

Aerosol-Parametrisierung für  
Strahlungstransport-Simulationen  
im ultravioletten bis nahinfraroten  
Spektralbereich

Jean Kauss

Diplomarbeit im Studiengang Physik

Institut für Umweltphysik  
Universität Bremen

Diese Arbeit wurde am  
Institut für Umweltphysik (iup)  
der Universität Bremen angefertigt.

Abgabetermin: 17. November 1998  
1. Gutachter: Prof. Dr. John P. Burrows  
2. Gutachter: Prof. Dr. Jörn Bleck-Neuhaus  
Diese Ausgabe: erste Korrektur, 1. April 1999

# Inhaltsverzeichnis

<b>1</b>	<b>Einleitung</b>	<b>5</b>
<b>2</b>	<b>Mikrophysikalische Eigenschaften</b>	<b>8</b>
2.1	Aerosol-Komponenten . . . . .	9
2.1.1	Wasserlöslich . . . . .	10
2.1.2	Seesalz . . . . .	10
2.1.3	Sulfat . . . . .	10
2.1.4	Unlöslich . . . . .	10
2.1.5	Ruß . . . . .	11
2.1.6	Mineralisch . . . . .	11
2.1.7	Vulkanische Asche . . . . .	11
2.1.8	Meteoriten-Staub . . . . .	12
2.2	Die Größenverteilung . . . . .	12
2.3	Der Brechungsindex . . . . .	16
<b>3</b>	<b>Mie-Theorie</b>	<b>18</b>
3.1	Allgemeine Formulierung des Problems . . . . .	18
3.1.1	Die Maxwell-Gleichungen . . . . .	18
3.1.2	Der komplexe Brechungsindex . . . . .	20
3.1.3	Randbedingungen . . . . .	21
3.1.4	Stokes Parameter . . . . .	21
3.1.5	Amplituden-Streumatrix . . . . .	22
3.1.6	Streumatrix . . . . .	23
3.2	Streuung und Absorption an einer Kugel . . . . .	24
3.2.1	Lösung der Vektor-Wellengleichungen . . . . .	24
3.2.2	Entwicklung der Felder . . . . .	26
3.2.3	Winkelabhängige Funktionen . . . . .	27
3.2.4	Die Mie-Koeffizienten . . . . .	28
3.2.5	Ergebnisse der Mie-Rechnung . . . . .	29
3.3	Mie-Streuung an einem Teilchenensemble . . . . .	31
<b>4</b>	<b>Optische Eigenschaften</b>	<b>33</b>

<b>5</b>	<b>Strahlungstransport in der Atmosphäre</b>	<b>35</b>
<b>6</b>	<b>Anwendungen: Aerosol-Szenarien</b>	<b>36</b>
6.1	Aerosol-Typen . . . . .	37
6.2	Vertikale Aerosol-Verteilungen . . . . .	37
<b>7</b>	<b>Ergebnisse: Aerosol-Einfluß auf die spektrale Radianz</b>	<b>41</b>
<b>8</b>	<b>Zusammenfassung</b>	<b>49</b>
<b>Anhang</b>		<b>50</b>
<b>A</b>	<b>Datentabellen</b>	<b>52</b>
A.1	Größenverteilungen . . . . .	52
A.2	Brechungsindex . . . . .	55
<b>B</b>	<b>Abbildungen</b>	<b>60</b>
B.1	Größenverteilungen . . . . .	60
B.2	Brechungsindex, Extinktions- und Streukoeffizienten . . . . .	64
<b>C</b>	<b>Die <i>SCIATRAN</i> Aerosol-Datenbank</b>	<b>77</b>
<b>Abbildungsverzeichnis</b>		<b>83</b>
<b>Tabellenverzeichnis</b>		<b>85</b>
<b>Literaturverzeichnis</b>		<b>87</b>

# Kapitel 1

## Einleitung

Als Aerosole bezeichnet man alle in der Atmosphäre schwebende Teilchen die Molekülgröße überschreiten und nicht zum größten Teil aus (reinem) Wasser bestehen.

Aerosole können sich direkt oder indirekt auf den Strahlungshaushalt der Erdatmosphäre auswirken [WMO 1983]. Durch Streuung und Absorption wird die in die Erdatmosphäre eindringende solare Strahlung direkt verändert. Je nach Art und räumlicher Verteilung der Aerosolpartikel kann es zu einer Erhöhung oder einer Verringerung der die Atmosphäre wieder verlassenden Strahlung kommen. In ihrer Funktion als Kondensationskerne für Wolken können sie auch einen erheblichen indirekten Einfluß auf den Strahlungshaushalt ausüben.

Obwohl es sich um keine der klassischen meteorologischen Größen handelt, ist der Einfluß von Aerosolen auf Wetter, Strahlungshaushalt und Klima vielfältig. Die unterschiedlichen Aspekte der komplexen Wechselwirkung mit den anderen Komponenten des Wetter- und Klimasystems sind bei weitem noch nicht vollständig erforscht [Jaenicke 1993].

In dieser Arbeit wird der direkte Einfluß von Aerosolen auf die spektrale Radianz am Oberrand der Atmosphäre untersucht. Aus der von passiven Satelliteninstrumenten gemessenen spektralen Radianz können mittels geeigneter Retrieval-Verfahren Rückschlüsse auf die Zusammensetzung der Atmosphäre gezogen werden. Als Voraussetzung für solche Retrieval-Verfahren ist in der Fernerkundung eine detaillierte Simulationen der Aerosol-Einflüsse notwendig.

Aerosolpartikel sind durch ihre Form, Größe, Masse, chemische Zusammensetzung und ihren Feuchtegehalt charakterisiert. Bei der Partikelform geht man meist von sphärischen, homogenen Partikeln aus, und beschreibt deren Größe und Masse durch Radius und Dichte. Dies ist eine Vereinfachung, die derzeit aus Mangel besseren Wissens angenommen wird. Die Zusammensetzung und die Größe eines Aerosolpartikels ist durch seinen Entstehungsmechanismus und durch die Veränderungen, die es in der Atmosphäre durch chemische Reaktionen oder physikalische Prozesse erfahren hat, bestimmt. Da einige Aerosole durch die Aufnahme von Wasser aus der sie umgebenden Luft aufquellen, sind Radius und Dichte zudem von der relativen Luftfeuchtigkeit abhängig.

Über die Stärke des jährlicher Eintrags von Aerosolen in die Atmosphäre finden sich in der Literatur sehr unterschiedliche Angaben. Da sie sich auf ungenaue Abgrenzungen der verschiedenen Aerosol-Arten beziehen, lassen sie sich auch nur schwer untereinander vergleichen. Als wichtigste Aerosol-Quelle nennt [Jaenicke 1993, S. 12] Seesalz-Partikel und Wüstenstaub mit jeweils ca. 2000 Tonnen/Jahr, Kondensation aus der Gasphase mit ca. 1300 Tonnen/Jahr und Wolken als noch wenig erforschte Quelle mit sehr unsicheren 3000 Tonnen/Jahr. In [d'Almeida *et al.* 1991, S. 15] finden sich zusätzliche Abschätzungen des direkten anthropogenen Eintrags von zusammen etwa 188 bis 565 Tonnen/Jahr.

Die Anzahl der Teilchen pro Volumen und die Verteilung der Teilchengrößen im Ensemble hängen neben den Entstehungsprozessen auch von den Aerosolsenken ab. Senken für Aerosole sind vor allem die trockene und die feuchte Deposition. Unter feuchter Deposition versteht man das Auswaschen durch Niederschlag. Die trockene Deposition ist überwiegend von den dynamischen Verhältnissen in der Atmosphäre und der Teilchengröße abhängig. Im allgemeinen fallen große, schwere Teilchen schneller aus als kleine, leichte.

Für die Aerosol-Modellierung, insbesondere für die Simulation des atmosphärischen Strahlungstransports, ist das Konzept der *internen* und *externen* Mischung von zentraler Bedeutung. Aerosole sind das Resultat verschiedener Entstehungsprozesse die in unterschiedlichen Quellgebieten ablaufen. In jedem Punkt der Atmosphäre existiert eine Mischung von Partikeln unterschiedlicher Herkunft. Um die daraus resultierende große Anzahl der Möglichkeiten zur Modellierung von Aerosolen in den Griff zu bekommen, werden die *Aerosol-Typen* als eine Mischung verschiedener *Aerosol-Komponenten* dargestellt [WMO 1983, S. 17]. Jede Aerosol-Komponente soll die für sie charakteristische Herkunft repräsentieren. Sie besteht aus einer *internen* Mischung verschiedener chemischer Substanzen. Mehrere dieser Komponenten werden dann in einer *externen* Mischung zu einem Aerosol-Typ kombiniert. Hierbei soll der Begriff „extern“ andeuten, daß zwischen den verschiedenen Aerosol-Komponenten eines Aerosol-Typs keine chemischen oder physikalischen Wechselwirkung besteht. In Kapitel 2 werden in einer internen Mischung geeignete Aerosol-Komponenten vorgestellt. Aus den dort erarbeiteten mikrophysikalischen Eigenschaften (Brechungsindex und Größenverteilung) werden in Kapitel 3 mittels der sogenannten *Mie-Theorie* die optischen Eigenschaften der Komponenten berechnet. In Kapitel 6 werden diese Komponenten in einer externen Mischung mit konkreten Mengenverhältnissen zu Aerosol-Typen zusammengefaßt.

Durch die überaus komplexen Erscheinungsformen von Aerosolen sind bei ihrer Modellierung einige grundlegende Probleme zu bewältigen. Die in der Aerosol-Forschung gesammelten Erkenntnisse konnten noch nicht zu einem zufriedenstellenden Ergebnis zusammengestellt werden. Auf der einen Seite gibt es einen Mangel an Information, welcher auf der anderen Seite eine nahezu unüberschaubare Anzahl von Ein-

zelmessungen gegenübersteht. Diese Einzelmessungen, welche mit erheblichen Fehlern behaftet sein können, erfassen zudem oft nur kleine räumliche und zeitliche Bereiche und beschränken sich auf ausgewählte Aerosol-Komponenten. Ein weiteres Problem stellt die starke räumliche und zeitliche Variation der Aerosol-Eigenschaften dar. Um diese Schwierigkeiten in den Griff zu bekommen wurde in der vorliegenden Arbeit auf Veröffentlichungen zurückgegriffen, die eine Zusammenfassung des heutigen Wissensstands über Aerosole darstellen. Hervorzuheben sind [d'Almeida *et al.* 1991] und die daraus entwickelte Aerosol-Modellierung [Hess *et al.* 1998, *OPAC*]. Im Unterschied zu *OPAC*, in welchem ein Mie-Programm nach [Quenzel und Müller 1978] verwendet wird, kommt in dieser Arbeit eine Weiterentwicklung eines Programms nach [Hoogen 1995b] (welches auf einen Mie-Algorithmus von [Wiscombe 1979] beruht) zum Einsatz.

Mittels der in Kapitel 6 vorgestellten Aerosol-Szenarien wird in Kapitel 7 der Einfluß von Aerosolen auf die Modellierung der spektrale Radianz im ultravioletten bis nahinfraroten Spektralbereich untersucht. Um die Berechnungen über den vollen Wellenlängenbereich von 236 bis 2500 nm durchführen zu können, wurde der Wellenlängenbereich der Aerosol-Parametrisierung ([Hoogen 1995a]) des Strahlungstransportprogramms *GOMETRAN++* (236 bis 760 nm) erweitert. *GOMETRAN++* dient der Datenauswertung des Satelliteninstruments *GOME*. Für das Nachfolgemodell *SCIAMACHY* wird derzeit das Strahlungstransportprogramm *SCIATRAN* entwickelt. In dieser Arbeit wird also die Aerosol-Parametrisierung für das Strahlungstransportprogramm *SCIATRAN* erarbeitet

[Burrows *et al.* 1990, Burrows *et al.* 1995, Rozanov *et al.* 1997, Buchwitz 1997].

Die erarbeitete Parametrisierung ist einerseits für die Korrektur der Aerosol-Einflüsse in der Fernerkundungs-Auswertung von Spurengasen, sowie als ein Schritt in Richtung eines Aerosol-Retrievals notwendig. Schon die oben erwähnten Probleme in der Aerosol-Forschung machen deutlich, daß es sehr wichtig ist, umfassendere globale Erkenntnisse über atmosphärische Aerosole zu erhalten.

# Kapitel 2

## Mikrophysikalische Eigenschaften

In diesem Kapitel werden die mikrophysikalischen Eigenschaften der Aerosol-Komponenten vorgestellt. Die Einteilung der Komponenten geschieht unter Berücksichtigung der darin enthaltenen Materie, des Entstehungsortes und der Art der Entstehung. Die eigentlichen mikrophysikalische Parameter, welche für die Mie-Rechnungen in Kapitel 3 benötigt werden, sind die für jede Komponente charakteristischen Größenverteilungen und Brechungsindizes.

Die Entstehungsmechanismen von Aerosol-Komponenten lassen sich grundsätzlich in zwei Typen einteilen [Jaenicke 1993]:

1. Direkter Eintrag von Aerosolpartikeln durch aufgewirbelte feste oder flüssige Teilchen. Als Quellgebiet kann also die gesamte Erdoberfläche angesehen werden.
2. Indirekter Eintrag über Vorläufergase, die durch chemische und physikalische Prozesse zu flüssigen oder festen Teilchen umgewandelt werden. Hier spielt sich die Entstehung also innerhalb der Atmosphäre ab. Diese als Gas-Partikel-Umwandlung bezeichneten Prozesse führen im allgemeinen zu Partikeln mit einem Durchmesser von weniger als  $0,5 \mu\text{m}$ . Im englischen wird diese Umwandlung „Gas-to-Particle Conversion“ (GPC) genannt.

Die Aerosol-Komponenten sind nur dazu geeignet mittlere Bedingungen zu beschreiben, welche im konkreten Fall nicht unbedingt mit „speziellen lokalen“ Komponenten übereinstimmen müssen. Es ist nicht immer möglich zwischen den hier definierten Komponenten eine klare Trennungslinie zu ziehen. Letzteres stellt kein generelles Problem dar, da durch geeignete (externe) Mischung verschiedener Komponenten solche Übergänge bei der Modellierung der Aerosol-Typen berücksichtigt werden können. Dieses Modell spiegelt den immer noch mit erheblichen Lücken behafteten heutigen Kenntnisstand der Aerosolforschung wieder.

Die dieser Arbeit zugrundeliegenden Daten zur mikrophysikalischen Parametrisierung und Einteilung der Aerosol-Komponenten stammen überwiegend aus [Koepke und Hess 1994, OPAC]. Aus der aktuelleren Version [Hess *et al.* 1998] er-

geben sich einige kleinere Änderungen bei der unteren und oberen Grenze der Größenverteilung (siehe Kapitel 2.2). Diese wurden hier nicht eingearbeitet. Die *OPAC*-Daten basieren auf sehr vielen Informationsquellen, und stellen eine über Jahrzehnte gewachsene Assimilation dar. Die wichtigsten Quellen sind: [Shettle und Fenn 1979], [WMO 1983] und [d’Almeida *et al.* 1991]. Als Erweiterung des *OPAC*-Modells wurden in der *SCIATRAN*-Aerosol-Parametrisierung zwei weitere Aerosol-Komponenten eingeführt: Vulkanische Asche und Meteoriten-Staub. Erstere entspricht der *WMO*-Empfehlung in [WMO 1983, Kapitel 4.4.6, Seite 31]. Die mikrophysikalischen Parameter des Meteoriten-Staubes sind identisch mit den *LOWTRAN*-Meteoriten-Staub Parametern [Kneizys *et al.* 1986, Jursa 1985].

