Research Letters*, 35, doi: 10.1029/2007GL033084, 2008.
- Baumgarten, G., und D. C. Fritts, Quantifying Kelvin-Helmholtz instability dynamics observed in noctilucent clouds: 1. Methods and observations, *Journal of Geophysical Research: Atmospheres*, 119(15), 9324–9337, doi: 10.1002/2014JD021832, 2014.
- Baumgarten, G., K. H. Fricke, und G. von Cossart, Investigation of the shape of noctilucent cloud particles by polarization lidar technique, *Geophysical Research Letters*, 29(13), doi: 10.1029/2001GL013877, 2002.
- Baumgarten, G., J. Fiedler, F.-J. Lübken, und G. von Cossart, Particle properties and water content of noctilucent clouds and their interannual variation, *Journal of Geophysical Research: Atmospheres*, 113(D6), doi: 10.1029/2007JD008884, d06203, 2008.
- Baumgarten, G., J. Fiedler, und M. Rapp, On microphysical processes of noctilucent clouds (nlc): observations and modeling of mean and width of the particle size-distribution, Atmospheric Chemistry and Physics, 10(14), 6661–6668, doi: 10.5194/acp-10-6661-2010, 2010.
- Baumgarten, G., A. Chandran, J. Fiedler, P. Hoffmann, N. Kaifler, J. Lumpe, A. Merkel, C. E. Randall, D. Rusch, und G. Thomas, On the horizontal and temporal structure of noctilucent clouds as observed by satellite and lidar at ALOMAR (69N), *Geophysical Research Letters*, 39(1), doi: 10.1029/2011GL049935, 101803, 2012.
- Baumgarten, K., M. Gerding, G. Baumgarten, und F.-J. Lübken, Temporal variability of tidal and gravity waves during a record long 10-day continuous lidar sounding, Atmospheric Chemistry & Physics, 18, 371–384, doi: 10.5194/acp-18-371-2018, 2018.
- Baumgarten, K. B., G., und N. Müller, A Trans- European Network of Cameras for Observation of Noctilucent Clouds from 37°N to 69°N, in *Proceedings of the* 19<sup>th</sup> ESA Symposium on European Rocket and Balloon Programmes and Related Research, vol. ESA SP-671, Leibniz-Institut für Atmosphärenphysik an der Universität Rostock, Bad Reichenhall, Germany, 2009.
- Benze, S., C. E. Randall, B. Karlsson, V. L. Harvey, M. T. DeLand, G. E. Thomas, und E. P. Shettle, On the onset of polar mesospheric cloud seasons as observed by SBUV, *Journal of Geophysical Research: Atmospheres*, 117(D7), doi: 10.1029/2011JD017350, 2012.
- Berger, U., Modeling of middle atmosphere dynamics with LIMA, Journal of Atmospheric and Solar-Terrestrial Physics, 70, 1170 – 1200, doi: http://dx.doi.org/10.1016/j.jastp.2008.02.004, 2008.
- Berger, U., und F.-J. Lübken, Trends in mesospheric ice layers in the Northern Hemisphere during 1961 – 2013, Journal of Geophysical Research: Atmospheres, 120(21), 11,277–11,298, doi: 10.1002/2015JD023355, 2015JD023355, 2015.

- Berger, U., und U. von Zahn, Icy particles in the summer mesopause region: Three-dimensional modeling of their environment and two-dimensional modeling of their transport, *Journal of Geophysical Research*, 107(A11), doi: doi:10.1029/2001JA000316, 2002.
- Berger, U., und U. von Zahn, 3d-Modeling of the trajectories of visible NLC particles indicates that these particles nucleate well below the mesopause., *Journal of Geophysical Research*, doi: 10.1029/2006/JD008106, 2007.
- Berger, U., G. Baumgarten, J. Fiedler, und F.-J. Lübken, A new Description of Probability Density Distributions of Polar Mesospheric Clouds, ACP, 19, 4685–4702, doi: 0.5194/acp-19-4685-2019, 2019.
- Bernath, P. F., C. T. McElroy, M. C. Abrams, C. D. Boone, M. Butler, C. Camy-Peyret, M. Carleer, C. Clerbaux, P.-F. Coheur, R. Colin, P. DeCola, M. DeMaziére, J. R. Drummond, D. Dufour, W. F. J. Evans, H. Fast, D. Fussen, K. Gilbert, D. E. Jennings, E. J. Llewellyn, R. P. Lowe, E. Mahieu, J. C. McConnell, M. McHugh, S. D. McLeod, R. Michaud, C. Midwinter, R. Nassar, F. Nichitiu, C. Nowlan, C. P. Rinsland, Y. J. Rochon, N. Rowlands, K. Semeniuk, P. Simon, R. Skelton, J. J. Sloan, M.-A. Soucy, K. Strong, P. Tremblay, D. Turnbull, K. A. Walker, I. Walkty, D. A. Wardle, V. Wehrle, R. Zander, und J. Zou, Atmospheric Chemistry Experiment (ACE): Mission overview, *Geophysical Research Letters*, 32(15), doi: 10.1029/2005GL022386, 2005.
- Carbary, J. F., G. J. Romick, D. Morrison, L. J. Paxton, und C. I. Meng, Altitudes of polar mesospheric clouds observed by a middle ultraviolet imager, *Journal of Geophysical Research:* Space Physics, 104 (A5), 10,089–10,100, doi: 10.1029/1999JA900088, 1999.
- Carbary, J. F., D. Morrison, und G. J. Romick, Hemispheric comparison of PMC altitudes, Geophysical Research Letters, 28(4), 725–728, doi: 10.1029/2000GL012388, 2001.
- Carbary, J. F., D. Morrison, und G. J. Romick, Evidence for bimodal particle distribution from the spectra of polar mesospheric clouds, *Geophysical Research Letters*, 31(13), doi: 10.1029/2004GL020101, 2004.
- Carstens, J. N., S. M. Bailey, J. D. Lumpe, und C. E. Randall, Understanding uncertainties in the retrieval of polar mesospheric clouds from the cloud imaging and particle size experiment in the presence of a bright Rayleigh background, *Journal of Atmospheric and Solar-Terrestrial Physics*, 104, 197 – 212, doi: https://doi.org/10.1016/j.jastp.2013.08.006, 2013.
- Chabrillat, S., und G. Kockarts, Correction to "Simple parameterization of the absorption of the solar Lyman-alpha line", *Geophysical Research Letters*, 24, 2659–2662, doi: 10.1029/97GL52690, 1997.
- Chu, X., P. J. Espy, G. J. Nott, J. C. Diettrich, und C. S. Gardner, Polar mesospheric clouds observed by an iron Boltzmann lidar at Rothera (67.5S, 68.0W), Antarctica from 2002 to 2005: Properties and implications, *Journal of Geophysical Research: Atmospheres*, 111(D20), doi: 10.1029/2006JD007086, d20213, 2006.