## 2.1 Aerosol-Komponenten

In Tabelle 2.1 sind die 12 *SCIATRAN* Aerosol-Komponenten mit ihren deutschen und englischen Bezeichnungen aufgelistet. Es ergeben sich hierbei 4 hygroskopische und 8 nicht-hygroskopische Komponenten. Für die Seesalze und mineralischen Komponenten ist in Klammern der jeweilige „Größen-Modus“ angegeben. Die Komponenten werden im folgenden genauer beschrieben.

Nr.	deutsch, (Modus)	englisch, (mode)	hygr.
1	Wasserlöslich	water soluble	ja
2	Seesalz, (Akkumulation)	sea salt, (accumulation)	ja
3	Seesalz, (grobkörnig)	sea salt, (coarse)	ja
4	Sulfat	sulfate	ja
5	Unlöslich; Staub	insoluble	nein
6	Ruß	soot	nein
7	Mineralisch, (Nukleation)	mineral, (nucleation)	nein
8	Mineralisch, (Akkumulation)	mineral, (accumulation)	nein
9	Mineralisch, (grobkörnig)	mineral, (coarse)	nein
10	Mineralisch, (transportiert)	mineral, (transported)	nein
11	Vulkanische Asche; frisch	fresh volcanic ash	nein
12	Meteoriten-Staub	meteoric dust	nein

**Tabelle 2.1:** Die 12 *SCIATRAN* Aerosol-Komponenten, (hygr.=hygroskopisch).

### 2.1.1 Wasserlöslich

Die wasserlösliche Aerosol-Komponente entsteht überwiegend durch Gas-Partikel-Umwandlung. Sie setzt sich aus vielen verschiedenen Sulfaten, Nitraten und anderen wasserlöslichen Bestandteilen zusammen und ist als generelle Mischung kondensierbarer Stoffe anzusehen, welche sich bei Alterung zu sehr kleinen Teilchen zusammensetzen. Insbesondere enthält sie auch anthropogene Sulfate und organische Kohlenstoffverbindungen wie z. B. kleine Partikel die sich über dem Meer aus Dimethylsulfid ( $\text{CH}_3\text{SCH}_3 \hat{=} \text{DMS}$ ) bilden. Dieses maritime Schwefelgas, welches als bedeutende natürliche Sulfatquelle gilt, entsteht durch Verdunstung der im Wasser gelösten Schwefelverbindungen, die wiederum von Algen und Bakterien produziert werden. Also modelliert die wasserlösliche Aerosol-Komponente auch den in [WMO 1983] empfohlenen Seesalz-Nukleations-Modus [Koepke *et al.* 1997, S. 10].

Die Quellen der stickstoffhaltigen Gase sind zum großen Teil anthropogene. Der Ausstoß von Stickoxiden, die bei Verbrennungsprozessen bei hohen Temperaturen anfallen, ist insbesondere in stark industrialisierten Gebieten wesentlich höher als der natürliche Eintrag. Die große Anzahl von unterschiedlichen stickstoffhaltigen Gasen, die durch natürliche oder anthropogene Prozesse entstehen (neben 7 Stickoxiden noch  $\text{NH}_3$  und  $\text{CH}_3\text{COONO}_3$  (Peroxyacetylnitrat  $\hat{=} \text{PAN}$ )), macht es extrem schwierig die einzelnen Quellstärken abzuschätzen [d'Almeida *et al.* 1991, S. 19].

### 2.1.2 Seesalz

Seesalz-Partikel sind eine Mischung aus verschiedenen Salzen und Meereswasser. Sie gelangen durch Zerplatzen von Luftblasen oder durch Gischt in die Atmosphäre. Die WMO empfahl 1983 eine dreimodale Größenverteilung: Nukleation, Akkumulation und grobkörnig. Da sich der Nukleation-Modus aber sowohl aus Seesalz- als auch aus Sulfat-Anteilen zusammensetzt, er also nicht aus „reinem“ Seesalz besteht, wurde er in die wasserlösliche Komponente integriert [d'Almeida *et al.* 1991, S. 13].

### 2.1.3 Sulfat

Die beiden Sulfat-Komponenten bildet sich durch Gas-Partikel-Umwandlung aus gasförmigen Schwefelverbindungen. Als Quelle kommen hier überwiegend natürliche (biologische, vulkanische) Prozesse in Frage. Bei 0 % relativer Luftfeuchtigkeit bestehen sie aus 75-prozentiger Schwefelsäure. Diese Sulfat-Partikel bilden den überwiegenden Anteil der Aerosol-Typen der Antarktis und des stratosphärischen Hintergrunds.

### 2.1.4 Unlöslich

Diese Komponente beschreibt Erd- und Staubpartikel, welche in mittleren Breiten, außerhalb von Wüstengebieten, durch Wind aufgewirbelt werden. Sie enthält darüber

hinaus wasserunlösliche organische Bestandteile, welche keiner anderen Komponente zuzuordnen sind.

### 2.1.5 Ruß

Rußpartikel zeichnen sich durch ihre hohe Absorptionfähigkeit aus. Sie bestehen meist aus reinem Kohlenstoff, der allerdings je nach Art des Verbrennungsprozesses, der zu seiner Entstehung geführt hat, sehr unterschiedliche optische Eigenschaften besitzen kann. Gemäß dem Konzept der internen und externen Mischung der Komponenten wird die Ruß-Komponente als nicht mit hygroskopischen Partikeln gemischt angenommen. Sie kommt zu großen Anteilen in urbanen, kontinentalen und arktischen Aerosol-Typen vor.

Der direkte menschliche Eintrag durch Verbrennung fossiler Brennstoffe wird auf etwa 10-90 Tonnen/Jahr geschätzt [d'Almeida *et al.* 1991, S. 15]. Der in den letzten Jahre vermehrt ins Bewußtsein gelangte Eintrag durch große Waldbrände („biomass burning“) wird mit etwa 200-450 Tonnen/Jahr veranschlagt. Da sich der natürliche und anthropogene Einfluß auf die Ursachen dieser Brände nur schwer trennen läßt, kann auch keine genaue Abschätzung des anthropogenen Anteils am Gesamteintrag dieser Komponente gegeben werden. Er ist jedoch von erheblicher Größenordnung [Jaenicke 1993, S. 8].

### 2.1.6 Mineralisch

Die mineralischen Aerosol-Komponenten, hauptsächlich bestehend aus Quarzsand und Tonerde, stellen den größten Anteil der nichtlöslichen, nichtanthropogenen Partikel dar. Schon aufgrund der sehr großen trockenen Gebiete, die sich auf ca. ein Drittel der Landoberfläche ausdehnen, wird klar, daß bei entsprechend starken Winden große Mengen an Wüsten-Aerosol in die Atmosphäre befördert werden.

Insbesondere kommt es regelmäßig vor, daß diese mineralischen Aerosole entlang der globalen Zirkulationsströme über weite Strecken transportiert werden. So kann z. B. Sahara-Staub im südamerikanischen Regenwald nachgewiesen werden und hat dort durch Düngung einen nicht zu vernachlässigenden ökologischen Nutzen [George 1995]. In der Nähe der Quellgebiete wird der Wüstenstaub durch drei Moden beschrieben: Nukleation, Akkumulation und grobkörnig. Bei größeren Entfernungen kann eine spezielle „mineralisch transportierte“ Aerosol-Komponente verwendet werden. Ihre Größenverteilung berücksichtigt die verringerte Anzahl größerer Partikel, welche mit der Zeit ausgefallen sind [Schutz *et al.* 1990, Shaw 1980].

### 2.1.7 Vulkanische Asche

Vulkanausbrüche können erhebliche Mengen Materie ( $\text{SO}_2$ , weitere Gase und Asche) in die obere Troposphäre und die Stratosphäre einbringen. Diese „frische vulkanische Asche“, bestehend aus Silikaten und Metalloxiden, kann eine starke Erhöhung der

Aerosolextinktion bewirken. Bei der optischen Dicke dieses Höhenbereichs von ca. 12 km bis 30 km kann der Hintergrundwert von ca. 0,0015 bis auf das 40-fache ansteigen. Da die Aschepartikel nach ca. 1 bis 8 Jahr ausfallen, sind dann wieder relativ konstante Hintergrundbedingungen zu beobachten. Extreme Beispiele der letzten Zeit sind: *El Chichón* (1982) mit etwa 20 Megatonnen, und *Pinatubo* (1991) mit etwa 30 bis 40 Megatonnen ausgestoßener Materie. Das  $\text{SO}_2$  gilt als Hauptquelle der Sulfat-Komponente, welche den stratosphärischen Hintergrund-Aerosol-Typ darstellt [McCormick *et al.* 1993].

### 2.1.8 Meteoriten-Staub

Oberhalb der Stratosphäre befinden sich überwiegend meteoritische Staubpartikel. Sie werden durch Meteoritenstürme hauptsächlich in den Polarregionen in die Atmosphäre getragen, und bestehen meist aus Eisen, anderen Metallen und Silizium. Mit einer relativ geringen Eintragsmenge von etwa 10 Tonnen/Jahr spielen sie keine bedeutende Rolle [d'Almeida *et al.* 1991].

## 2.2 Die Größenverteilung

Jede der 12 Aerosol-Komponenten zeichnet sich durch eine für sie charakteristische Größenverteilung aus. Sie ist in Richtung großer Teilchenradien entweder durch den Entstehungsprozeß selbst oder durch das zu schnelle Ausfallen der großen (schweren) Partikel limitiert. Eine hohe Konzentration sehr kleiner Teilchen (mit wenigen Molekülen) wird durch die in diesem Fall große Teilchengeschwindigkeit aufgrund der Brownschen Molekularbewegung verhindert. Die Wahrscheinlichkeit für Stöße mit anderen Aerosolpartikeln ist für die kleinen Teilchen extrem hoch. In der Regel koagulieren sie bei diesen Stößen, und gehen in größere Partikel auf.

Es gibt einige historisch gewachsene Bezeichnungen zur groben Einteilung von Aerosolen in „Größenklassen“ (Moden). In dieser Arbeit wird, unter Angabe der Radien, folgende Einteilung verwendet:

Nukleationsmodus	(nucleation mode):	0,001	bis	0,1	$\mu\text{m}$
Akkumulationsmodus	(accumulation mode):	0,1	bis	1,0	$\mu\text{m}$
Grobkörniger Modus	(coarse mode):			> 1	$\mu\text{m}$

Als Parametrisierung der Größenverteilung kommt eine Log-Normalverteilung nach [Davies 1974] zum Einsatz. Er zeigte, daß sich die meisten gemessenen Größenspektren von Aerosolen durch die Überlagerung mehrerer solcher Verteilungen beschreiben lassen. Die Log-Normalverteilung ist folgendermaßen definiert:

$$n(r) = \frac{dN(r)}{d \log r} = \frac{N}{\sqrt{2\pi} \log \sigma} \exp \left[ -\frac{1}{2} \left( \frac{\log(r/r_M)}{\log \sigma} \right)^2 \right] \quad 0 < r < \infty \quad (2.1)$$

mit:

- $N$  Gesamtteilchenzahldichte
- $\sigma$  (dimensionslose) Standardabweichung
- $r_M$  Modenradius

Die Größe  $n(r)$  entspricht der Teilchendichte im Intervall  $[\log r, \log(r + dr)]$ . Üblicherweise wird die Größenverteilungen so normiert, daß eine Integration über die Verteilung genau 1 Partikel/cm<sup>3</sup> ergibt. Um reale Meßwerte hierauf anwenden zu können, und aus numerischen Gründen, bewegt sich der Radius natürlich nicht zwischen 0 und  $\infty$ , sondern es werden als Integrationsgrenzen die Eckwerte  $r_{min}$  und  $r_{max}$  eingesetzt.

Insgesamt sind also 5 Parameter erforderlich, um die Größenverhältnisse einer Komponente eindeutig festzulegen: Modenradius  $r_M$ , Standardabweichung  $\sigma$ , Gesamtteilchenzahldichte  $N$  und die untere ( $r_{min}$ ) und obere ( $r_{max}$ ) Integrationsgrenze. Sie sind in Tabellenform in Anhang A.1 zu finden.

Die beiden Abbildungen 2.2 und 2.3 auf Seite 15 geben einen Überblick über die Größenverteilungen der 12 *SCIATRAN* Aerosol-Komponenten. Ab Seite 60 befinden sich im Anhang B.1 weitere Abbildungen der Verteilungen. Insbesondere sind dort auch die restlichen 3 hygroskopischen Aerosol-Komponenten Seesalz (Akkumulation und grobkörniger Modus) und Sulfat mit ihren jeweils 8 Größenverteilungen zu finden.

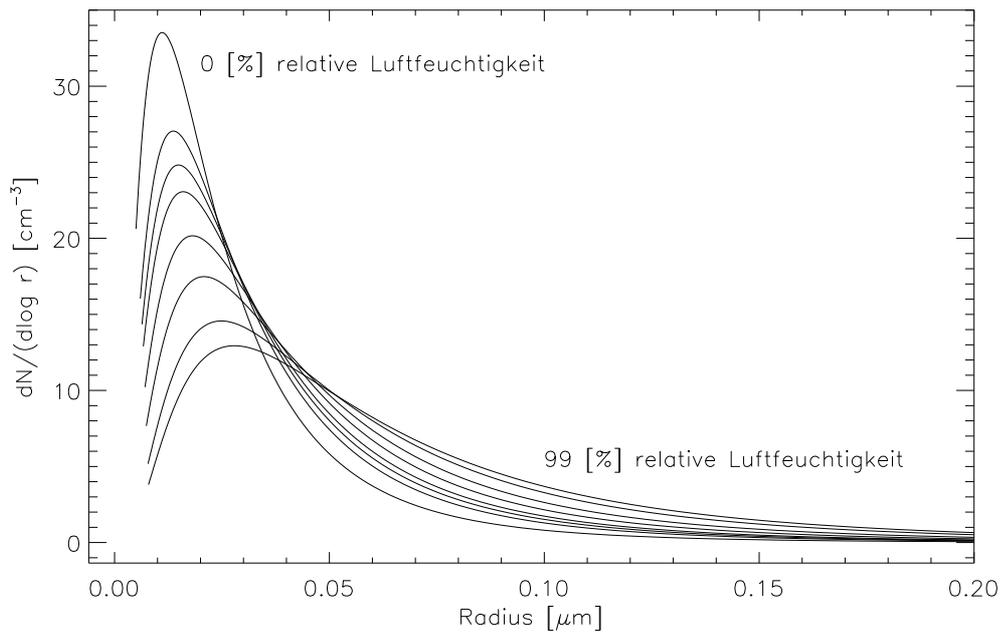
Die Berücksichtigung der unterschiedlichen relativen Luftfeuchtigkeit:

Da, wie die rechte Spalte in Tabelle 2.1 schon andeutet, einige Aerosol-Komponenten Wasser aufnehmen können, muß die damit einhergehende Vergrößerung der Modenradien berücksichtigt werden. Dieser hygroskopische Prozeß verändert auch die Form der Verteilung. Sie wird breiter und es zeigt sich eine Asymmetrie in Richtung größerer Teilchen, da diese schneller wachsen als kleine Teilchen.

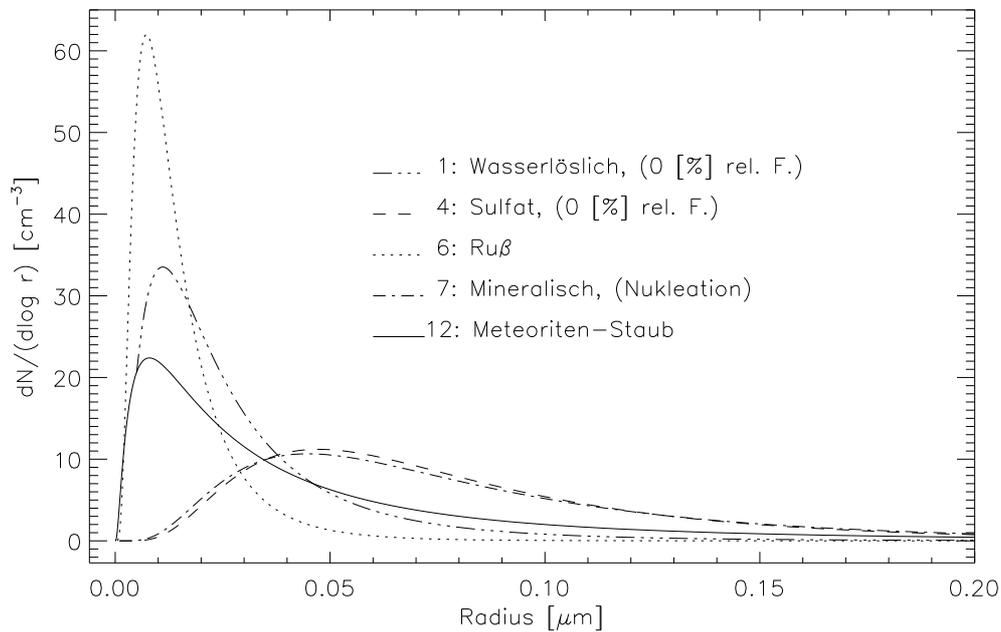
Die Modellierung dieses Effekts wird in der hier vorgestellten *SCIATRAN*-Aerosol-Parametrisierung wie in der *OPAC*-Modellierung mit einem Programm nach [Hänel und Zankl 1979] erreicht. Dabei steigt der Modenradius  $r_M$  und die Integrationsgrenzen  $r_{min}$  und  $r_{max}$  mit steigender relativer Luftfeuchtigkeit. Die Standardabweichung wird dagegen konstant gehalten. Wenn die chemische Zusammensetzung und der Trocken-Radius der Partikel bekannt sind, kann der hygroskopische Radius errechnet werden (siehe auch: [WMO 1983, Kapitel 4.2.3, Seite 20]).

Es wurden 8 Werte für die relative Luftfeuchtigkeit berücksichtigt: 0, 50, 70, 80, 90, 95, 98 und 99 %. Genaugenommen kommt man hiermit auf 40 *SCIATRAN* Aerosol-Komponenten: 32 hygroskopische und 8 nichthygroskopische. In Abbildung 2.1 auf Seite 14 sind als Beispiel die 8 Größenverteilungen der wasserlöslichen Aerosol-Komponente dargestellt. In den Tabellen A.1 bis A.1 (ab Seite 52) ist zu erkennen, daß durch die hygroskopische Eigenschaft einiger Aerosol-Komponenten die obere Integrationsgrenze der Größenverteilung in dieser Arbeit bis auf einen Wert von annähernd 100  $\mu\text{m}$ , also fast 0,1 mm, ansteigen kann. Dieser Wert wird in der Realität zwar

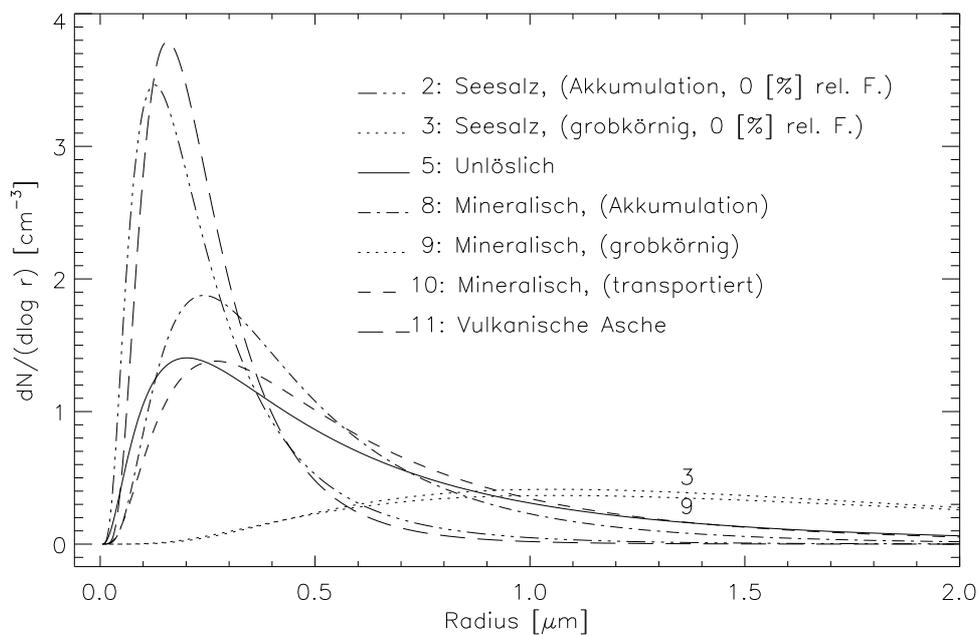
nicht besonders oft erreicht, doch ist er durchaus möglich. Insbesondere die beiden Seesalz-Aerosol-Komponenten können diese Größe erreichen (Tabelle A.2 und A.3).



**Abbildung 2.1:** Die Größenverteilungen der wasserlöslichen Aerosol-Komponente in Abhängigkeit der relativen Luftfeuchtigkeit. Dargestellt wird die Größenverteilung für 8 Feuchtigkeits-Werte: 0, 50, 70, 80, 90, 95, 98 und 99 Prozent.



**Abbildung 2.2:** Die Größenverteilung der „kleineren“ Aerosol-Komponenten mit den Nummern: 1, 4, 6, 7 und 12. (rel. F.=relative Luftfeuchtigkeit)



**Abbildung 2.3:** Die Größenverteilung der „größeren“ Aerosol-Komponenten mit den Nummern: 2, 3, 5, 8, 9, 10 und 11. (rel. F.=relative Luftfeuchtigkeit)

## 2.3 Der Brechungsindex

Der komplexe Brechungsindex spiegelt die chemische Beschaffenheit der Aerosol-Komponenten wieder. Im ultravioletten bis nahinfraroten Spektralbereich, genauer 200 bis 2500 nm, liegt der Realteil typischerweise zwischen 1,15 bis 1,55, und der Imaginärteil zwischen  $-10^{-9}$  bis  $-0,51$ . Der hohe negative Imaginärteil gilt für die stark absorbierende Ruß-Komponente. Die anderen Komponenten weisen in der Regel Werte bis ca.  $-0,03$  auf. Im spektralen Verlauf des komplexen Brechungsindex können keine besonderen Strukturen entdeckt werden (d. h. es treten keine „Peaks“ auf). Hingegen sind bei der OPAC-Modellierung, im Wellenlängenbereich zwischen 2,5 und 40  $\mu\text{m}$  erhebliche Schwankungen sowohl im Real- als auch im Imaginärteil zu erkennen [Koepeke *et al.* 1997, S. 37].

Die Aufnahme von Wasser bei hygroskopischen Aerosol-Komponenten verändert nicht nur die Größenverteilung sondern auch den Brechungsindex. Unter der Annahme, daß das Wasser sich homogen im Partikel verteilt, kann mit einer einfachen Volumenmischungsformel ein neuer mittlerer komplexer Brechungsindex abgeschätzt werden [d’Almeida *et al.* 1991, S. 117]:

$$n = n_w + (n_0 - n_w) \left( \frac{r_{M0}}{r_M} \right)^3 \quad (2.2)$$

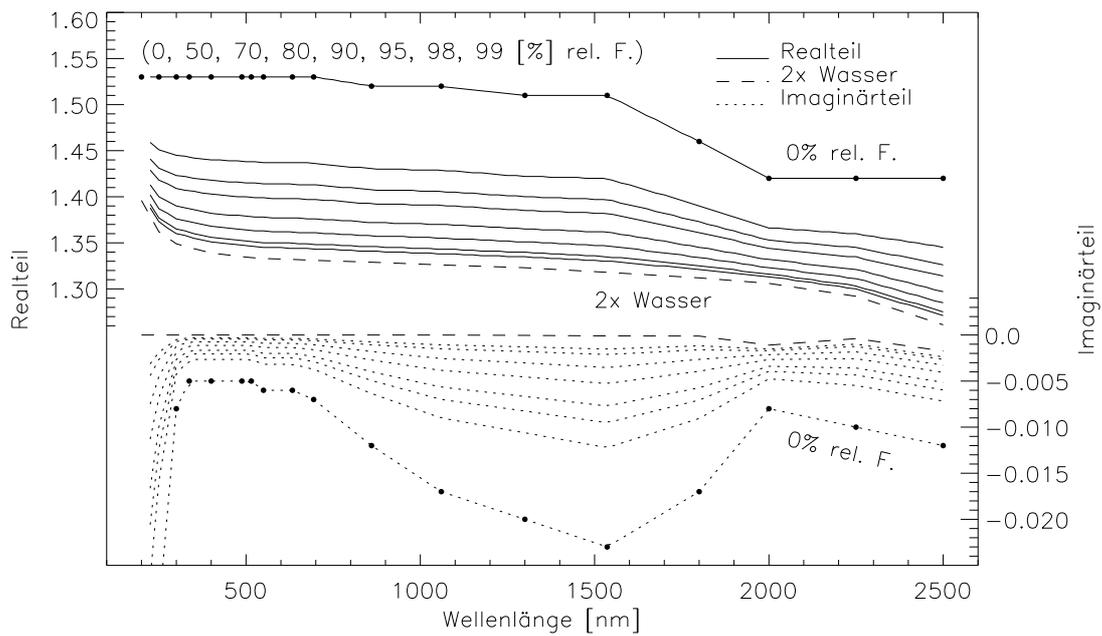
mit:

- $n_w$  Brechungsindex von Wasser
- $n_0$  Brechungsindex der trockenen Komponente
- $r_{M0}$  Modenradius der trockenen Komponente
- $r_M$  Modenradius der feuchten Komponente

Für Aerosol-Komponenten mit verschiedenen Moden, z. B. Seesalz Akkumulations-Modus und grobkörniger Modus, wird von einem unveränderten Brechungsindex ausgegangen. Allerdings ist schon bei Betrachtung des spektralen Verlaufs des Brechungsindex sofort zu erkennen, daß dort erhebliche Fehler enthalten sein dürften. So sind z. B. bei der wasserlöslichen und der mineralischen Aerosol-Komponente über sehr große Wellenlängenintervalle hinweg linear interpolierte konstante Bereiche zu erkennen. Es sei nochmals darauf hingewiesen, daß es sich bei den Aerosol-Komponenten zum einen um eine (interne) Mischung verschiedener Substanzen, zum anderen um eine Mittelung vieler Einzelmessungen handelt. So treten bei den Meßwerten des Imaginärteils des Brechungsindex der wichtigen Ruß-Komponente Abweichungen von bis zu 300 % auf. Allein die Meßmethoden, die bei der Messung des Brechungsindex der Komponenteninhaltsstoffe verwendet werden, können für Abweichungen von bis zu 100 % verantwortlich gemacht werden [d’Almeida *et al.* 1991, S. 22].

Um eine möglichst übersichtliche Gestaltung der Abbildungen zu erreichen, wird in Abbildung 2.4 als Beispiel nur der Brechungsindex der wasserlöslichen Aerosol-

Komponente, des Wassers und deren Mischung dargestellt. Alle anderen Brechungsindizes werden in Anhang B.2 zusammen mit den aus der Mie-Rechnung resultierenden optischen Eigenschaften der Aerosol-Komponenten abgebildet.



**Abbildung 2.4:** Die Brechungsindizes der wasserlöslichen Aerosol-Komponente, des Wassers und deren Mischung, (rel. F.=relative Luftfeuchtigkeit).

# Kapitel 3

## Mie-Theorie

Zur vollständigen Beschreibung der Streu- und Absorptionseigenschaften der Aerosol-Komponenten sind die folgenden Größen als Funktion der Wellenlänge  $\lambda$  notwendig: *Extinktionskoeffizient*  $\sigma_s(\lambda)$ , *Streukoeffizient*  $\sigma_e(\lambda)$  und die *Phasenfunktion*  $p(\lambda, \theta)$  mit  $\theta$  als Streuwinkel. Der *Absorptionskoeffizient* ergibt sich nach:  $\sigma_a = \sigma_e - \sigma_s$ . Diese Größen können mittels der Mie-Theorie berechnet werden. Als Eingangsgrößen werden nur der komplexe Brechungsindex und die Größenverteilung des Partikels benötigt.

Die Mie-Theorie beschreibt mittels der klassischen Elektrodynamik die Wechselwirkung einer elektromagnetischen Welle mit einem kugelförmigen Teilchen. Sie stellt eine exakte Lösung der Maxwell-Gleichungen dar. Als Voraussetzung müssen hierfür folgende grundlegenden Annahmen getroffen werden:

1. Das streuende Teilchen ist sphärisch.
2. Innerhalb des Teilchens ist der komplexe Brechungsindex  $N$  homogen.

Bereits 1908 wurde die nach *Gustav Mie* benannte Theorie entwickelt, doch erst rechenstarke Computer ermöglichten ihren konkreten Einsatz [Mie 1908].

Die Herleitung der wichtigsten Punkte der Mie-Theorie kann in vielen Lehrbüchern und Artikeln gefunden werden, die folgende Betrachtungen orientieren sich überwiegend an diesen Quellen: [Bohren und Huffman 1983], [vdH 1981], [Hoogen 1995b], [Liou 1980] und [Wiscombe 1979].

### 3.1 Allgemeine Formulierung des Problems

#### 3.1.1 Die Maxwell-Gleichungen

In SI-Einheiten werden die Maxwell-Gleichungen in folgender Form geschrieben:

$$\nabla \cdot \mathbf{D} = \rho, \quad \nabla \cdot \mathbf{B} = 0, \quad (3.1a)$$

$$\nabla \times \mathbf{E} + \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} = 0, \quad \nabla \times \mathbf{H} = \mathbf{J} + \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t}. \quad (3.1b)$$

Hierbei ist  $\mathbf{E}$  die *elektrische Feldstärke* und  $\mathbf{B}$  die *magnetische Induktion*. Die *dielektrische Verschiebung*  $\mathbf{D}$  und die *magnetische Feldstärke*  $\mathbf{H}$  werden durch die *Polarisation*  $\mathbf{P}$  und die *Magnetisierung*  $\mathbf{M}$  des Mediums definiert:

$$\mathbf{D} = \epsilon_0 \mathbf{E} + \mathbf{P}, \quad \mathbf{H} = \frac{\mathbf{B}}{\mu_0} - \mathbf{M}.$$

Außerhalb des Mediums, also im Vakuum, sind  $\mathbf{P}$  und  $\mathbf{M}$  Null. Dies gilt auch für die mit freien Ladungsträgern verbundenen Größen  $\rho$  (*Ladungsdichte*) und  $\mathbf{J}$  (*Stromdichte*). Die Konstante  $\epsilon_0$  heißt *Dielektrizitätskonstante des Vakuums* und  $\mu_0$  ist die *magnetische Feldkonstante*.