- Debrestian, D., J. Lumpe, R. Bevilacqua, E. Shettle, J. Hornstein, und J. Olivero, POAM II observations of polar mesospheric clouds in the Southern Hemisphere, Advances in Space Research, 19(4), 587 590, doi: https://doi.org/10.1016/S0273-1177(97)00178-6, proceedings of the C1.2 and C1.3 Symposia of COSPAR Scientific Commission C, 1997.
- DeLand, M. T., und G. E. Thomas, Updated PMC trends derived from SBUV data, Journal of Geophysical Research: Atmospheres, 120(5), 2140–2166, doi: 10.1002/2014JD022253, 2015a.
- DeLand, M. T., und G. E. Thomas, Updated PMC trends derived from SBUV data, Journal of Geophysical Research: Atmospheres, 120(5), 2140–2166, doi: 10.1002/2014JD022253, 2014JD022253, 2015b.
- DeLand, M. T., E. P. Shettle, G. E. Thomas, und J. J. Olivero, Solar backscattered ultraviolet SBUV observations of polar mesospheric clouds PMCs over two solar cycles, *Journal of Geophysical Research: Atmospheres*, 108(D8), doi: 10.1029/2002JD002398, 8445, 2003.
- DeLand, M. T., E. P. Shettle, G. E. Thomas, und J. J. Olivero, A quarter-century of satellite polar mesospheric cloud observations, *Journal of Atmospheric and Solar-Terrestrial Physics*, 68(1), 9 – 29, doi: https://doi.org/10.1016/j.jastp.2005.08.003, phenomena of the Summertime Mesosphere, 2006.
- Dickinson, R. E., R. G. Roble, und S. W. Bougher, Radiative cooling in the NLTE region of the mesosphere and lower thermosphere - Global energy balance, Advances in Space Research, 7(10), 5 – 15, doi: https://doi.org/10.1016/0273-1177(87)90069-X, 1987.
- Donahue, T. M., B. Guenther, und J. E. Blamont, Noctilucent Clouds in Daytime: Circumpolar Particulate Layers Near the Summer Mesopause, *Journal of the Atmospheric Sciences*, 29(6), 1205–1209, doi: 10.1175/1520-0469(1972)029<1205:NCIDCP>2.0.CO;2, 1972.
- Eidhammer, T., und O. Havnes, Size dependence of the mesospheric dust temperature and its influence on the noctilucent clouds and polar mesosphere summer echo phenomena, *Journal of Geophysical Research*, 106 (A11), 24,831–24,841, doi: 10.1029/2001JA900036, 2001.
- Eremenko, M. N., S. V. Petelina, A. Y. Zasetsky, B. Karlsson, C. P. Rinsland, E. J. Llewellyn, und J. J. Sloan, Shape and composition of PMC particles derived from satellite remote sensing measurements, *Geophysical Research Letters*, 32(16), L16S06, doi: 10.1029/2005GL023013, 2005.
- Feofilov, A., und A. Kutepov, Infrared Radiation in the Mesosphere and Lower Thermosphere: Energetic Effects and Remote Sensing, *Surveys in Geophysics*, 33, 1231–1280, doi: 10.1007/ s10712-012-9204-0, 2012.
- Fiedler, J., G. Baumgarten, und G. von Cossart, Noctilucent Clouds above ALOMAR between 1997 and 2001: Occurrence and Properties, *Journal of Geophysical Research*, 108(D8), 8453, doi: 10.1029/2002JD002419, 2003a.

- Fiedler, J., G. von Cossart, und G. Baumgarten, Noctilucent clouds above ALOMAR between 1997 and 2001: Occurrence and properties, *Journal of Geophysical Research*, 108(D8), 8453, doi: 10.1029/2002JD002419, 2003b.
- Fiedler, J., G. Baumgarten, und G. von Cossart, Mean diurnal variations of noctilucent clouds during 7 years of lidar observations at ALOMAR, Annales Geophysicae, 23(4), 1175–1181, doi: 10.5194/angeo-23-1175-2005, 2005.
- Fiedler, J., G. Baumgarten, und F.-J. Lübken, NLC observations during one solar cycle above ALOMAR, Journal of Atmospheric and Solar-Terrestrial Physics, 71, 424 – 433, doi: http: //dx.doi.org/10.1016/j.jastp.2008.11.010, global Perspectives on the Aeronomy of the Summer Mesopause RegionEighth International Workshop on Layered Phenomena in the Mesopause Region, 2009.
- Fiedler, J., G. Baumgarten, U. Berger, P. Hoffmann, N. Kaifler, und F.-J. Lübken, NLC and the background atmosphere above ALOMAR, Atmospheric Chemistry and Physics, 11(12), 5701–5717, doi: 10.5194/acp-11-5701-2011, 2011.
- Fiedler, J., G. Baumgarten, U. Berger, A. Gabriel, R. Latteck, und F.-J. Lübken, On the early onset of the NLC season 2013 as observed at ALOMAR, *Journal of Atmospheric and Solar-Terrestrial Physics*, 127, 73–77, doi: 10.1016/j.jastp.2014.07.011, 2015.
- Fiedler, J., G. Baumgarten, U. Berger, und F.-J. Lübken, Long-term variations of noctilucent clouds at ALOMAR, *Journal of Atmospheric and Solar-Terrestrial Physics*, (62), 79–89, doi: http://dx.doi.org/10.1016/j.jastp.2016.08.006, 2017.
- Fiocco, G., G. Grams, und G. Visconti, Equilibrium temperatures of small particles in the Earth's upper atmosphere (50–110 km), *Journal of Atmospheric and Terrestrial Physics*, 37(10), 1327 – 1337, doi: https://doi.org/10.1016/0021-9169(75)90125-7, 1975.
- Frank, F., P. Jöckel, S. Gromov, und M. Dameris, Investigating the yield of H<sub>2</sub>O and H<sub>2</sub> from methane oxidation in the stratosphere, *Atmospheric Chemistry and Physics*, 18(13), 9955–9973, doi: 10.5194/acp-18-9955-2018, 2018.
- Fritts, D. C., und M. J. Alexander, Gravity wave dynamics and effects in the middle atmosphere, *Reviews of Geophysics*, 41(1), doi: 10.1029/2001RG000106, 2003.
- Fritts, D. C., P.-D. Pautet, K. Bossert, M. J. Taylor, B. P. Williams, H. Iimura, T. Yuan, N. J. Mitchell, und G. Stober, Quantifying gravity wave momentum fluxes with Mesosphere Temperature Mappers and correlative instrumentation, *Journal of Geophysical Research: Atmospheres*, 119(24), 13,583–13,603, doi: 10.1002/2014JD022150, 2014a.
- Fritts, D. C., K. Wan, J. Werne, T. Lund, und J. H. Hecht, Modeling the implications of Kelvin-Helmholtz instability dynamics for airglow observations, *Journal of Geophysical Research: Atmospheres*, 119(14), 8858–8871, doi: 10.1002/2014JD021737, 2014b.