Zusätzlich zu den Maxwell-Gleichungen werden die folgenden Verknüpfungsgleichungen mit den Materialparametern  $\sigma$  (*Leitfähigkeit*),  $\mu$  (*Permeabilität*) und  $\chi$  (*Suszeptibilität*) benötigt:

$$\mathbf{J} = \sigma \mathbf{E}, \quad (3.2a)$$

$$\mathbf{B} = \mu \mathbf{H}, \quad (3.2b)$$

$$\mathbf{P} = \epsilon_0 \chi \mathbf{E}. \quad (3.2c)$$

Im folgenden wird angenommen, daß  $\sigma$ ,  $\mu$  und  $\chi$  unabhängig von den Feldstärken, der Position und der Richtung des Mediums sind. Das Medium soll also: *linear*, *homogen* und *isotrop* sein. Die Materialparameter können sich aber mit der Frequenz ändern. Bei der Herleitung der Mie-Theorie genügt es, sich auf einfallende planparallele, harmonische Felder zu beschränken. Beliebige Felder lassen sich in Fourier-Komponenten zerlegen, welche wiederum planparallele Wellen darstellen. Durch Superposition der Einzellösungen kann hiermit eine Lösung des generellen Problems herbeigeführt werden.

Wenn das Feld innerhalb des Teilchens mit  $\mathbf{E}_1$  und  $\mathbf{H}_1$  bezeichnet wird, ergibt sich das äußere Feld ( $\mathbf{E}_2, \mathbf{H}_2$ ) als Superposition des einfallenden ( $\mathbf{E}_i, \mathbf{H}_i$ ) mit dem gestreuten Feld ( $\mathbf{E}_s, \mathbf{H}_s$ ):

$$\mathbf{E}_2 = \mathbf{E}_i + \mathbf{E}_s, \quad \mathbf{H}_2 = \mathbf{H}_i + \mathbf{H}_s,$$

mit:

$$\mathbf{E}_i = \mathbf{E}_0 \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x} - i\omega t), \quad \mathbf{H}_i = \mathbf{H}_0 \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x} - i\omega t). \quad (3.3)$$

$\mathbf{k}$  ist der Wellenvektor im das Teilchen umgebenden Medium.

Unter der Annahme  $\mathbf{J} = 0$  und  $\rho = 0$ , und der Abkürzung  $\epsilon = \epsilon_0(1 + \chi)$  kann man zeigen, daß die Maxwell-Gleichungen in folgender Form geschrieben werden können:

$$\nabla \cdot \mathbf{E} = 0, \quad \nabla \cdot \mathbf{H} = 0, \quad (3.4a)$$

$$\nabla \times \mathbf{E} = i\omega\mu\mathbf{H}, \quad \nabla \times \mathbf{H} = -i\omega\epsilon\mathbf{E}. \quad (3.4b)$$

Mittels Rotationsbildung der Gleichungen (3.4b), der Vektoridentität:

$$\nabla \times (\nabla \times \mathbf{A}) = \nabla(\nabla \cdot \mathbf{A}) - \nabla \cdot (\nabla \mathbf{A})$$

und Verwendung der Gleichungen (3.4a) können die Vektor-Wellengleichungen abgeleitet werden:

$$\nabla^2 \mathbf{E} + k^2 \mathbf{E} = 0, \quad \nabla^2 \mathbf{H} + k^2 \mathbf{H} = 0, \quad (3.5)$$

mit:

$$k^2 = \mathbf{k}^2 = \omega^2 \varepsilon \mu. \quad (3.6)$$

Der komplexen Wellenvektor  $\mathbf{k}$  besteht aus den reellen Vektoren  $\mathbf{k}'$  und  $\mathbf{k}''$ :

$$\mathbf{k} = \mathbf{k}' + i\mathbf{k}''.$$

### 3.1.2 Der komplexe Brechungsindex

Mit nichtnegativen  $k'$  und  $k''$ , und  $\hat{\mathbf{e}}$  als Einheitsvektor in Ausbreitungsrichtung, läßt sich der Wellenvektor einer homogene Welle auch in dieser Form schreiben:

$$\mathbf{k} = (k' + ik'')\hat{\mathbf{e}}.$$

Nach Gleichung (3.6) folgt:

$$k = k' + ik'' = \frac{\omega N}{c_0},$$

mit der Lichtgeschwindigkeit im Vakuum  $c_0$ , und dem komplexen Brechungsindex  $N$ :

$$N = n_r + in_i = c_0 \sqrt{\varepsilon \mu} = \sqrt{\frac{\varepsilon \mu}{\varepsilon_0 \mu_0}}.$$

Nach Gleichung (3.3) und der Definition der Wellenzahl  $k = \omega/c_0 = 2\pi/\lambda$  im Vakuum, ergibt dies für eine sich in Richtung  $z$  ausbreitende homogene Welle:

$$\mathbf{E} = \mathbf{E}_0 \exp\left(-\frac{2\pi n_i z}{\lambda}\right) \exp\left(\frac{i2\pi n_r z}{\lambda} - i\omega t\right).$$

Offensichtlich führt ein  $n_i \neq 0$  zu einem exponentiellen Abfall der Amplitude von  $\mathbf{E}$ . Nach [Bohren und Huffman 1983, S. 28] führt dies auch zu einer Abnahme der Strahlungsflußdichte  $I$ , da sie mit  $I = \frac{k}{2\omega\mu} \mathbf{E}^2$  proportional zu  $\mathbf{E}^2$  ist. Der Absorptionskoeffizient  $\alpha$  eines Mediums ist also mit dem Imaginärteil des Brechungsindex verbunden:

$$\alpha = \frac{4\pi n_i}{\lambda}.$$

Also:

$$I = I_0 \exp(-\alpha z).$$

Die Phasengeschwindigkeit  $c$  der elektromagnetischen Welle innerhalb des Mediums wird durch  $|\mathbf{k}'|$  festgelegt, also durch den Realteil des Brechungsindex:

$$c = \frac{\omega}{|\mathbf{k}'|} = \frac{c_0}{n_r}.$$

### 3.1.3 Randbedingungen

Am Rand zwischen Partikel und umgebenden Medium haben  $\epsilon$  und  $\mu$  eine Unstetigkeit, dort muß das Feld folgende *Randbedingungen* erfüllen:

$$\begin{aligned} [\mathbf{E}_2(\mathbf{x}) - \mathbf{E}_1(\mathbf{x})] \times \hat{\mathbf{n}} &= 0, \\ [\mathbf{H}_2(\mathbf{x}) - \mathbf{H}_1(\mathbf{x})] \times \hat{\mathbf{n}} &= 0. \end{aligned} \quad (3.7)$$

Darin ist  $\hat{\mathbf{n}}$  der nach außen gerichtete Normalenvektor der Partikeloberfläche des Oberflächenpunktes  $\mathbf{x}$ .

### 3.1.4 Stokes Parameter

Die *Stokes Parameter*  $I, Q, U, V$  sind eine Möglichkeit die Polarisation von Licht zu beschreiben. Eine beliebige monochromatische Welle kann als Superposition von zwei *orthogonalen* Komponenten dargestellt werden, z. B. horizontal und vertikal, rechts und links zirkular, u. s. w. Hier werden zwei orthogonale Achsen  $\hat{\mathbf{e}}_{\parallel}$  und  $\hat{\mathbf{e}}_{-}$  definiert, welche wiederum beide orthogonal zur Ausbreitungsrichtung  $\hat{\mathbf{e}}_z$  sind. Das elektrische Feld kann nun als Superposition einer „horizontalen“ und einer „vertikalen“ Komponente dargestellt werden:

$$\mathbf{E} = \mathbf{E}_0 \exp(ikz - i\omega t), \quad \mathbf{E}_0 = E_{\parallel} \hat{\mathbf{e}}_{\parallel} + E_{-} \hat{\mathbf{e}}_{-}.$$

Hierbei sind  $E_{\parallel}$  und  $E_{-}$  zeitunabhängige komplexe Zahlen mit Amplituden- und Phaseninformation. Die Stokes Parameter werden dann wie folgt definiert:

$$I = E_{\parallel} E_{\parallel}^* + E_{-} E_{-}^* \quad (3.8a)$$

$$Q = E_{\parallel} E_{\parallel}^* - E_{-} E_{-}^* \quad (3.8b)$$

$$U = E_{\parallel} E_{-}^* + E_{-} E_{\parallel}^* \quad (3.8c)$$

$$V = i(E_{\parallel} E_{-}^* - E_{-} E_{\parallel}^*) \quad (3.8d)$$

Die Parameter  $I, Q, U$  und  $V$  sind reelle Zahlen und korrespondieren zu meßbaren Strahlungsflußdichten. Sie erfüllen folgende Gleichung:

$$I^2 = Q^2 + U^2 + V^2. \quad (3.9)$$

Abhängig von der Wahl von  $\hat{\mathbf{e}}_{\parallel}$  und  $\hat{\mathbf{e}}_{-}$  enthalten  $Q$  und  $U$  Informationen zum Umfang und zur Richtung der linearen Polarisation. Unabhängig von der Wahl dieser Basisvektoren enthält  $I$  die Stärke der Intensität und  $V$  beschreibt die zirkulare Polarisation. Wenn  $E_{\parallel}(t)$  und  $E_{-}(t)$  vollständig korreliert sind, sie also eine zeitlich konstante Phasenbeziehung aufweisen, ist das Licht *polarisiert*. Sind die beiden Komponenten jedoch nur teilweise beziehungsweise überhaupt nicht zeitlich korreliert, so spricht man von *teilweise polarisiertem* beziehungsweise *unpolarisiertem* Licht. Gleichung (3.9) ist nur für polarisiertes Licht richtig, für vollständig unpolarisiertes Licht verschwindet die rechte Seite, genauer:  $Q = U = V = 0$ . Dies führt zu weiteren Definitionen:

$$\text{Polarisationsgrad:} \quad \sqrt{Q^2 + U^2 + V^2}/I$$

$$\text{Linearer Polarisationsgrad:} \quad \sqrt{Q^2 + U^2}/I$$

$$\text{Zirkularer Polarisationsgrad:} \quad V/I$$

Es gibt noch eine alternative Definition der Stokes Parameter. In ihr werden an Stelle von  $I$  und  $Q$  ((3.8a) und (3.8b)) diese beiden Parameter definiert:

$$I_{\parallel} = E_{\parallel} E_{\parallel}^*$$

$$I_{\perp} = E_{\perp} E_{\perp}^*$$

Der vollständige Parametersatz lautet hiermit also:  $(I_{\parallel}, I_{\perp}, U, V)$ .

### 3.1.5 Amplituden-Streumatrix

Betrachtet wird ein beliebiges Teilchen, welches von einer planparallelen harmonischen Welle bestrahlt wird. Die *Streuebene* wird durch die Ausbreitungsrichtung der einlaufenden ( $\hat{\mathbf{e}}_z$ ) und der gestreuten ( $\hat{\mathbf{e}}_r$ ) Welle definiert. Das einfallende elektrische Feld  $\mathbf{E}_i$ , welches in der  $xy$ -Ebene liegt, kann in zwei Komponenten zerlegt werden.  $\mathbf{E}_{\parallel i}$  liegt parallel und  $\mathbf{E}_{\perp i}$  liegt senkrecht zur *Streuebene*:

$$\mathbf{E}_i = (E_{0\parallel} \hat{\mathbf{e}}_{\parallel i} + E_{0\perp} \hat{\mathbf{e}}_{\perp i}) \exp(ikz - i\omega t) = E_{\parallel i} \hat{\mathbf{e}}_{\parallel i} + E_{\perp i} \hat{\mathbf{e}}_{\perp i}.$$

Analog dazu kann das gestreute Feld  $\mathbf{E}_s$  ebenfalls als eine Superposition zweier Komponenten (senkrecht und parallel zur Streuebene) aufgebaut werden:

$$\mathbf{E}_s = E_{\parallel s} \hat{\mathbf{e}}_{\parallel s} + E_{\perp s} \hat{\mathbf{e}}_{\perp s}.$$

Zu beachten ist, daß  $\mathbf{E}_i$  und  $\mathbf{E}_s$  bezüglich verschiedener Basissystemen definiert wurden. Da die drei jeweils zueinandergehörenden Basisvektoren je ein Rechtssystem bilden, gilt:

$$\hat{\mathbf{e}}_{\perp i} \times \hat{\mathbf{e}}_{\parallel i} = \hat{\mathbf{e}}_z, \quad \hat{\mathbf{e}}_{\perp s} \times \hat{\mathbf{e}}_{\parallel s} = \hat{\mathbf{e}}_r.$$

In ausreichend großer Entfernung vom Partikel ( $kr \gg 1$ ), hat das gestreute elektrische Feld folgende asymptotische Form:

$$\mathbf{E}_s \sim \frac{e^{ikr}}{-ikr} \mathbf{A},$$

mit  $\hat{\mathbf{e}}_r \cdot \mathbf{A} = 0$ .

Die Amplitude des gestreuten Feldes, welche linear zur Amplitude des einfallenden Feldes ist, läßt sich in folgender Matrixform schreiben:

$$\begin{pmatrix} E_{\parallel s} \\ E_{\perp s} \end{pmatrix} = \frac{e^{ik(r-z)}}{-ikr} \begin{pmatrix} S_2 & S_3 \\ S_4 & S_1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} E_{\parallel i} \\ E_{\perp i} \end{pmatrix}. \quad (3.10)$$

Die Elemente  $S_j (j = 1, 2, 3, 4)$  der sogenannten *Amplituden-Streumatrix* sind im allgemeinen vom Streuwinkel  $\theta$  und Azimutwinkel  $\phi$  abhängig. Die komplexen Elemente der Amplituden-Streumatrix enthalten die volle Information über Amplitude und Phase des gestreuten Lichts. Wenn der streuende Partikel eine homogene Kugel ist, gilt:  $S_3 = S_4 = 0$ .

### 3.1.6 Streumatrix

Wie in Kapitel 3.1.4 angedeutet, bieten die Stokes-Parameter eine vorteilhafte Möglichkeit um Streuprobleme zu behandeln. Die sogenannte *Streumatrix* beschreibt den linearen Zusammenhang zwischen einlaufender und gestreuter Strahlung:

$$\begin{pmatrix} I_s \\ Q_s \\ U_s \\ V_s \end{pmatrix} = \frac{1}{k^2 r^2} \begin{pmatrix} S_{11} & S_{12} & S_{13} & S_{14} \\ S_{21} & S_{22} & S_{23} & S_{24} \\ S_{31} & S_{32} & S_{33} & S_{34} \\ S_{41} & S_{42} & S_{43} & S_{44} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} I_i \\ Q_i \\ U_i \\ V_i \end{pmatrix}. \quad (3.11)$$

Die Matrixelemente  $S_{ij} (i, j = 1, 2, 3, 4)$  sind Funktionen der Elemente  $S_j$  der *Amplituden-Streumatrix*. Sie können aus Gleichung (3.10) und der Definition der Stokes-Parameter ((3.8a) bis (3.8d)) hergeleitet werden [Bohren und Huffman 1983, S. 65].

Für eine Kugel reduziert sich Gleichung (3.11) zu:

$$\begin{pmatrix} I_s \\ Q_s \\ U_s \\ V_s \end{pmatrix} = \frac{1}{k^2 r^2} \begin{pmatrix} S_{11} & S_{12} & 0 & 0 \\ S_{12} & S_{11} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & S_{33} & S_{34} \\ 0 & 0 & -S_{34} & S_{33} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} I_i \\ Q_i \\ U_i \\ V_i \end{pmatrix}, \quad (3.12)$$

mit:

$$S_{11} = \frac{1}{2} (|S_2^2| + |S_1^2|),$$

$$S_{12} = \frac{1}{2} (|S_2^2| - |S_1^2|),$$

$$S_{33} = \text{Re}(S_1 S_2^*),$$

$$S_{34} = -\text{Im}(S_1 S_2^*).$$

Nur drei dieser Matrixelemente sind voneinander unabhängig, denn es gilt folgende Beziehung:

$$S_{11}^2 = S_{12}^2 + S_{33}^2 + S_{34}^2.$$

Die Stokes-Parameter in der alternativen Darstellung ( $I_{||}, I_{-}, U, V$ ) führen zu einer ähnlich einfachen Form der Streumatrix einer Kugel. In der hier angegebenen Notation nach [vdH 1981] ist der Faktor  $\frac{1}{k^2}$  Bestandteil der Matrixelemente:

$$\begin{pmatrix} I_{||s} \\ I_{-s} \\ U_s \\ V_s \end{pmatrix} = \frac{1}{r^2} \begin{pmatrix} M_2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & M_1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & S_{21} & -D_{21} \\ 0 & 0 & D_{21} & S_{21} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} I_{||i} \\ I_{-i} \\ U_i \\ V_i \end{pmatrix}, \quad (3.13)$$

mit:

$$\begin{aligned} M_1 &= \frac{1}{k^2} S_1 S_1^* \\ M_2 &= \frac{1}{k^2} S_2 S_2^* \\ S_{21} &= \frac{1}{k^2} \operatorname{Re}(S_1 S_2^*) \\ -D_{21} &= -\frac{1}{k^2} \operatorname{Im}(S_1 S_2^*) \end{aligned}$$

## 3.2 Streuung und Absorption an einer Kugel

Jedes in einem linearen, homogenen und isotropen Medium physikalisch realisierbare elektromagnetische Feld ( $\mathbf{E}$ ,  $\mathbf{H}$ ) muß die Vektor-Wellengleichungen (3.5) erfüllen, und zudem gemäß Gleichung (3.4a) divergenzfrei sein. Desweiteren sind  $\mathbf{E}$  und  $\mathbf{H}$  wegen (3.4b) nicht voneinander unabhängig.

### 3.2.1 Lösung der Vektor-Wellengleichungen

Wie [Bohren und Huffman 1983, ab S. 83] zeigen, besitzen die folgenden Vektor-Funktionen

$$\mathbf{M} = \nabla \times (\mathbf{c}\Psi), \quad \mathbf{N} = \frac{\nabla \times \mathbf{M}}{k}, \quad (3.14)$$

mit  $\Psi$  als *skalärer* Funktion und  $\mathbf{c}$  als beliebigem *konstanten* Vektor, alle benötigten Eigenschaften eines elektromagnetischen Felds:

- $\mathbf{M}$  und  $\mathbf{N}$  sind divergenzfrei.
- Die Rotation von  $\mathbf{M}$  ist proportional zu  $\mathbf{N}$ , und umgekehrt.
- $\mathbf{M}$  und  $\mathbf{N}$  erfüllen die *Vektor-Wellengleichungen*, wenn  $\Psi$  der *skalaren* Wellengleichung  $\nabla^2 \Psi + k^2 \Psi = 0$  genügt.

Also reduziert sich das Problem der Lösung der Feldgleichungen auf das einfacher zu lösende Problem der skalaren Wellengleichung.

Da hier die Streuung an einer Kugel bearbeitet wird, ist es von Vorteil, nach Funktionen  $\Psi$  zu suchen, welche die Wellengleichung in räumlichen Polarkoordinaten  $(r, \theta, \phi)$  erfüllen. Wenn der beliebige Vektor  $\mathbf{c}$  als der Radiusvektor gewählt wird, dann ist  $\mathbf{M} = \nabla \times (\mathbf{r}\Psi)$  eine Lösung der Vektor-Wellengleichungen in räumlichen Polarkoordinaten. Die skalare Wellengleichung hat in räumlichen Polarkoordinaten folgende Form:

$$\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial \Psi}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin \theta \frac{\partial \Psi}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial \phi^2} + k^2 \Psi = 0. \quad (3.15)$$

Die allgemeine Lösung von (3.15) erreicht man durch den Separationsansatz

$$\Psi(r, \theta, \phi) = R(r)\Theta(\theta)\Phi(\phi), \quad (3.16)$$

welcher in (3.15) eingesetzt zu drei separaten Gleichungen führt:

$$\frac{d^2\Phi}{d\phi^2} + m^2\Phi = 0 \quad (3.17a)$$

$$\frac{1}{\sin\theta} \frac{d}{d\theta} \left( \sin\theta \frac{d\Theta}{d\theta} \right) + \left[ n(n+1) - \frac{m^2}{\sin^2\theta} \right] \Theta = 0 \quad (3.17b)$$

$$\frac{d}{dr} \left( r^2 \frac{dR}{dr} \right) + [k^2 r^2 - n(n+1)]R = 0 \quad (3.17c)$$

Die Separationskonstanten  $m$  und  $n$  sind durch die von  $\Psi$  zu erfüllenden Nebenbedingungen festgelegt.

Unter der Voraussetzung, daß die Lösungen von (3.17a) periodische Funktionen von  $\phi$  sind, d. h.  $\lim_{\nu \rightarrow 2\pi} \Phi(\phi + \nu) = \Phi(\phi)$ , lauten die beiden linear unabhängigen Lösungen:

$$\Phi_e = \cos(m\phi), \quad \Phi_o = \sin(m\phi), \quad (3.18)$$

mit  $m$  als positiver natürlicher Zahl. Der Index  $e$  steht für „even“ (gerade) und der Index  $o$  steht für „odd“ (ungerade). Die Lösungen von (3.17b) sind die *zugeordneten Legendre-Polynome*  $P_n^m(\cos\theta)$ , mit  $n = m, m+1, \dots$ . Die linear unabhängigen Lösungen von (3.17c) sind die *sphärischen Bessel-Funktionen*:

$$j_n(\rho) = \sqrt{\frac{\pi}{2\rho}} J_{n+1/2}(\rho), \quad y_n(\rho) = \sqrt{\frac{\pi}{2\rho}} Y_{n+1/2}(\rho), \quad (3.19)$$

mit  $\rho = kr$ , und den *Bessel-Funktionen* erster und zweiter Art:  $J_{n+1/2}$  und  $Y_{n+1/2}$ . Jede Linearkombination von  $j_n$  und  $y_n$  ist ebenfalls Lösung von Gleichung (3.17c). Zwei solche Kombinationen, die *sphärischen Bessel-Funktionen* dritter Art, auch *sphärische Hankel-Funktionen* genannt, werde folgendermaßen definiert:

$$h_n^{(1)}(\rho) = j_n(\rho) + iy_n(\rho), \quad h_n^{(2)}(\rho) = j_n(\rho) - iy_n(\rho). \quad (3.20)$$

Unter Verwendung der Gleichungen (3.16) bis (3.20) können nun zwei linear unabhängige Lösungen der skalaren Wellengleichung (3.15) konstruiert werden:

$$\Psi_{emn} = \cos(m\phi) P_n^m(\cos\theta) z_n(kr), \quad (3.21a)$$

$$\Psi_{omn} = \sin(m\phi) P_n^m(\cos\theta) z_n(kr), \quad (3.21b)$$

hierbei ist  $z_n$  irgendeine der *sphärischen Bessel-Funktionen*  $j_n, y_n, h_n^{(1)}$  oder  $h_n^{(2)}$ . Aus Gleichung (3.21a) und (3.21b) können die *sphärischen Vektor-Wellenfunktionen* hergeleitet werden:

$$\begin{aligned} \mathbf{M}_{emn} &= \nabla \times (\mathbf{r}\Psi_{emn}), & \mathbf{M}_{omn} &= \nabla \times (\mathbf{r}\Psi_{omn}), \\ \mathbf{N}_{emn} &= \frac{\nabla \times \mathbf{M}_{emn}}{k}, & \mathbf{N}_{omn} &= \frac{\nabla \times \mathbf{M}_{omn}}{k}. \end{aligned}$$

Jede Lösung der Feldgleichungen kann nach diesen Funktionen entwickelt werden.

### 3.2.2 Entwicklung der Felder

Die einlaufende planparallele Welle breite sich in  $z$ -Richtung aus und sei in  $x$ -Richtung polarisiert. Dann läßt sie sich in räumlichen Polarkoordinaten folgendermaßen schreiben:

$$\mathbf{E}_i = E_0 e^{ikr \cos \theta} \hat{\mathbf{e}}_x,$$

mit:

$$\hat{\mathbf{e}}_x = \sin \theta \cos \phi \hat{\mathbf{e}}_r + \cos \theta \cos \phi \hat{\mathbf{e}}_\theta - \sin \phi \hat{\mathbf{e}}_\phi.$$

Die einlaufende Welle  $\mathbf{E}_i$  läßt sich, wie jede andere Lösung der Feldgleichungen auch, als Entwicklung von sphärischen Vektor-Wellenfunktionen darstellen:

$$\mathbf{E}_i = \sum_{m=0}^{\infty} \sum_{n=m}^{\infty} (B_{emn} \mathbf{M}_{emn} + B_{omn} \mathbf{M}_{omn} + A_{emn} \mathbf{N}_{emn} + A_{omn} \mathbf{N}_{omn}). \quad (3.22)$$

Dies reduziert sich unter Benutzung der Orthogonalitätsrelationen der sphärischen Vektor-Wellenfunktionen zu:

$$\mathbf{E}_i = \sum_{n=1}^{\infty} (B_{o1n} \mathbf{M}_{o1n}^{(1)} + A_{e1n} \mathbf{N}_{e1n}^{(1)}).$$

Der Index (1) soll die sphärischen Vektor-Wellenfunktionen bezeichnen, für welche die radiale Abhängigkeit von  $\Psi_{o1n}$  und  $\Psi_{e1n}$  durch  $j_n$  in Gleichung (3.19) beschrieben wird. Die sphärische Bessel-Funktion  $y_n$  wird verworfen, da sie im Ursprung gleich Null, die einlaufende Welle dort aber ungleich Null ist. Nach einer längeren Herleitung der Entwicklungskoeffizienten  $B_{o1n}$  und  $A_{e1n}$  führt dies zu folgender Entwicklung der planparallelen Welle in sphärische Vektor-Wellenfunktionen [Bohren und Huffman 1983, Kapitel 4.2]:

$$\mathbf{E}_i = \sum_{n=1}^{\infty} E_n (\mathbf{M}_{o1n}^{(1)} - i \mathbf{N}_{e1n}^{(1)}), \quad (3.23a)$$

$$\mathbf{H}_i = -\frac{k}{\omega \mu} \sum_{n=1}^{\infty} E_n (\mathbf{M}_{e1n}^{(1)} + i \mathbf{N}_{o1n}^{(1)}), \quad (3.23b)$$

mit  $E_n = i^n E_0 (2n+1)/n(n+1)$ . Das magnetische Feld erhält man nach Gleichung (3.4b) mittels Bildung der Rotation des elektrischen Feldes.

Auf ähnliche Weise lassen sich das gestreute Feld ( $\mathbf{E}_s, \mathbf{H}_s$ ) und das Feld innerhalb der Kugel ( $\mathbf{E}_1, \mathbf{H}_1$ ) entwickeln. Hierzu müssen unter anderem die Randbedingungen (3.7) auf der Oberfläche der Kugel und die Orthogonalität der sphärischen

Vektor-Wellenfunktionen berücksichtigt werden. Nach längerer Rechnung erhält man:

$$\mathbf{E}_1 = \sum_{n=1}^{\infty} E_n (c_n \mathbf{M}_{o1n}^{(1)} - id_n \mathbf{N}_{e1n}^{(1)}), \quad (3.24a)$$

$$\mathbf{H}_1 = -\frac{k_1}{\omega\mu_1} \sum_{n=1}^{\infty} E_n (d_n \mathbf{M}_{e1n}^{(1)} + ic_n \mathbf{N}_{o1n}^{(1)}), \quad (3.24b)$$

mit der Permeabilität  $\mu_1$  und der Wellenzahl  $k_1$ , jeweils innerhalb der Kugel. Die Entwicklungskoeffizienten:  $a_n, b_n, c_n$  und  $d_n$ , auch *Mie-Koeffizienten* genannt, werden in Kapitel 3.2.4 behandelt. Es kann gezeigt werden, daß die sphärische Hankel-Funktion  $h_n^{(1)}$  der einlaufenden, und  $h_n^{(2)}$  der auslaufenden Welle entspricht. Daher wird für das gestreute Feld nur  $h_n^{(2)}$  verwendet. Letzteres wird durch den Index (2) angedeutet, man erhält:

$$\mathbf{E}_s = \sum_{n=1}^{\infty} E_n (ia_n \mathbf{N}_{e1n}^{(2)} - b_n \mathbf{M}_{o1n}^{(2)}), \quad (3.25a)$$

$$\mathbf{H}_s = \frac{k}{\omega\mu} \sum_{n=1}^{\infty} E_n (ib_n \mathbf{N}_{o1n}^{(2)} + a_n \mathbf{M}_{e1n}^{(2)}). \quad (3.25b)$$

### 3.2.3 Winkelabhängige Funktionen

In den sphärischen Vektor-Wellenfunktionen  $\mathbf{M}_{e1n}, \mathbf{M}_{o1n}, \mathbf{N}_{e1n}$  und  $\mathbf{N}_{o1n}$  ist die azimutale Abhängigkeit durch  $\sin\phi$  und  $\cos\phi$  gegeben, die radiale Abhängigkeit wird durch die sphärischen Bessel-Funktionen bestimmt, und die „ $\theta$ -Abhängigkeit“ ist durch die Terme  $P_n^1(\cos\theta), P_n^1(\cos\theta)/\sin\theta$  und  $dP_n^1(\cos\theta)/d\theta$  gegeben. Die letzten beiden werden üblicherweise durch sogenannte „winkelabhängige Funktionen“  $\pi_n$  und  $\tau_n$  ersetzt:

$$\pi_n = \frac{P_n^1}{\sin\theta}, \quad \tau_n = \frac{dP_n^1}{d\theta}.$$

Beginnend mit  $\pi_0 = 0$  und  $\pi_1 = 1$  können sie folgendermaßen rekursiv berechnet werden:

$$\pi_n = \frac{2n-1}{n-1} \mu \pi_{n-1} - \frac{n}{n-1} \pi_{n-2},$$

$$\tau_n = n\mu\pi_n - (n+1)\pi_{n-1},$$

wobei  $\mu = \cos\theta$  ist.

### 3.2.4 Die Mie-Koeffizienten

Als nächstes müssen die komplexen *Mie-Koeffizienten*  $a_n$ ,  $b_n$ ,  $c_n$  und  $d_n$  hergeleitet werden. Um diese vier Unbekannten zu bestimmen, werden vier unabhängige Gleichungen benötigt. Hierfür eignen sich die Randbedingungen (3.7) in Komponentenform:

$$E_{i\theta} + E_{s\theta} = E_{1\theta}, \quad E_{i\phi} + E_{s\phi} = E_{1\phi}, \quad (3.26a)$$

$$H_{i\theta} + H_{s\theta} = H_{1\theta}, \quad H_{i\phi} + H_{s\phi} = H_{1\phi}. \quad (3.26b)$$

Unter Berechnung der  $\theta$ - und  $\phi$ -Komponenten des elektrischen und magnetischen Feldes und mittels der Gleichungen (3.14), sowie (3.23a) bis (3.25b) kann man nach einigen weiteren Schritten die beiden Mie-Koeffizienten  $a_n$  und  $b_n$  erhalten [Bohren und Huffman 1983, S. 100]:

$$a_n = \frac{m\Psi_n(mx)\Psi'_n(x) - \Psi_n(x)\Psi'_n(mx)}{m\Psi_n(mx)\xi'_n(x) - \xi_n(x)\Psi'_n(mx)}, \quad (3.27a)$$

$$b_n = \frac{\Psi_n(mx)\Psi'_n(x) - m\Psi_n(x)\Psi'_n(mx)}{\Psi_n(mx)\xi'_n(x) - m\xi_n(x)\Psi'_n(mx)}. \quad (3.27b)$$

In diesem Unterkapitel ist  $N$  der Brechungsindex, also:

$$x = \rho = kr = \frac{2\pi Nr}{\lambda} \quad \text{Mie-Größenparameter}$$

$$m = \frac{k_1}{k} = \frac{N_1}{N} \quad \text{relativer Brechungsindex}$$

$$\Psi_n(\rho) = \rho j_n(\rho)$$

Ricatti-Bessel-Funktionen

$$\xi_n(\rho) = \rho h_n^{(2)}(\rho)$$

Von zentraler Bedeutung ist hierbei der Mie-Größenparameter. In der Atmosphäre gilt in guter Näherung:  $N \approx 1$ , also in den meisten Fällen:

$$x = \frac{2\pi r}{\lambda},$$

$$m = N_1,$$

hierbei ist  $r$  der Partikelradius,  $\lambda$  die Wellenlänge des Lichts im Vakuum, und  $N_1$  der Brechungsindex des Partikels. Die Ricatti-Bessel-Funktionen mit Apostroph werden jeweils nach den Argument in Klammern abgeleitet. Wenn  $m$  gegen 1 geht, gehen  $a_n$  und  $b_n$  gegen Null, d. h. wenn das Teilchen verschwindet, verschwindet auch das gestreute Feld. Die Mie-Koeffizienten innerhalb des Teilchens ( $c_n, d_n$ ) können auf ähnliche Weise berechnet werden. Da sie in dieser Arbeit aber nicht von Interesse sind, werden sie hier nicht angegeben.