- Fritts, D. C., L. Wang, B. Laughman, T. S. Lund, und R. L. Collins, Gravity Wave Dynamics in a Mesospheric Inversion Layer: 2. Instabilities, Turbulence, Fluxes, and Mixing, *Journal of Geophysical Research: Atmospheres*, 123(2), 649–670, doi: 10.1002/2017JD027442, 2018.
- Fritts, D. C., A. Miller, B. Kjellstrand, C. Geach, B. P. Williams, B. Kaifler, N. Kaifler, G. Jones, M. Rapp, M. Limon, J. Reimuller, L. Wang, S. Hanany, S. Gisinger, Y. Zhao, G. Stober, und C. E. Randall, PMC Turbo: Studying Gravity Wave and Instability Dynamics in the Summer Mesosphere using Polar Mesospheric Cloud Imaging and Profiling from a Stratospheric Balloon, *Journal of Geophysical Research: Atmospheres*, 2019.
- Gadsden, M., Polar mesospheric clouds seen from geostationary orbit, Journal of Atmospheric and Solar-Terrestrial Physics, 62(1), 31 – 36, doi: https://doi.org/10.1016/S1364-6826(99)00099-1, 2000.
- Gadsden, M., und W. Schröder, Noctilucent Clouds, vol. 18, Springer-Verlag Berlin Heidelberg, doi: 10.1007/978-3-642-48626-5, 1989.
- García-Comas, M., M. López-Puertas, B. Funke, A. A. Jurado-Navarro, A. Gardini, G. P. Stiller, T. von Clarmann, und M. Höpfner, Measurements of global distributions of polar mesospheric clouds during 2005–2012 by MIPAS/Envisat, *Atmospheric Chemistry and Physics*, 16(11), 6701–6719, doi: 10.5194/acp-16-6701-2016, 2016.
- Gelinas, L. J., K. A. Lynch, M. C. Kelley, S. Collins, S. Baker, Q. Zhou, und J. S. Friedman, First observation of meteoric charged dust in the tropical mesosphere, *Geophys. Res. Lett.*, 25(21), 4047–4050, doi: 10.1029/1998GL900089, 1998.
- Gerding, M., M. Kopp, P. Hoffmann, J. Höffner, und F.-J. Lübken, Diurnal variations of midlatitude NLC parameters observed by daylight-capable lidar and their relation to ambient parameters, *Geophysical Research Letters*, 40, 6390–6394, doi: 10.1002/2013GL057955, 2013.
- Gerding, M., M. Kopp, J. Höffner, K. Baumgarten, und F.-J. Lübken, Mesospheric temperature soundings with the new, daylight-capable IAP RMR lidar, Atmospheric Measurement Techniques, 9(8), 3707–3715, doi: 10.5194/amt-9-3707-2016, 2016.
- Gerding, M., J. Zöllner, M. Zecha, K. Baumgarten, J. Höffner, G. Stober, und F.-J. Lübken, Simultaneous observations of NLCs and MSEs at midlatitudes: implications for formation and advection of ice particles, ACP, 18, doi: 10.5194/acp-18-15569-2018, 2018.
- Gordley, L., M. E. Hervig, J. Russell III, C. Fish, G. Paxton, J. C. Burton, und M. McHugh, Sounding the upper mesosphere using broadband solar occultation: The SOFIE experiment, *Proceedings of SPIE - The International Society for Optical Engineering*, 6297, doi: 10.1117/ 12.682050, 2006.
- Gumbel, J., und L. Megner, Charged meteoric smoke as ice nuclei in the mesosphere: Part 1–A review of basic concepts, Journal of Atmospheric and Solar-terrestrial Physics - J ATMOS SOL-TERR PHYS, 71, 1225–1235, doi: 10.1016/j.jastp.2009.04.012, 2009.

- Gumbel, J., und G. Witt, Rocket-borne photometry of NLC particle populations, Advances in Space Research, 28(7), 1053 1058, doi: 10.1016/S0273-1177(01)80036-3, 2001.
- Gumbel, J., L. Megner, O. Christensen, S. Chang, J. Dillner, T. Ekebrand, G. Giono, A. Hammar, J. Hedin, N. Ivchenko, B. Karlsson, M. Kruse, A. Li, S. McCallion, D. Murtagh, G. OlentÅjenko, S. Pak, W. Park, J. Rouse, und G. Witt, The MATS Satellite Mission - Gravity Waves Studies by Mesospheric Airglow/Aerosol Tomography and Spectroscopy, Atmospheric Chemistry and Physics Discussions, fl. 1–41, doi: 10.5194/acp-2018-1162, 2018.
- Hale, B. N., und P. L. M. Plummer, Molecular model for ice clusters in a supersaturated vapor, The Journal of Chemical Physics, 61(10), 4012–4019, doi: 10.1063/1.1681694, 1974.
- Hartogh, P., G. R. Sonnemann, Song Li, M. Grygalashvyly, U. Berger, und F.-J. Lübken, Water vapor measurements at ALOMAR over a solar cycle compared with model calculations by LIMA, *Journal of Geophysical Research: Atmospheres*, 115, D00I17, doi: 10.1029/2009JD012364, 2010.
- Herbort, F., G. Baumgarten, U. Berger, J. Fiedler, P. Hoffmann, und F.-J. Lübken, Tidal structures within the LIMA model, *Advances in Space Research*, 40(6), 802–808, doi: 10.1016/ j.asr.2007.04.061, 2007.
- Hervig, E. M., und L. Gordley, Temperature, shape, and phase of mesospheric ice from Solar Occultation for Ice Experiment observations, *Journal of Geophysical Research*, 115, doi: 10.1029/2010JD013918, 2010.
- Hervig, M., und D. Siskind, Decadal and inter-hemispheric variability in polar mesospheric clouds, water vapor, and temperature, *Journal of Atmospheric and Solar-Terrestrial Physics*, 68(1), 30 – 41, doi: 10.1016/j.jastp.2005.08.010, phenomena of the Summertime Mesosphere, 2006.
- Hervig, M., R. E. Thompson, M. McHugh, L. L. Gordley, J. M. Russell, und M. E. Summers, First confirmation that water ice is the primary component of polar mesospheric clouds, *Geophysical Research Letters*, 28(6), 971–974, doi: 10.1029/2000GL012104, 2001.
- Hervig, M. E., http://sofie.gats-inc.com/sofie/index.php (abgerufen am 12. Sep. 2018, 07:23), Gats, 2015.
- Hervig, M. E., und M. H. Stevens, Interpreting the 35 year SBUV PMC record with SOFIE observations, Journal of Geophysical Research: Atmospheres, 119(22), 12,689–12,705, doi: 10.1002/2014JD021923, 2014JD021923, 2014.
- Hervig, M. E., L. L. Gordley, M. H. Stevens, J. M. R. III, S. M. Bailey, und G. Baumgarten, Interpretation of SOFIE PMC measurements: Cloud identification and derivation of mass density, particle shape, and particle size, *Journal of Atmospheric and Solar-Terrestrial Physics*, 71 (34), 316 – 330, doi: 10.1016/j.jastp.2008.07.009, global Perspectives on the Aeronomy of the Summer Mesopause RegionEighth International Workshop on Layered Phenomena in the Mesopause Region, 2009a.