### 3.2.5 Ergebnisse der Mie-Rechnung

Der Streuquerschnitt ist definiert als das Verhältnis der pro Zeit in alle Richtungen gestreuten Energie  $W_s$  zur einfallenden Strahlungsflußdichte:

$$C_s = \frac{W_s}{I_i}.$$

$C_s$  hat die Dimension einer Fläche. Mit dem zeitlich gemittelten Poyntingvektor  $\mathbf{S}_s$  der gestreuten Strahlung,

$$\mathbf{S}_s = \frac{1}{2} \text{Re}(\mathbf{E}_s \times \mathbf{H}_s^*),$$

kann  $W_s$  im Abstand  $d$  bestimmt werden:

$$W_s = \int_A \mathbf{S}_s \cdot \hat{\mathbf{e}}_r dA = \frac{1}{2} \text{Re} \int_0^{2\pi} \int_0^\pi (E_{s\theta} H_{s\phi}^* - E_{s\phi} H_{s\theta}^*) d^2 \sin \theta d\theta d\phi.$$

Durch Einsetzung der Ausdrücke für die gestreuten Felder ( $E_s, H_s$  (3.25a) und (3.25b)) und unter Verwendung einiger Eigenschaften der Bessel-Funktionen, erhält man für den Streuquerschnitt [Bohren und Huffman 1983, Kapitel 4.4.1]:

$$C_s(r, m, \lambda) = \frac{W_s}{I_i} = \frac{2\pi}{k^2} \sum_{n=1}^{\infty} (2n+1) (|a_n|^2 + |b_n|^2). \quad (3.28)$$

Auf gleichem Weg kann der Extinktionsquerschnitt  $C_e$  berechnet werden:

$$C_e(r, m, \lambda) = \frac{W_e}{I_i} = \frac{2\pi}{k^2} \sum_{n=1}^{\infty} (2n+1) \text{Re} \{a_n + b_n\}. \quad (3.29)$$

Daraus folgt der Absorptionsquerschnitt:  $C_a = C_e - C_s$ .

Aus den Streu-, Extinktions- und Absorptionsquerschnitten erhält man die Wirkungsquerschnitte  $Q$  der Teilchen durch Normierung auf den geometrischen Querschnitt. Für sphärische Teilchen mit Radius  $r$  gilt also:

$$Q_s = \frac{C_s}{\pi r^2}, \quad Q_e = \frac{C_e}{\pi r^2}, \quad Q_a = \frac{C_a}{\pi r^2}. \quad (3.30)$$

Für nichtverschwindende Matrixelemente  $S_1$  und  $S_2$  der Amplituden-Streumatrix (3.10), die auch *Amplituden-Funktionen* genannt werden, erhält man mit  $\mu = \cos \theta$ :

$$S_1(x, m, \mu) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{2n+1}{n(n+1)} (a_n \pi_n + b_n \tau_n), \quad (3.31a)$$

$$S_2(x, m, \mu) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{2n+1}{n(n+1)} (a_n \tau_n + b_n \pi_n). \quad (3.31b)$$

Die Abhängigkeiten der Amplituden-Funktionen vom Streuwinkel sind durch  $\pi(\mu)$  und  $\tau(\mu)$  gegeben, wohingegen die die Mie-Koeffizienten  $a_n$  und  $b_n$  Funktionen des Mie-Größenparameter  $x$  und des Brechungsindex  $m$  sind. Für die Streuung in Ausbreitungsrichtung des einfallenden Lichts und entgegen dieser Richtung lassen sich obige Beziehungen vereinfachen:

$$\begin{aligned} S_1(0^0) &= S_2(0^0) = \frac{1}{2} \sum_{n=1}^{\infty} (2n+1)(a_n + b_n), \\ S_1(180^0) &= -S_2(180^0) = \frac{1}{2} \sum_{n=1}^{\infty} (2n+1)(-1)^n(-a_n + b_n). \end{aligned} \quad (3.32)$$

Mit den Amplituden-Funktionen  $S_1$  und  $S_2$  ((3.31a) und (3.31b)) ist die Streumatrix ((3.12) oder (3.13)) vollständig bestimmt. Die durch  $C_s$  normierte Streumatrix (3.13) sieht folgendermaßen aus:

$$\begin{pmatrix} I_{\parallel s} \\ I_{-s} \\ U_s \\ V_s \end{pmatrix} = \frac{C_s}{r^2} \begin{pmatrix} \tilde{M}_2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \tilde{M}_1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \tilde{S}_{21} & -\tilde{D}_{21} \\ 0 & 0 & \tilde{D}_{21} & \tilde{S}_{21} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} I_{\parallel i} \\ I_{-i} \\ U_i \\ V_i \end{pmatrix}, \quad (3.33)$$

mit:

$$\begin{aligned} \tilde{M}_1 &= \frac{1}{k^2 C_s} S_1 S_1^*, \\ \tilde{M}_2 &= \frac{1}{k^2 C_s} S_2 S_2^*, \\ \tilde{S}_{21} &= \frac{1}{k^2 C_s} \operatorname{Re}(S_1 S_2^*), \\ -\tilde{D}_{21} &= -\frac{1}{k^2 C_s} \operatorname{Im}(S_1 S_2^*), \end{aligned}$$

Der *differentielle Streuquerschnitt*  $\frac{dC_s}{d\Omega}$  ist definiert als der Quotient der in den Raumwinkel um die Richtung  $\theta$  pro Zeit gestreuten Energie und der Strahlungsflußdichte der einfallenden Strahlung. Für unpolarisiertes Licht erhält man:

$$\frac{dC_s(r, m, \lambda, \mu)}{d\Omega} = \frac{1}{k^2} \frac{S_1 S_1^* + S_2 S_2^*}{2},$$

mit der Dimension Fläche/Steradian. Die Integration über den vollen Raumwinkel  $4\pi$  ergibt:

$$\int_{4\pi} \frac{dC_s(\mu)}{d\Omega} d\Omega = C_s.$$

Die sogenannte *Phasenfunktion*  $p(x, m, \mu)$ , mit  $\mu = \cos \theta$ , erhält man durch Division des differentiellen Streuquerschnitts durch  $C_s$ :

$$p(x, m, \mu) = \frac{1}{k^2 C_s} \frac{S_1 S_1^* + S_2 S_2^*}{2}. \quad (3.34)$$

Zur Vereinfachung der Schreibweise werden die Argumente  $x, m$  in  $p(x, m, \mu)$  oft weggelassen. Die Phasenfunktion hat die Dimension 1/Steradian und ist auf  $4\pi$  normiert<sup>1</sup>, es gilt also:

$$\int_0^{2\pi} \int_0^\pi p(\cos \theta) \sin \theta d\theta d\phi = \frac{1}{C_s} \int_{4\pi} \frac{dC_s(\cos \theta)}{d\Omega} d\Omega = 4\pi$$

Aus der Phasenfunktion kann die gestreute Strahlungsflußdichte  $I_s(d, \theta)$  im Abstand  $d$  ermittelt werden:

$$I_s(d, \theta) = I_i \frac{C_s}{d^2} p(\cos \theta)$$

Für viele Anwendungen bei Strahlungstransportrechnungen ist es notwendig die Phasenfunktion in eine Legendre-Reihe zu entwickeln:

$$p(\mu) = \sum_{m=0}^{\infty} (2m+1) \beta_m P_m(\mu),$$

hierbei ist  $\beta_m$  das  $m$ -te Legendre-Moment und  $P_m$  das Legendre-Polynom mit Grad  $m$ . Typischerweise werden etwa  $2x$  Legendre-Terme benötigt, um die Phasenfunktion hinreichend genau darzustellen, wobei  $x$  der Mie-Größenparameter ist [Wiscombe 1980]. Wenn  $P_m$  so normiert ist, daß  $P_m(1) = 1$ , kann die Orthogonalitätsrelation

$$\int_{-1}^1 P_m(\mu) P_n(\mu) d\mu = \frac{2}{2m+1} \delta_{mn}$$

verwendet werden, um die Legendre-Momente  $\beta_m$  zu berechnen:

$$\beta_m = \frac{1}{2} \int_{-1}^1 p(\mu) P_m(\mu) d\mu. \quad (3.35)$$

### 3.3 Mie-Streuung an einem Teilchenensemble

Bei der Mie-Streuung an einem Teilchenensemble ist die Größenverteilung  $n(r) = \frac{dN(r)}{dr}$  der Teilchenansammlung zu beachten, die die Anzahldichte der Partikel mit Radius zwischen  $r + dr$  angibt. Wenn der Abstand zwischen den Teilchen groß im Vergleich zur Wellenlänge ist, was im untersuchten ultravioletten bis nahinfraroten Spektralbereich sicher zutrifft, dann können Interferenzeffekte vernachlässigt werden. Die optischen Eigenschaften des Teilchenensemble bekommt man dann einfach durch Summation der entsprechenden Eigenschaften der einzelnen Teilchen.

Also ergibt sich für den Volumen-Streukoeffizient:

$$\sigma_s(m, \lambda) = \int_0^\infty C_s(r, m, \lambda) n(r) dr = \int_0^\infty Q_s(x, m) \pi r^2 n(r) dr,$$

<sup>1</sup>In der Literatur findet sich oft auch eine Normierung auf 1, in dieser Arbeit wird aber immer auf  $4\pi$  normiert.

und den Volumen-Extinktionskoeffizient:

$$\sigma_e(m, \lambda) = \int_0^\infty C_e(r, m, \lambda) n(r) dr = \int_0^\infty Q_e(x, m) \pi r^2 n(r) dr.$$

Der Volumen-Absorptionskoeffizient ergibt sich nach:  $\sigma_a = \sigma_e - \sigma_s$ .

Die Einheit von  $\sigma_s$ ,  $\sigma_e$  und  $\sigma_a$  ist 1/Länge. Für den Rest der Arbeit wird in diesem Zusammenhang auf die Bezeichnung „Volumen“ verzichtet, und es werden einfach die Begriffe: Streukoeffizient, Extinktionskoeffizient und Absorptionskoeffizient verwendet. In Anhang C wird ein Teil der in dieser Arbeit mittels Mie-Theorie berechneten Werte (Extinktions- und Streukoeffizient sowie die Legendre-Momente der Phasenfunktion) angegeben.

# Kapitel 4

## Optische Eigenschaften

In diesem Kapitel werden die mittels Mie-Rechnung erhaltenen optischen Eigenschaften der Aerosol-Komponenten kurz vorgestellt. Wie schon am Ende von Kapitel 2.3 (Seite 17) angedeutet, sind die Abbildungen der Extinktions- und Streukoeffizienten in Anhang B.2 (Seite 64 bis 76) zusammen mit den Brechungsindizes der jeweiligen Komponente wiedergegeben. Dies hat sich als die übersichtlichste Art der Darstellung herausgestellt. Hiermit ist es gut möglich, den spektralen Verlauf der beiden Koeffizienten mit dem Verlauf des Brechungsindex zu vergleichen. Desweiteren läßt sich aus der Differenz des Extinktions- und Streukoeffizienten der Absorptionskoeffizient direkt ablesen. Alle drei Koeffizienten sind auf ein Teilchen pro  $\text{cm}^3$  normiert und haben die Einheit  $1/\text{km}$ .

Im betrachteten Wellenlängenbereich kann als grundlegendes Charakteristikum der optischen Eigenschaften von Aerosol-Komponenten der im Vergleich zu Spurengasen relativ gleichförmige Verlauf erkannt werden. Dies war auch zu erwarten, da bei der wichtigsten Eingangsgröße der Mie-Theorie, dem Brechungsindex, auch keine übermäßig ausgeprägten Strukturen zu erkennen sind.

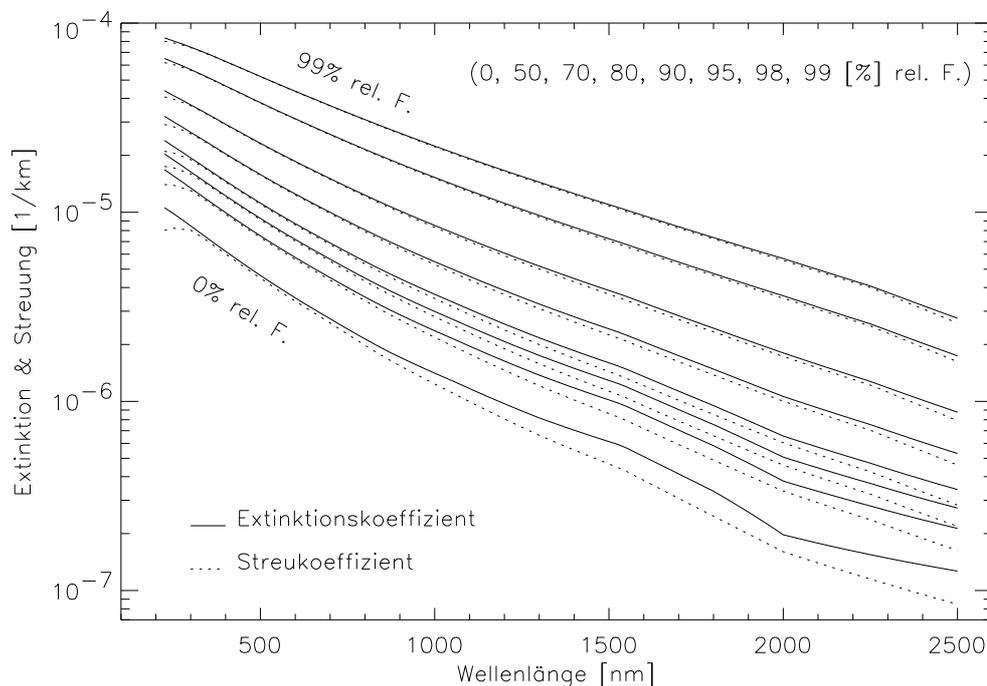
Auffällig ist der über viele Größenordnungen gehende Gesamtbereich der Extinktions- und Streukoeffizienten. Betrachtet man alle Komponenten zusammen, so ergeben sich hierbei Werte von etwa  $10^{-9}$  bis  $1 \text{ km}^{-1}$ . Bei einer einzelnen Aerosol-Komponente können Bereiche mit Änderungen von 2 bis 3 Größenordnungen erkannt werden. Es gibt aber auch nahezu konstante Verläufe der Extinktions- und Streukoeffizienten, z. B. beim Seesalz.

Bei Analyse der verschiedenen Moden, der sich in den Brechungsindizes gleichenden Aerosol-Komponenten, also bei den beiden Seesalz bzw. vier mineralischen Komponenten, kann sehr gut der Zusammenhang zwischen Partikelgröße und Stärke der Extinktionskoeffizienten ausgemacht werden: Größere Teilchen zeigen erwartungsgemäß größere Extinktion. Dies gilt auch bei Betrachtung der vier hygroscopische Aerosol-Komponenten: Wasserlöslich, Seesalz (Akkumulation und grobkörnig) sowie Sulfat, siehe Seite 65 bis 68. Die durch Aufnahme von Wasser bedingte Änderung des Brechungsindex kann gut an der Abnahme der Absorption erkannt werden. Desweiteren ist die erhebliche Absorptionfähigkeit der Ruß-Komponente sehr deutlich zu

sehen.

Im Vergleich mit [Hess *et al.* 1998, OPAC] wurde eine sehr gute „qualitative“ Übereinstimmung der optischen Eigenschaften der Aerosol-Komponenten erzielt. Die leichten Abweichungen sind sicherlich durch die etwas veränderten Größenverteilungen und durch die Verwendung eines anderen Mie-Programms zu erklären (vgl. Kapitel 1). In Abbildung 4.1 sind als Beispiel der Extinktions- und Streukoeffizienten der wasserlöslichen Aerosol-Komponente abgebildet.

Die aus der Mie-Theorie erhaltenen Phasenfunktionen der Aerosol-Komponenten, welche für die Strahlungstransportrechnungen benötigt werden, zeigen ein für die jeweilige Aerosol-Komponente typisches Streuverhalten in Abhängigkeit des Streuwinkels. Mie-Phasenfunktionen zeichnen sich, z. B. verglichen mit Rayleigh-Phasenfunktionen oder Henyey-Greenstein-Phasenfunktionen, durch einen großen Peak in Vorwärtsrichtung aus. Kleinere Aerosol-Partikel, z. B. Rußteilchen, zeigen ein weniger stark ausgeprägtes Rückstreuverhalten als größere Partikel, wie z. B. grobkörnige Seesalzpartikel. Wegen der großen Variationsmöglichkeiten der der Phasenfunktionen, mit ihren Abhängigkeiten von Komponenten-Art, Größenverteilung, relativer Luftfeuchtigkeit und Wellenlänge des Lichts, kann hier nicht weiter auf diese eingegangen werden. Es sei deshalb auf [Hoogen 1995a] und [Twomey 1977] verwiesen.



**Abbildung 4.1:** Die Extinktions- und Streukoeffizienten der wasserlöslichen Aerosol-Komponente in Abhängigkeit der relativen Luftfeuchtigkeit. (rel. F.=relative Luftfeuchtigkeit)

# Kapitel 5

## Strahlungstransport in der Atmosphäre

In diesem Kapitel wird kurz auf die Lösung der Strahlungstransportgleichung eingegangen. In planparalleler Geometrie hat sie folgende Form:

$$\mu \frac{dI(z, \mu, \varphi)}{dz} = -\sigma_e(z) I(z, \mu, \varphi) + \frac{\sigma_s(z)}{4\pi} \int_0^{2\pi} d\varphi' \int_{-1}^1 d\mu' p(z, \mu, \mu', \varphi, \varphi') \cdot I(z, \mu', \varphi'). \quad (5.1)$$

Diese monochromatische integro-differentielle skalare Strahlungstransportgleichung für ein absorbierendes und streuendes Medium wird durch folgende Größen bestimmt.  $I$  ist das von der räumlichen Position (Koordinate  $z$ ) und den Richtungen ( $\mu$  und  $\varphi$ ) abhängige Strahlungsfeld. Hierbei ist  $\mu$  der cosinus des Polarwinkels bezüglich der  $z$ -Richtung (auch Zenitwinkel genannt) und  $\varphi$  ist der relative Azimutwinkel bezüglich der Sonnenrichtung.  $\sigma_e$  ist der Extinktions- und  $\sigma_s$  der Streukoeffizient. Die auf  $4\pi$  normierte Phasenfunktion  $p(z, \mu, \mu', \varphi, \varphi')$  ist das gewichtete Mittel aus Rayleigh-, Wolken- und Aerosol-Phasenfunktion. Sie beschreibt den in Richtung  $\mu$  und  $\varphi$  gestreuten Anteil des Lichts, welches sich vor der Streuung in Richtung  $\mu'$  und  $\varphi'$  ausbreitete.

Die Strahlungstransportgleichung 5.1 wird in *SCIATRAN* unter Beachtung geeigneter Randbedingungen durch die *Methode der finiten Differenzen* gelöst [Rozanov *et al.* 1997]. Sphärische Effekte werden approximiert, in dem der solare Quellterm in sphärischer Geometrie berechnet wird, die Vielfachstreuung aber in planparalleler Geometrie stattfindet (*pseudo-sphärischer Ansatz*). Dieser Ansatz ermöglicht genaue Berechnungen bis zu einem Sonnenzenitwinkel (SZA) von etwa  $92^\circ$ .

Zu *SCIATRAN* und dem Vorgängermodell *GOMETRAN++* sind einige Veröffentlichungen erschienen in denen weitere Details beschrieben sind [Burrows *et al.* 1990], [Burrows *et al.* 1995], [Rozanov *et al.* 1997], [Buchwitz 1997], [Eichmann 1995], [Kurosu 1997].

# Kapitel 6

## Anwendungen: Aerosol-Szenarien

Die in Kapitel 2 als *interne* Mischung vorgestellten Aerosol-Komponenten werden in Kapitel 6.1 in einer *externen* Mischung zu Aerosol-Typen kombiniert. Um eine vollständige Aerosol-Modellierung zu erhalten müssen diese Aerosol-Typen mit charakteristischen Aerosol-Vertikalverteilung erweitert werden (Kapitel 6.2). In Kapitel 7 ist die mit dem Strahlungstransportprogramms *SCIATRAN* berechnete spektrale Radianz am Oberrand der Atmosphäre zu finden.

Die meisten Messungen von Aerosol-Eigenschaften sind auf relativ kleine Gebiete beschränkt und deshalb für diese Arbeit mit globaler Zielsetzung nicht direkt zu verwenden. Es gibt auch einige Messungen mit weiter ausgedehnten Beobachtungsgebieten, z. B. [Hobbs *et al.* 1985] mit ca. 2000 km Länge, sowie eine globale Simulation mineralischer Aerosole [Joussaume 1990]. Als beste und umfangreichste „Daten-Quelle“ stellt sich die Weiterentwicklung von OPAC, der „Global Aerosol Data Set“ (*GADS*) heraus [Koepke *et al.* 1997]. Diese auf [d’Almeida *et al.* 1991] beruhende Assimilation ist ein erster Versuch eine „Klimatologie der Aerosole“ zu beschreiben. *GADS* stellt jeweils für zwei Jahreszeiten (Sommer und Winter) eine detaillierte Datenbank mit einer geographischen Auflösung von  $5^\circ \times 5^\circ$  bereit. Um aber einen besseren Überblick über typische Aerosol-Typen zu bekommen und um die Berechnungen dieser Arbeit zu validieren, werden hier die OPAC Aerosol-Typen vorgestellt.

An dieser Stelle sei darauf hingewiesen, daß es bei der Modellierung von Aerosolen eine sehr große Anzahl von Variationsmöglichkeiten in den Parametern gibt. Gemeint sind hier insbesondere: Gesamtteilchenzahldichte, Anzahl und Auswahl der Komponenten, „externe“ Mischungsverhältnisse, relative Luftfeuchtigkeit und Wahl des vertikalen Profils. Es ist deshalb von Vorteil, sich auf charakteristische „Grundszenarien“ zu beschränken. Dabei wird die relative Luftfeuchtigkeit nicht verändert und vulkanische Aktivitäten vernachlässigt. Der Realität entsprechend, werden die Aerosol-Parameter überwiegend in den ersten beiden Kilometern über der Erdoberfläche variiert, also im sogenannten „boundary layer“.

## 6.1 Aerosol-Typen

Die 10 OPAC- Aerosol-Typen sind in Tabelle 6.2 aufgelistet. Sie beschreiben die Aerosol-Verhältnisse in der Nähe der Erdoberfläche. In der jeweiligen Zeile der Typen-Bezeichnung ist in der rechten Spalte die Gesamtteilchenzahldichte  $N$  in Partikel/cm<sup>3</sup> angegeben (genauer: dies ist der Wert an der Erdoberfläche). Darunter sind die Teilchenzahldichten  $N_i$  der Aerosol-Komponenten zu finden. Sie berechnen sich durch Multiplikation von  $N$  mit dem entsprechenden Faktor in der mittleren Spalte (Relation), es gilt:  $N = \sum_i N_i$ . Die angegebenen Werte entsprechen weitgehend [Hess *et al.* 1998, Tabelle 4, Seite 841].

Zu beachten ist, daß auch sehr kleine  $N_i$ , z. B. bei der grobkörnigen Seesalz-Komponente des tropisch-maritimen Aerosol-Typs von etwa einem Teilchen pro dm<sup>3</sup>, nicht vernachlässigt werden dürfen. Sie wirken sich mit ihrem hohen Extinktions- und Streukoeffizienten durchaus auf die spektrale Radianz aus. Im urbanen Aerosol-Typ stellt die hohe Rußpartikel-Teilchenzahldichte von 130000 Teilchen pro cm<sup>3</sup> sicher ein weiteres Extrem dar.

Die Extinktionskoeffizienten der OPAC-Typen (bei  $\lambda=550$  nm) stimmt mit den in dieser Arbeit berechneten Werten innerhalb weniger Prozent überein.

## 6.2 Vertikale Aerosol-Verteilungen

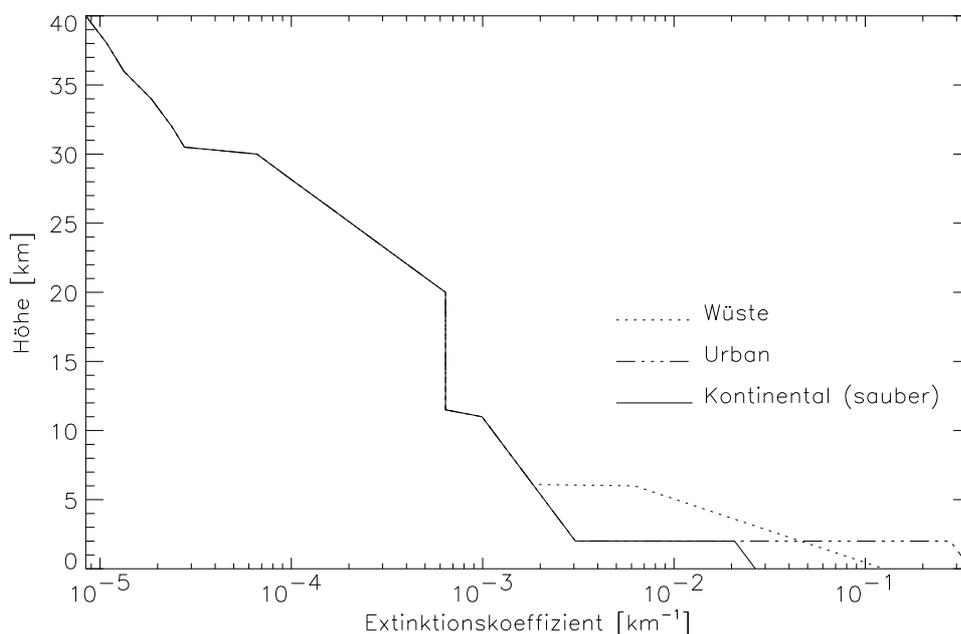
Der Verlauf der Gesamtteilchenzahldichte  $N$  mit der Höhe mag auf den ersten Blick kein weiteres Problem darstellen, doch leider zeigt sich hierbei erneut die extreme Variabilität von Aerosolen. Zwar gibt es einzelne Messungen von Vertikal-Profilen, doch diese schwanken sehr stark und sind zudem nur für den Ort und die Zeit der Messung gültig [Gras 1991, Sasano 1996]. Diesen Sachverhalt gibt [Jaenicke 1993, S. 17] wie folgt wieder: „*The vertical distribution of aerosols in the troposphere needs additional investigation.*“

Das von ihm verwendete Profil, bei welchem  $N$  ab etwa 2 bis 4 km bei 300 Teilchen pro cm<sup>3</sup> mit der Höhe konstant bleibt, konnte nur zum Teil verwendet werden (siehe auch [Jaenicke 1992]). Da sich R. Jaenicke, OPAC und GADS weitgehend auf die Troposphäre beschränken, wurde für Höhen ab 11 km ein Profil nach [Kneizys *et al.* 1986] verwendet.

Ausgehend von der Erdoberfläche fällt die in Tabelle 6.2 angegebene Gesamtteilchenzahldichte  $N$  bis zu einer Höhe von 2 km exponentiell ab (relative Luftfeuchtigkeit: 80 Prozent). Für die jeweilige Skalenhöhe wurden Werte aus [Hess *et al.* 1998, Tabelle 5] gewählt. Im Bereich zwischen 2 und 11 km wurde ein Aerosol-Typ mit 50 % rel. Luftfeuchtigkeit nach [Hess *et al.* 1998, Seite 842] verwendet: 60 % wasserlöslich, ca. 40 % Ruß und 0,017 % unlöslich. Als Besonderheit wurde aus meteorologischen Gründen beim Wüsten-Aerosol-Typ die Obergrenze des „boundary layer“ von 2 km Höhe auf 6 km angehoben. Für die Höhe zwischen 11 und 30 km kommt ein stratosphärischer Hintergrund-Aerosol-Typ bestehend aus der Sulfat Komponente mit 0 %

rel. Luftfeuchtigkeit zum Einsatz [McCormick *et al.* 1993]. Da keine vulkanische Aktivität angenommen wurden, konnte die Teilchenzahldichte bis 20 km bei 15 Partikeln pro  $\text{cm}^3$  konstant gehalten werden um danach exponentiell bis auf ca. 1,5 zu fallen [WMO 1983, S. 99]. Zwischen 30 und 60 km Höhe wurde ein exponentieller Abfall von 0,3 auf 0,006 Meteoriten-Staub-Teilchen pro  $\text{cm}^3$  angenommen.

In Abbildung 6.1 sind als Beispiel drei Vertikal-Profile wiedergegeben: Wüste, Urban und Kontinental (sauber). Um die Profile besser mit der Literatur vergleichen zu können wurde nicht die Teilchenzahldichte, sondern der Extinktionskoeffizienten bei einer Wellenlänge von 550 nm in Abhängigkeit der Höhe dargestellt.



**Abbildung 6.1:** Drei typische Vertikal-Profile des Extinktionskoeffizienten bei 550 nm. Oberhalb von 2 bzw. 6 km unterscheiden sich die Profile nicht. Der nur bis zu einer Höhe von 40 km wiedergegebene Extinktionskoeffizienten fällt in 60 km Höhe bis auf einen Wert von  $5 \cdot 10^{-9} \text{ km}^{-1}$  ab.

Mit den eben beschriebenen Vertikal-Profilen kann für jeden Aerosol-Typ die optische Dicke über den gesamten Höhenbereich berechnet werden. In Tabelle 6.1 ist für eine Wellenlänge von 550 nm ein Vergleich der SCIATRAN- und OPAC-Werte wiedergegeben. Letztere stammen aus [Hess *et al.* 1998, Tabelle 3, Seite 840]. Über alle Aerosol-Typen gemittelt liegt die in dieser Arbeit berechnete optische Dicke etwa 5 % über den in OPAC angegebenen Werten. Als wesentliche Ursache der Abweichungen kommen unterschiedliche Vertikal-Profil-Annahmen in Frage. In Anbetracht der son-

stigen Unsicherheiten (siehe auch: [Koepke *et al.* 1997, S. 24]) ist dies sicher eine gute Übereinstimmung.