- Hervig, M. E., M. H. Stevens, L. L. Gordley, L. E. Deaver, J. M. Russell, und S. M. Bailey, Relationships between polar mesospheric clouds, temperature, and water vapor from Solar Occultation for Ice Experiment (SOFIE) observations, *Journal of Geophysical Research: Atmospheres*, 114 (D20), doi: 10.1029/2009JD012302, d20203, 2009b.
- Hervig, M. E., L. E. Deaver, C. G. Bardeen, J. M. Russell, S. M. Bailey, und L. L. Gordley, The content and composition of meteoric smoke in mesospheric ice particles from SOFIE observations, *Journal of Atmospheric and Solar-Terrestrial Physics*, 84-85, 1 – 6, doi: 10.1016/ j.jastp.2012.04.005, 2012.
- Hervig, M. E., D. E. Siskind, M. H. Stevens, und L. E. Deaver, Inter-hemispheric comparison of PMCs and their environment from SOFIE observations, *Journal of Atmospheric and Solar-Terrestrial Physics*, 104, 285–298, doi: 10.1016/j.jastp.2012.10.013, 2013.
- Hervig, M. E., D. E. Siskind, S. M. Bailey, und J. M. Russell III, The influence of PMCs on water vapor and drivers behind PMC variability from SOFIE observations, *Journal of Atmospheric* and Solar-Terrestrial Physics, 132(5), 124–134, doi: 10.1016/j.jastp.2015.07.010, 2015JD024439, 2015.
- Hervig, M. E., U. Berger, und D. E. Siskind, Decadal variability in PMCs and implications for changing temperature and water vapor in the upper mesosphere, *Journal of Geophysical Research: Atmospheres*, 121(5), 2383–2392, doi: 10.1002/2015JD024439, 2015JD024439, 2016a.
- Hervig, M. E., M. Gerding, M. H. Stevens, R. Stockwell, S. M. Bailey, J. M. Russell III, und G. Stober, Mid-latitude mesospheric clouds and their environment from SOFIE observations, *Journal of Atmospheric and Solar-Terrestrial Physics*, 149, 1–14, doi: 10.1016/j.jastp.2016.09. 004, 2016b.
- Hervig, M. E., J. S. A. Brooke, W. Feng, C. G. Bardeen, und J. M. C. Plane, Constraints on Meteoric Smoke Composition and Meteoric Influx Using SOFIE Observations With Models, *Journal* of Geophysical Research: Atmospheres, 122(24), 13,495–13,505, doi: 10.1002/2017JD027657, 2017.
- Hesstvedt, E., Note on the Nature of Noctilucent Clouds, J. Geophys. Res., 66(6), 1985–1987, doi: 10.1029/JZ066i006p01985, 1961.
- Hildebrand, J., G. Baumgarten, J. Fiedler, und F.-J. Lübken, Winds and temperatures of the Arctic middle atmosphere during January measured by Doppler lidar, Atmospheric Chemistry & Physics, 17(21), 13,345–13,359, doi: 10.5194/acp-2017-167, 2017.
- Hoffmann, P., W. Singer, und D. Keuer, Variability of the mesospheric wind field at middle and Arctic latitudes in winter and its relation to stratospheric circulation disturbances, J. Atmos. Solar-Terr. Phys., 64 (8-11), 1229–1240, doi: 10.1016/S1364-6826(02)00071-8, 2002.
- Holton, J. R., und M. J. Alexander, The Role of Waves in the Transport Circulation of the Middle Atmosphere, *Geophysical Monograph*, 123, 21–35, doi: 10.1029/GM123p0021, 2000.

- Holton, J. R., P. H. Haynes, M. E. McIntyre, A. R. Douglass, R. B. Rood, und L. Pfister, Stratosphere-troposphere exchange, *Rev. Geophys.*, 33(4), 403–440, doi: 10.1029/95RG02097, 1995.
- Hultgren, K., und J. Gumbel, Tomographic and spectral views on the lifecycle of polar mesospheric clouds from Odin/OSIRIS, *Journal of Geophysical Research: Atmospheres*, 119(24), 14,129– 14,143, doi: 10.1002/2014JD022435, 2014.
- Hunten, D. M., R. P. Turco, und O. B. Toon, Smoke and Dust Particles of Meteoric Origin in the Mesosphere and Stratosphere, *Journal of the Atmospheric Sciences*, 37(6), 1342–1357, doi: 10.1175/1520-0469(1980)037<1342:SADPOM>2.0.CO;2, 1980.
- Ivanov, A. V., A. A. Kamenev, V. D. Starichenkova, und L. D. Timakova, Study of the radiation of equatorial noctilucent clouds in the mid-UV spectral region, J. Opt. Technol., 68(2), 93, doi: 10.1364/JOT.68.000093, 2001.
- Jesse, O., Die Höhe der leuchtenden Nachtwolken, Astronomische Nachrichten, 140, 161, doi: 10.1002/asna.18961401102, 1896.
- Kaifler, B., F.-J. Lübken, J. Höffner, R. J. Morris, und T. P. Viehl, Lidar observations of gravity wave activity in the middle atmosphere over Davis (69°S, 78°E), Antarctica, *Journal* of Geophysical Research, ff. 4506–4521, doi: 10.1002/2014JD022879, 2015.
- Kaifler, N., G. Baumgarten, A. Klekociuk, S. Alexander, J. Fiedler, und F.-J. Lübken, Small scale structures of NLC observed by lidar at 69N/69S and their possible relation to gravity waves, *Journal of Atmospheric and Solar-Terrestrial Physics*, 104, 244 – 252, doi: 10.1016/j.ja stp.2013.01.004, 2013.
- Kaleri, A. Y., und A. I. Lazarev, New observations of noctilucent clouds from the MIR orbital station, J. Opt. Technol., 66(4), 300, doi: 10.1364/JOT.66.000300, 1999.
- Karlsson, B., H. Körnich, und J. Gumbel, Evidence for interhemispheric stratosphere-mesosphere coupling derived from noctilucent cloud properties, *Geophys. Res. Lett.*, 34(16), L16806, doi: 10.1029/2007GL030282, 2007.
- Keesee, R. G., Nucleation and particle formation in the upper atmosphere, Journal of Geophysical Research: Atmospheres, (D12), 14,683–14,692, doi: 10.1029/JD094iD12p14683, 1989.
- Kiliani, J., 3-d modeling of noctilucent cloud evolution and relationship to the ambient atmosphere, Doktorarbeit, IAP Kühlungsborn, Germany, 2014.
- Kiliani, J., G. Baumgarten, F.-J. Lübken, U. Berger, und P. Hoffmann, Temporal and spatial characteristics of the formation of strong noctilucent clouds, *Journal of Atmospheric and Solar-Terrestrial Physics*, 104, 151 – 166, doi: 10.1016/j.jastp.2013.01.005, 2013.
- Kiliani, J., G. Baumgarten, F.-J. Lübken, und U. Berger, Impact of particle shape on the morphology of noctilucent clouds, Atmospheric Chemistry & Physics, 15, 12,897–12,907, doi: 10.5194/acp-15-12897-2015, 2015.

- Körner, U., und G. R. Sonnemann, Global three-dimensional modeling of the water vapor concentration of the mesosphere-mesopause region and implications with respect to the noctilucent cloud region, *Journal of Geophysical Research*, 106 (D9), 9639–9651, doi: 10.1029/2000JD900744, 2001.
- LASP, http://lasp.colorado.edu/aim/download-data-pmc.php (abgerufen am 04. Juni 2018, 10:06), Level 3c-v4.20, Laboratory for Atmospheric and Space Physics, 2011.
- López-Puertas, M., M. García-Comas, B. Funke, D. Bermejo Pantaleaen, M. Haepfner, U. Grabowski, G. Stiller, T. Clarmann, und C. Savigny, Measurements of polar mesospheric clouds in infrared emission by MIPAS/ENVISAT, *Journal of Geophysical Research*, 114, doi: 10.1029/2009JD012548, 2009.
- Lübken, F.-J., Seasonal variation of turbulent energy dissipation rates at high latitudes as determined by insitu measurements of neutral density fluctuations, *Journal of Geophysical Research*, 102, 13, 441–13, 456, doi: 10.1029/97JD00853, 1997.
- Lübken, F.-J., Thermal structure of the Arctic summer mesosphere, *Journal of Geophysical Research: Atmospheres*, 104(D8), 9135–9149, doi: 10.1029/1999JD900076, 1999.
- Lübken, F.-J., M. Rapp, und I. Strelnikova, The sensitivity of mesospheric ice layers to atmospheric background temperatures and water vapor, *ASR*, 40, doi: 10.1016/j.asr.2007.01.014, 2007.
- Lübken, F.-J., G. Baumgarten, J. Fiedler, M. Gerding, J. Höffner, und U. Berger, Seasonal and latitudinal variation of noctilucent cloud altitudes, *Geophysical Research Letters*, 35(6), doi: 10.1029/2007GL032281, 106801, 2008.
- Lübken, F.-J., U. Berger, und G. Baumgarten, Stratospheric and solar cycle effects on longterm variability of mesospheric ice clouds, *Journal of Geophysical Research*, D00I06, doi: 10.1029/2009JD012377, 2009a.
- Lübken, F.-J., J. Lautenbach, J. Höffner, M. Rapp, und M. Zecha, First continuous temperature measurements within polar mesosphere summer echoes, *Journal of Atmospheric and Solar-Terrestrial Physics*, doi: 10.1016/j.jastp.2008.06.001, 2009b.
- Lübken, F.-J., U. Berger, und G. Baumgarten, Temperature trends in the midlatitude summer mesosphere, Journal of Geophysical Research: Atmospheres, 118(24), 13,347–13,360, doi: 10.1002/2013JD020576, 2013.
- Lübken, F.-J., J. Höffner, T. P. Viehl, B. Kaifler, und R. J. Morris, Winter/summer mesopause temperature transition at Davis (69°S) in 2011/2012, *Geophysical Research Letters*, doi: 10. 1002/2014GL060777, 2014.
- Lübken, F.-J., U. Berger, und G. Baumgarten, On the Anthropogenic Impact on the Long-Term Evolution of Noctilucent Clouds, *Geophysical Research Letters*, 45, 6681 – 6689, doi: 10.1029/2018GL07779, 2018.

- 130
- Lumpe, J., und C. Randall, http://lasp.colorado.edu/aim/documentation.php?pmc, CIPS PMC-Daten Produktdokumentation Level 3c, 2011.
- Lumpe, J., S. Bailey, J. Carstens, C. Randall, D. Rusch, G. Thomas, K. Nielsen, C. Jeppesen, W. McClintock, A. Merkel, L. Riesberg, B. Templeman, G. Baumgarten, und J. Russell, Retrieval of polar mesospheric cloud properties from CIPS: Algorithm description, error analysis and cloud detection sensitivity, *Journal of Atmospheric and Solar-Terrestrial Physics*, 104, 167 – 196, doi: 10.1016/j.jastp.2013.06.007, 2013.
- Lynch, K. A., L. J. Gelinas, M. C. Kelley, R. L. Collins, M. Widholm, D. Rau, E. MacDonald, Y. Liu, J. Ulwick, und P. Mace, Multiple sounding rocket observations of charged dust in the polar winter mesosphere, *Journal of Geophysical Research*, 110(A3), A03302, doi: 10.1029/2004JA010502, 2005.
- Machol, J., M. Snow, D. Woodraska, T. Woods, R. Viereck, und O. Coddington, http://lasp.c olorado.edu/lisird/lya/ (abgerufen 2016), LASP Interactive Solar IRradiance Data Center (LISIRD), Lyman-alpha composite, 2016.
- Marshall, B. T., L. E. Deaver, R. E. Thompson, L. L. Gordley, M. J. McHugh, M. E. Hervig, und J. M. Russell III, Retrieval of temperature and pressure using broadband solar occultation: SOFIE approach and results, *Atmospheric Measurement Techniques*, 4(5), 893–907, doi: 10.5194/amt-4-893-2011, 2011.
- Masson-Delmotte, V., P. Zhai, H. O. Pörtner, D. Roberts, J. Skea, P.R.Shukla, A. Pirani, W. Moufouma-Okia, C.Péan, R. Pidcock, S. Connors, J. B. R. Matthews, Y. Chen, X. Zhou, M. I. Gomis, E. Lonnoy, T. Maycock, M. Tignor, und T. Waterfield, Global warming of 1.5°C. AnIPCC Special Report on the impacts of global warming of 1.5°C above pre-industrial levels and related global greenhouse gas emission pathways, in the context of strengthening the global response to the threat of climate change, sustainable development, and efforts to eradicate poverty, IPCC, 2018.
- McClintock, W., D. Rusch, G. Thomas, A. Merkel, M. Lankton, V. Drake, S. Bailey, und J. Russell, The cloud imaging and particle size experiment on the Aeronomy of Ice in the mesosphere mission: Instrument concept, design, calibration, and on-orbit performance, *Journal* of Atmospheric and Solar-Terrestrial Physics, 71 (3), 340 – 355, doi: 10.1016/j.jastp.2008.10.011, global Perspectives on the Aeronomy of the Summer Mesopause Region, 2009.
- McHugh, M., M. Hervig, B. Magill, R. Thompson, E. Remsberg, J. Wrotny, und J. Russell III, Improved mesospheric temperature, water vapor and polar mesospheric cloud extinctions from HALOE, *Geophysical Research Letters*, 30, doi: 10.1029/2002GL016859, 2003.
- McHugh, M., B. Magill, K. A. Walker, C. D. Boone, P. F. Bernath, und J. M. Russell III, Comparison of atmospheric retrievals from ACE and HALOE, *Geophysical Research Letters*, 32(15), doi: 10.1029/2005GL022403, 2005.

- McPeters, R. D., https://acd-ext.gsfc.nasa.gov/Data\_services/merged/index.html (abgerufen am 05. Okt. 2018, 16:40), National Aeronautics and Space Administration (NASA), Goddard Space Flight Center, SBUV Merged Ozone Data Set (MOD), 2017.
- Megner, L., Minimal impact of condensation nuclei characteristics on observable Mesospheric ice properties, Journal of Atmospheric and Solar-Terrestrial Physics, 73(14-15), 2184 – 2191, doi: 10.1016/j.jastp.2010.08.006, layered Phenomena in the Mesopause Region, 2011.
- Megner, L., M. Rapp, und J. Gumbel, Distribution of meteoric smoke sensitivity to microphysical properties and atmospheric conditions, Atmospheric Chemistry and Physics, 6(12), 4415–4426, doi: 10.5194/acp-6-4415-2006, 2006.
- Megner, L., D. E. Siskind, M. Rapp, und J. Gumbel, Global and temporal distribution of meteoric smoke: A two-dimensional simulation study, *Journal of Geophysical Research: Atmospheres*, 113(D3), doi: 10.1029/2007JD009054, 2008b.
- Megner, L., O. Christensen, B. Karlsson, S. Benze, und V. Fomichev, Comparison of retrieved noctilucent cloud particle properties from Odin tomography scans and model simulations., *Atmospheric Chemistry and Physics*, 16, doi: 10.5194/acp-16-15135-2016, 2016.
- Merkel, A., G. Thomas, S. Palo, und S. Bailey, Observations of the 5-day planetary wave in PMC measurements from the Student Nitric Oxide Explorer Satellite, *Geophysical Research Letters*, 30, doi: 10.1029/2002GL016524, 2003.
- Merkel, A. W., R. R. Garcia, S. M. Bailey, und J. M. Russell III, Observational studies of planetary waves in PMCs and mesospheric temperature measured by SNOE and SABER, *Journal of Geophysical Research: Atmospheres*, 113(D14), doi: 10.1029/2007JD009396, 2008.
- Murphy, D. M., und T. Koop, Review of the vapour pressures of ice and supercooled water for atmospheric applications, *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society*, 131(608), 1539–1565, doi: 10.1256/qj.04.94, 2005.
- Murray, B. J., und E. J. Jensen, Homogeneous nucleation of amorphous solid water particles in the upper mesosphere, *Journal of Atmospheric and Solar-Terrestrial Physics*, 72(1), 51 61, doi: 10.1016/j.jastp.2009.10.007, 2010.
- Nachbar, M., H. Wilms, D. Duft, T. Aylett, K. Kitajima, T. Majima, J. M. C. Plane, M. Rapp, und T. Leisner, The impact of solar radiation on polar mesospheric ice particle formation, *Atmospheric Chemistry and Physics*, 19(7), 4311–4322, doi: 10.5194/acp-19-4311-2019, 2019.
- Nussbaumer, V., K. H. Fricke, M. Langer, W. Singer, und U. von Zahn, First simultaneous and common volume observations of noctilucent clouds and polar mesosphere summer echoes by lidar and radar, *Journal of Geophysical Research: Atmospheres*, 101(D14), doi: 10.1029/96JD01213, 1996.
- O'Neil, R. R., E. N. Richards, C. H. Humphrey, A. T. Stair, und M. E. Gardner, MSX: Infrared Emission From Polar Mesospheric Clouds, AGU Spring Meeting Abstracts, SA31B-11, 2001.

- Petelina, S., E. Llewellyn, D. Degenstein, und N. Lloyd, Odin/OSIRIS limb observations of polar mesospheric clouds in 2001–2003, Journal of Atmospheric and Solar-Terrestrial Physics, 68(1), 42 – 55, doi: 10.1016/j.jastp.2005.08.004, Phenomena of the Summertime Mesosphere, 2006.
- Petty, G., A First Course in Atmospheric Radiation, Sundog Pub., doi: 10.1029/2004EO360007, 2004.
- Plane, J. M. C., The role of sodium bicarbonate in the nucleation of noctilucent clouds, Ann. Geophys., 18(7), 807–814, doi: 10.1007/s00585-000-0807-2, 2000.
- Plumb, R. A., Stratospheric Transport, *J. Meteor. Soc. Japan*, *80*, 793–809, doi: 10.2151/jmsj.80. 793, 2002.
- Pruppacher, R., Hans, J. Klett, und P. Wang, Microphysics of Clouds and Precipitation, Aerosol Science and Technology, 28, 381–382, doi: 10.1080/02786829808965531, 1998.
- Rapp, M., und F.-J. Lübken, Polar mesosphere summer echoes (PMSE): Review of observations and current understanding, Atmospheric Chemistry and Physics, 4(11/12), 2601–2633, doi: 10.5194/acp-4-2601-2004, 2004.
- Rapp, M., und G. E. Thomas, Modeling the microphysics of mesospheric ice particles: Assessment of current capabilities and basic sensitivities, *Journal of Atmospheric and Solar-Terrestrial Physics*, 68(7), 715 – 744, doi: 10.1016/j.jastp.2005.10.015, 2006.
- Rapp, M., F.-J. Lübken, F.-J.bken, A. Müllemann, G. E. Thomas, und E. J. Jensen, Smallscale temperature variations in the vicinity of NLC: Experimental and model results, *Journal* of Geophysical Research: Atmospheres, 107(D19), AAC 11–1–AAC 11–20, doi: 10.1029/ 2001JD001241, 4392, 2002.
- Rapp, M., G. E. Thomas, und G. Baumgarten, Spectral properties of mesospheric ice clouds: Evidence for nonspherical particles, *Journal of Geophysical Research*, 112(D03211), doi: 10. 1029/2006JD007322, 2007.
- Rapp, M., I. Strelnikova, B. Strelnikov, P. Hoffmann, M. Friedrich, J. Gumbel, L. Megner, U.-P. Hoppe, S. Robertson, S. Knappmiller, M. Wolff, und D. R. Marsh, Rocket-borne in situ measurements of meteor smoke: Charging properties and implications for seasonal variation, *Journal of Geophysical Research*, doi: 10.1029/2009JD012725, 2010.
- Rapp, M., J. M. C. Plane, B. Strelnikov, G. Stober, S. Ernst, J. Hedin, M. Friedrich, und U.-P. Hoppe, In situ observations of meteor smoke particles (MSP) during the Geminids 2010: constraints on MSP size, work function and composition, *Annales Geophysicae*, 30(12), 1661–1673, doi: 10.5194/angeo-30-1661-2012, 2012.
- Reid, G. C., Ice clouds at the summer polar mesopause, J. Atmos. Sci., 32(3), 523–535, doi: 10.1175/1520-0469(1975)032<0523:ICATSP>2.0.CO;2, 1975.
- Rieger, D., Der Einfluss von natürlichem Aerosol auf Wolken über Mitteleuropa, Doktorarbeit, Fakultät für Physik des Karlsruher Instituts für Technologie, 2017.

- Robert, C., Investigation of noctilucent cloud properties and their connection with solar activity, Doktorarbeit, Vom Fachbereich für Physik und Elektrotechnik der Universität Bremen, 2009.
- Robert, C. E., C. von Savigny, J. P. Burrows, und G. Baumgarten, Climatology of noctilucent cloud radii and occurrence frequency using SCIAMACHY, *Journal of Atmospheric and Solar-Terrestrial Physics*, 71(3), 408 – 423, doi: 10.1016/j.jastp.2008.10.015, global Perspectives on the Aeronomy of the Summer Mesopause Region, 2009.
- Robertson, S., S. Dickson, M. Horanyi, Z. Sternovsky, M. Friedrich, D. Janches, L. Megner, und B. P. Williams, Detection of Meteoric Smoke Particles in the Mesosphere by a Rocketborne Mass Spectrometer, *Journal of Atmospheric and Solar-Terrestrial Physics*, 118, doi: 10.1016/j.jastp.2013.07.007, 2014.
- Rong, P. P., J. M. Russell III, B. T. Marshall, D. E. Siskind, M. E. Hervig, L. L. Gordley, P. F. Bernath, und K. A. Walker, Version 1.3 AIM SOFIE measured methane (CH4): Validation and seasonal climatology, *Journal of Geophysical Research: Atmospheres*, 121 (21), 13,158–13,179, doi: 10.1002/2016JD025415, 2016.
- Rusch, D., G. Thomas, A. Merkel, J. Olivero, A. Chandran, J. Lumpe, J. Carstans, C. Randall, S. Bailey, und J. Russell, Large ice particles associated with small ice water content observed by AIM CIPS imagery of polar mesospheric clouds: Evidence for microphysical coupling with small-scale dynamics, *Journal of Atmospheric and Solar-Terrestrial Physics*, 162, 97 – 105, doi: 10.1016/j.jastp.2016.04.018, layered Phenomena in the Mesopause Region, 2017.
- Russell, J. M., S. M. Bailey, L. L. Gordley, D. W. Rusch, M. Horájnyi, M. E. Hervig, G. E. Thomas, C. E. Randall, D. E. Siskind, M. H. Stevens, M. E. Summers, M. J. Taylor, C. R. Englert, P. J. Espy, W. E. McClintock, und A. W. Merkel, The Aeronomy of Ice in the Mesosphere (AIM) mission: Overview and early science results, *Journal of Atmospheric and Solar-Terrestrial Physics*, 71(3–4), 289 299, doi: 10.1016/j.jastp.2008.08.011, global Perspectives on the Aeronomy of the Summer Mesopause RegionEighth International Workshop on Layered Phenomena in the Mesopause Region, 2009.
- Russell, J. M., P. Rong, M. E. Hervig, D. E. Siskind, M. H. Stevens, S. M. Bailey, und J. Gumbel, Analysis of northern midlatitude noctilucent cloud occurrences using satellite data and modeling, *Journal of Geophysical Research: Atmospheres*, 119(6), 3238–3250, doi: 10.1002/2013JD021017, 2013JD021017, 2014.
- Saunders, R. W., und J. M. Plane, A laboratory study of meteor smoke analogues: Composition, optical properties and growth kinetics, *Journal of Atmospheric and Solar-Terrestrial Physics*, 68(18), 2182 – 2202, doi: 10.1016/j.jastp.2006.09.006, 2006.
- Schmidt, F., G. Baumgarten, U. Berger, J. Fiedler, und F.-J. Lübken, Local time dependence of polar mesospheric clouds: a model study, Atmospheric Chemistry and Physics, 18(12), 8893–8908, doi: 10.5194/acp-18-8893-2018, 2018.

- Schöch, A., G. Baumgarten, und J. Fiedler, Polar middle atmosphere temperature climatology from rayleigh Lidar measurements at ALOMAR (69° N), Ann. Geophys., 26(7), 1681–1698, doi: 10.5194/angeo-26-1681-2008, 2008.
- Seele, C., und P. Hartogh, Water vapor of the polar middle atmosphere: Annual variation and summer mesosphere Conditions as observed by ground-based microwave spectroscopy, *Geophysical Research Letters*, 26(11), 1517–1520, doi: 10.1029/1999GL900315, 1999.
- Singer, W., J. Bremer, W. Hocking, J. Weiss, R. Latteck, und M. Zecha, Temperature and wind tides around the summer mesopause at middle and arctic latitudes, *Advances in Space Research*, 31(9), 2055–2060, doi: 10.1016/SO273-1177(03)00228-X, 2003.
- Skinner, L., und J. Sambles, The Kelvin equation a review, *Journal of Aerosol Science*, 3(3), 199 210, doi: 10.1016/0021-8502(72)90158-9, 1972.
- Sonnemann, G. R., M. Grygalashvyly, und U. Berger, Autocatalytic water vapor production as a source of large mixing ratios within the middle to upper mesosphere, *Journal of Geophysical Research*, doi: 10.1029/2004JD005593, 2005.
- Stevens, M. H., R. R. Conway, C. R. Englert, M. E. Summers, K. U. Grossmann, und O. A. Gusev, PMCs and the water frost point in the Arctic summer mesosphere, *Geophysical Research Letters*, 28(23), 4449–4452, doi: 10.1029/2001GL013598, 2001.
- Stevens, M. H., J. Gumbel, C. R. Englert, K. U. Grossmann, M. Rapp, und P. Hartogh, Polar mesospheric clouds formed from space shuttle exhaust, *Geophysical Research Letters*, 30(10), doi: 10.1029/2003GL017249, 2003.
- Stevens, M. H., C. R. Englert, M. T. DeLand, und M. Hervig, The polar mesospheric cloud mass in the Arctic summer, *Journal of Geophysical Research: Space Physics*, 110(A2), doi: 10.1029/2004JA010566, a02306, 2005.
- Stevens, M. H., D. E. Siskind, S. D. Eckermann, L. Coy, J. P. McCormack, C. R. Englert, K. W. Hoppel, K. Nielsen, A. J. Kochenash, M. E. Hervig, C. E. Randall, J. Lumpe, S. M. Bailey, M. Rapp, und P. Hoffmann, Tidally induced variations of polar mesospheric cloud altitudes and ice water content using a data assimilation system, *Journal of Geophysical Research: Atmospheres*, 115(D18), doi: 10.1029/2009JD013225, d18209, 2010.
- Stevens, M. H., R. S. Lieberman, D. E. S. J. P. McCormack, M. E. Hervig, und C. R. Englert, Periodicities of polar mesospheric clouds inferred from a meteorological analysis and forecast system, *Journal of Geophysical Research: Atmospheres*, 122, doi: 10.1002/2016JD025349, 2017.
- Strelnikova, I., M. Rapp, S. Raizada, und M. Sulzer, Meteor smoke particle properties derived from Arecibo incoherent scatter radar observations, *Geophys. Res. Lett.*, 34(15), L15815, doi: 10.1029/2007GL030635, 2007.
- Tans, P., https://www.esrl.noaa.gov/gmd/ccgg/trends/ (abgerufen am 02. Okt. 2018, 16:45, Hawaii, USA, National Oceanic and Atmospheric Administration, Earth System Research Laboratory (NOAA/ESRL), Global Monitoring Division, 2018.

- Thomas, G., Is the polar mesosphere the miner's canary of global change?, Advances in Space Research, 18(3), 149 158, doi: 10.1016/0273-1177(95)00855-9, 1996a.
- Thomas, G. E., Global change in the mesosphere-lower thermosphere region: has it already arrived?, *Journal of Atmosperic and Solar-Terrestrial Physics*, 58(14), 1629–1656, doi: 10.1016/0021-9169(96)00008-6, 1996b.
- Thomas, G. E., Are noctilucent clouds harbingers of global change in the middle atmosphere?, Advances in Space Research, 32(9), 1737 – 1746, doi: 10.1016/S0273-1177(03)90470-4, 2003.
- Thomas, G. E., und J. J. Olivero, Climatology of polar mesospheric clouds. II Further analysis of Solar Mesosphere Explorer data, *Journal of Geophysical Research: Atmospheres*, 94, 14,673– 14,681, doi: 10.1029/JD094iD12p14673, 1989.
- Tolman, R. C., The Effect of Droplet Size on Surface Tension, The Journal of Chemical Physics, 17(3), 333–337, doi: 10.1063/1.1747247, 1949.
- Trainer, M., O. B. Toon, und M. Tolbert, Measurements of Depositional Ice Nucleation on Insoluble Substrates at Low Temperatures: Implications for Earth and Mars, *Journal of Physical Chemistry*, 113, doi: 10.1021/jp805140p, 2008.
- Tsuda, T., Y. Hozumi, K. Kawaura, K. Hosokawa, H. Suzuki, und T. Nakamura, Polar mesospheric clouds observed by Himawari-8, Atmospheric Measurement Techniques Discussions, ff. 1–8, doi: 10.5194/amt-2018-120, 2018.
- Turco, R. P., O. B. Toon, R. C. Whitten, R. G. Keesee, und D. Hollenbach, Noctilucent clouds: Simulation studies of their genesis, properties and global influences, *Planet. Space Sci.*, 30(11), 1147–1181, doi: 10.1016/0032-0633(82)90126-X, 1982.
- Uppala, S., From ERA-15 to ERA-40 and ERA-Interim, in *Conference Paper*, ECMWF/Geo Workshop on Atmospheric Reanalyis, 19-22 June 2006, ECMWF, Shinfield Park, Reading, 2006.
- Uppala, S. M., P. W. KÅllberg, A. J. Simmons, U. Andrae, V. D. C. Bechtold, M. Fiorino, J. K. Gibson, J. Haseler, A. Hernandez, G. A. Kelly, X. Li, K. Onogi, S. Saarinen, N. Sokka, R. P. Allan, E. Andersson, K. Arpe, M. A. Balmaseda, A. C. M. Beljaars, L. V. D. Berg, J. Bidlot, N. Bormann, S. Caires, F. Chevallier, A. Dethof, M. Dragosavac, M. Fisher, M. Fuentes, S. Hagemann, E. Hólm, B. J. Hoskins, L. Isaksen, P. A. E. M. Janssen, R. Jenne, A. P. Mcnally, J.-F. Mahfouf, J.-J. Morcrette, N. A. Rayner, R. W. Saunders, P. Simon, A. Sterl, K. E. Trenberth, A. Untch, D. Vasiljevic, P. Viterbo, und J. Woollen, The ERA-40 reanalysis, *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society*, 131(612), 2961–3012, doi: 10.1256/qj.04.176, 2005.
- Vogel, G., D. Spänkuch, W. Enke, W. Singer, und G. Entzian, Variations of middle atmospheric CO<sub>2</sub> cooling rates, *PIRSL*, ff. 311–314, 1989.

- von Cossart, G., J. Fiedler, und U. von Zahn, Size distributions of NLC particles as determined from 3-color observations of NLC by groundbased lidar, *Geophysical Research Letters*, 26, 1513–1516, doi: 10.1029/1999GL900226, 1999.
- von Savigny, C., A. Kokhanovsky, H. Bovensmann, K.-U. Eichmann, J. Kaiser, S. Noël, A. Rozanov, J. Skupin, und J. Burrows, NLC detection and particle size determination: first results from SCIAMACHY on ENVISAT, Advances in Space Research, 34 (4), 851 – 856, doi: 10.1016/j.asr. 2003.05.050, trace Constituents in the Troposphere and Lower Stratosphere, 2004.
- von Zahn, U., Are noctilucent clouds a "'Miner's Canary"' for global change?, *Eos, Transactions American Geophysical Union*, 84 (28), 261–264, doi: 10.1029/2003EO280001, 2003.
- von Zahn, U., und U. Berger, Langfristige "Anderungen in Eigenschaften der oberen Atmosphäre, Verlag Ferdinand Sch"oningh, Paderborn, doi: 10.30965/9783657773480\_004, Vortr"age, NM 478, 87 S., 2011.
- von Zahn, U., G. von Cossart, J. Fiedler, und D. Rees, Tidal variations of noctilucent clouds measured at 69°N latitude by groundbased lidar, *Geophysical Research Letters*, 25, 1289–1292, doi: 10.1029/98gl00546, 1998.
- von Zahn, U., G. von Cossart, J. Fiedler, K. H. Fricke, G. Nelke, G. Baumgarten, D. Rees, A. Hauchecorne, und K. Adolfsen, The ALOMAR Rayleigh/Mie/Raman lidar: Objectives, configuration, and performance, Ann. Geophys., 18, 815–833, 2000.
- Walcek, C. J., Minor flux adjustment near mixing ratio extremes for simplified yet highly accurate monotonic calculation of tracer advection, *Journal of Geophysical Research: Atmospheres*, 105(D7), 9335–9348, doi: 10.1029/1999JD901142, 2000.
- Walcek, C. J., und N. M. Aleksic, A simple but accurate mass conservative, peak-preserving, mixing ratio bounded advection algorithm with FORTRAN code, Atmospheric Environment, 32(22), 3863 – 3880, doi: 10.1016/S1352-2310(98)00099-5, 1998.
- Walter, W., Die Integralsätze von Gauß, Green und Stokes. In: Analysis 2., Springer, Berlin, Heidelberg, doi: https://doi.org/10.1007/978-3-642-97402-1\_8, 1991.
- Wickwar, V. B., M. J. Taylor, J. P. Herron, und B. A. Martineau, Visual and lidar observations of noctilucent clouds above Logan, Utah, at 41.7°N, *Journal of Geophysical Research: Atmospheres*, 107(D7), ACL 2–1–ACL 2–6, doi: 10.1029/2001JD001180, 2002.
- Wilhelm, S., G. Stober, und P. Brown, Climatologies and long-term changes of mesospheric wind and wave measurements based on radar observations at high and mid-latitudes, doi: 10.5194/angeo-37-851-2019, submitted, 2019.
- Wilms, H., Microphysics of ice particles in the polar summer mesosphere, Doktorarbeit, Fakultät für Physik der Ludwig–Maximilians–Universität München, 2016.
- Wilms, H., M. Rapp, und A. Kirsch, Nucleation of mesospheric cloud particles: Sensitivities and limits, *Journal of Geophysical Research: Space Physics*, 121(3), 2621–2644, doi: 10.1002/ 2015JA021764, 2015JA021764, 2016.
- Witt, G., Height, structure and displacements of noctilucent clouds, *Tellus*, *14*(1), 1–18, doi: 10.1111/j.2153-3490.1962.tb00115.x, 1962.
- Witt, G., The nature of Noctilucent Clouds, 9, 157-169, 1969.
- Yiğit, E., A. D. Aylward, und A. S. Medvedev, Parameterization of the effects of vertically propagating gravity waves for thermosphere general circulation models: Sensitivity study, *Journal of Geophysical Research: Atmospheres*, 113, doi: 10.1029/2008JD010135, 2008.

## Eidesstattliche Erklärung

Hiermit versichere ich an Eides statt, die vorliegende Arbeit selbstständig und ohne fremde Hilfe verfasst, keine außer den von mir angegebenen Hilfsmitteln und Quellen dazu verwendet und die den genutzten Werken inhaltlich und wörtlich entnommenen Stellen als solche kenntlich gemacht zu haben.

Parkentin, den 17. Februar 2020

(Francie Schmidt)