Auch bei der Betrachtung der optischen Dicke in ausgewählten Höhenbereichen, z. B. der Bereich des stratosphärischen Hintergrund-Aerosol-Typs (11-30 km), konnten gute Übereinstimmung mit der Literatur gefunden werden [McCormick *et al.* 1993]. Die optische Dicke oberhalb von 2 km (bei  $\lambda=550$  nm) untergliedert sich in folgende Anteile: 2 bis 11 km: 0,0173; 11 bis 30 km: 0,0084; 30 bis 60 km: 0,0003; zusammen ergibt sich also ein Wert von 0,026. Beim Wüsten-Aerosol-Typ erhält man für den Höhenbereich ab 6 km einen Wert von 0,016 (0 bis 6 km: 0,25).

Aerosol-Typ	SCIATRAN	OPAC	Abweichung [%]
<b>Kontinental</b> (sauber)	0,07354	0,064	+14,86
<b>Kontinental</b> (gemittelt)	0,16235	0,151	+ 7,52
<b>Kontinental</b> (verschmutzt)	0,34271	0,327	+ 4,80
<b>Urban</b>	0,66335	0,643	+ 3,16
<b>Wüste</b>	0,26671	0,286	- 6,74
<b>Maritim</b> (sauber)	0,10545	0,096	+ 9,84
<b>Maritim</b> (verschmutzt)	0,12868	0,117	+ 9,98
<b>Maritim</b> (tropisch)	0,06418	0,056	+14,61
<b>Arktisch</b>	0,07144	0,063	+13,40
<b>Antarktisch</b>	0,05673	0,072	- 21,21

**Table 6.1:** Vergleich der optischen Dicke der SCIATRAN- und der OPAC-Modellierung bei  $\lambda=550$  nm, unter Berücksichtigung des gesamten Höhenbereichs von 0 bis 60 km. Die in der rechten Spalte angegebene relative Abweichung berechnet sich nach:  $(SCIATRAN - OPAC) \cdot 100/OPAC$ .

<b>Typen-Bezeichnung</b>		$N$ [ $\text{cm}^{-3}$ ]
Komponenten	Relation	$N_i$ [ $\text{cm}^{-3}$ ]
<b>Kontinental</b> (sauber)		2600,0
Wasserlöslich	0,999942	2599,85
Unlöslich	0,000058	0,15
<b>Kontinental</b> (gemittelt)		15300,0
Wasserlöslich	0,457987	7007,2
Unlöslich	0,000026	9,4
Ruß	0,541987	8292,4
<b>Kontinental</b> (verschmutzt)		50000,0
Wasserlöslich	0,313994	15699,7
Unlöslich	0,000012	0,6
Ruß	0,685994	34299,7
<b>Urban</b>		158000,0
Wasserlöslich	0,177	27966,0
Unlöslich	0,000009	1,4
Ruß	0,822991	130032,6
<b>Wüste</b>		2300,0
Wasserlöslich	0,871638	2004,8
Mineralisch, (Nukleation)	0,117	269,1
Mineralisch, (Akkumulation)	0,0113	26,0
Mineralisch, (grobkörnig)	0,000062	0,1
<b>Maritim</b> (sauber)		1520,0
Wasserlöslich	0,986798	1499,93
Seesalz, (Akkumulation)	0,0132	20,067
Seesalz, (grobkörnig)	0,000002	0,003
<b>Maritim</b> (verschmutzt)		9000,0
Wasserlöslich	0,421779	3796,011
Seesalz, (Akkumulation)	0,00222	19,98
Seesalz, (grobkörnig)	0,000001	0,009
Ruß	0,576	5184,0
<b>Maritim</b> (tropisch)		600,0
Wasserlöslich	0,983298	589,979
Seesalz, (Akkumulation)	0,0167	10,02
Seesalz, (grobkörnig)	0,000002	0,001
<b>Arktisch</b>		6600,0
Wasserlöslich	0,197	1300,2
Unlöslich	0,000002	0,01
Seesalz, (Akkumulation)	0,000288	1,9
Ruß	0,80271	5297,89
<b>Antarktisch</b>		43,0
Sulfat	0,998787	42,95
Seesalz, (Akkumulation)	0,00109	0,045
Mineralisch, (transportiert)	0,000123	0,005

*Table 6.2: Die 10 OPAC-Aerosol-Typen. Die in der rechten Spalte angegebene Gesamteilchenzahldichte  $N$  setzt sich aus den Teilchenzahldichten  $N_i$  der jeweiligen Aerosol-Komponenten zusammen.*

# Kapitel 7

## Ergebnisse: Aerosol-Einfluß auf die spektrale Radianz

In diesem Kapitel werden die Einflüsse der in Kapitel 6 beschriebenen Aerosol-Szenarien auf den Strahlungstransport in der Atmosphäre vorgestellt.

Zur Lösung der Strahlungstransportgleichung (Kapitel 5) wurde das Strahlungstransportprogramm *SCIATRAN* verwendet. Um die speziellen Charakteristiken der Aerosol-Typen untereinander vergleichen zu können, sind einige Vereinfachungen angenommen worden. Insbesondere betrifft dies die Albedo, welche für alle Berechnungen auf 0,35 konstant gehalten wurde. Die Unsicherheit in der Albedo ist ein generelles Problem im Rahmen von Aerosol-Retrieval wie auch das Vorhandensein von Wolken [Kurosu 1997, Kurosu 1998]. Die Albedo, Wolken und Aerosole zeigen im atmosphärischen Strahlungstransport alle einen ähnlichen „breitbandigen“ Effekt und sind deshalb nur schwer zu unterscheiden. Diese Problematik soll hier aber nicht weiter verfolgt werden (siehe auch: [Teillet *et al.* 1994, Guzzi *et al.* 1998, Heinemann 1995]).

Für alle Berechnungen wurden folgende Einstellungen der geometrischen Parameter verwendet: Sonnenzenitwinkel (SZA)  $20^\circ$ , *Line-of-sight*-Winkel  $0^\circ$  („*nadir*“ Beobachtung). Die mit *SCIATRAN* errechnete Radianz ist genau genommen die sonnennormierte Radianz, also die Radianz für einen Solaren Fluß von  $\pi$ . Desweiteren wurden zunächst alle Spurengasabsorptionen vernachlässigt. Um abschließend doch ein realistischeres Bild zu bekommen, wurden einige Spektren mit stratosphärischer Ozonabsorption berechnet. Die anderen stark absorbierenden Spurengase wie  $H_2O$ ,  $O_2$ ,  $CO_2$  und  $CH_4$  waren zum Zeitpunkt der Berechnungen noch nicht vollständig in *SCIATRAN* implementiert. Es wurden keine weiteren Untersuchungen in diese Richtung vorgenommen, im Prinzip sind aber ähnliche Ergebnisse zu erwarten.

Aerosole können durch Absorption zu einer Abnahme und durch Streuung zu einer Zunahme der spektralen Radianz führen. Um diese Effekte an unterschiedlichen Aerosol-Typen zu untersuchen, ist im folgenden eine Abnahme oder Zunahme immer bezüglich einer Referenzrechnung ohne Aerosole zu verstehen. Zur Verdeutlichung der Größenordnung des Aerosol-Einflusses auf die spektrale Radianz sind in Abbildung 7.1 neben einer Referenzrechnung ohne Aerosole drei Spektren mit den folgen-

den Aerosol-Typen dargestellt: Wüsten-Aerosole, kontinentale verschmutzte Aerosole und urbane Aerosole. Der urbane Typ führt mit seinen über 130000 Rußteilchen pro  $\text{cm}^3$  zu einer Abnahme der Radianz von bis zu 20 %. Beim verschmutzten kontinentalen Aerosol-Typ führt die Rußabsorption immerhin noch zu einer Abnahme von 8 %. Diese schon in den vorangegangenen Kapiteln aufgefallene starke Absorptionsfähigkeit von Ruß zeigt sich also auch hier. Sie läßt sich auf den hohen Imaginärteil der Rußpartikel zurückführen. Der Verlauf der spektralen Radianz des Wüsten-Aerosols kann gut durch die Überlagerung der Eigenschaften der mineralischen Aerosol-Komponenten erklärt werden. Bis 800 nm überwiegt die Absorption, zwischen 800 und ca. 2000 nm ist die Streuung dominant und führt zu einer Zunahme der Radianz.

Der Einfluß weiterer Aerosol-Typen auf die Radianz ist in Abbildung 7.2 dargestellt. Zur besseren Interpretation sind in den Abbildungen 7.3 und 7.4 die relativen Abweichungen zur Referenzrechnung abgebildet. Sie errechnen sich nach:  $(\text{Typen-Radianz} - \text{Referenz})/\text{Referenz}$ . In Abbildung 7.3 können sehr gut die Größenordnungen der Abweichungen erkannt werden: beim urbanen Typ eine Abnahme bis ca. 25 %, beim kontinental verschmutzten Typ bis zu 8 %. Das Wüstenszenario zeigt zwischen 800 und 1300 nm eine Zunahme von etwa 3 %.

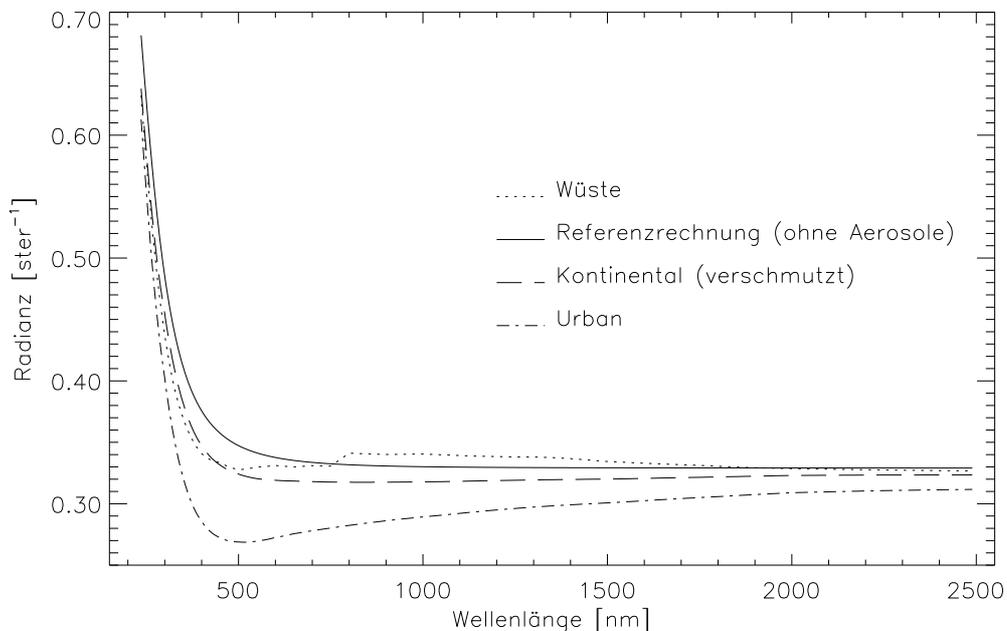
Das ebenfalls berechnete Szenario eines über weite Strecken transportierten mineralischen Aerosols (vgl. Kapitel 2.1.6, Seite 11), wird in Abbildung 7.5 dargestellt. Bei dieser Modellierung nach [Koepke *et al.* 1997, S. 19] wurde in einer Höhe von 2 bis 3,5 km eine aus der mineralisch transportierten Aerosol-Komponente bestehende Aerosol-Schicht mit in der Höhe konstanten 10 Teilchen pro  $\text{cm}^3$  eingezeichnet. Die zum Vergleich in der Abbildung ebenfalls angegebene Radianz des sauberen maritimen Aerosol-Typs (0 bis 2km) läßt den doch recht starken Einfluß der mineralischen Schicht erkennen. Es zeigt sich ein dem Wüstenszenario vergleichbarer Verlauf der spektralen Radianz.

Abschließend sind in Abbildung 7.6 der verschmutzte kontinentale und der saubere maritime Aerosol-Typ unter Berücksichtigung der Ozonabsorption dargestellt. Es wird nur der Bereich zwischen 250 und 700 nm dargestellt, da nur dieser relevante Ozonabsorption zeigt. Unterhalb von 300 nm überwiegt der Einfluß durch Ozon, oberhalb der *Huggins-Banden* spielt auch der Einfluß durch Aerosole eine nicht zu vernachlässigende Rolle. Die schwachen Strukturen zwischen 450 und 700 nm sind auf die *Chappuis-Banden* des Ozons zurückzuführen. In der Abbildung ist zudem die Abnahme der Radianz durch Rußabsorption in der Größenordnung von 8 % zu erkennen. Der Einfluß des maritimen Aerosol-Typs, der zu einer Zunahme der Radianz führt, fällt sehr gering aus und liegt bei weniger als ein Prozent (siehe auch Abbildung 7.4).

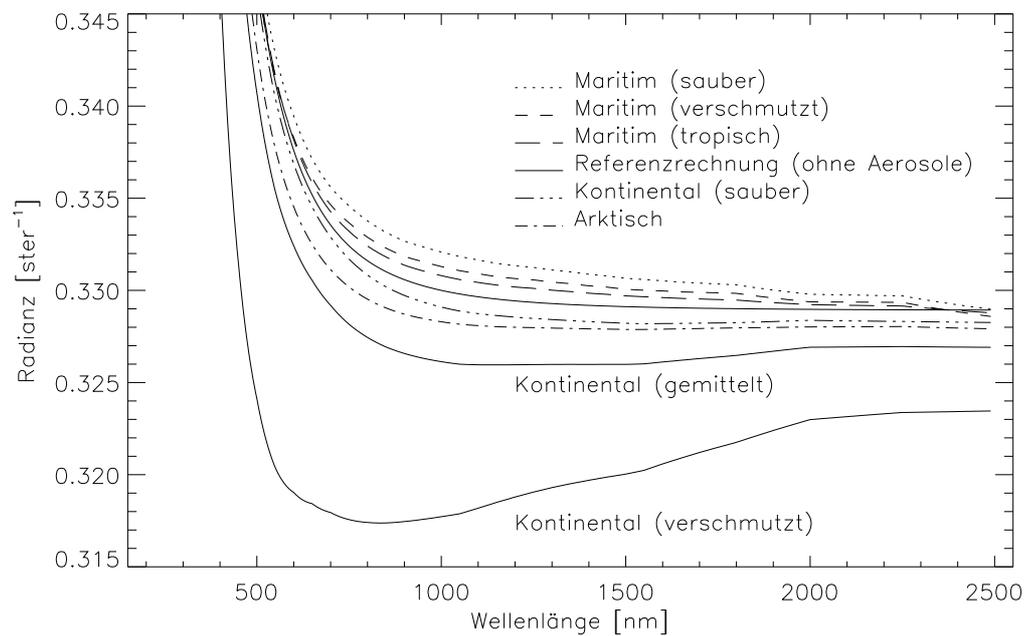
Durch Berechnung der Radianz unterschiedlicher Aerosol-Typen und deren Vergleich untereinander und bezüglich einer Referenzrechnung ohne Aerosole konnte also eine Zunahme oder Abnahme der spektralen Radianz festgestellt werden. Welcher der beiden Effekte dominiert hängt im wesentlichen vom Aerosol-Typ, also von der Zusammensetzung der Aerosole und der vertikalen Verteilung der Anzahldichte und der Wellenlänge ab. Für die spektrale Radianz läßt sich dieser Effekt grob wie folgt zusammenfassen: maritime Aerosol-Typen führen zu einer Zunahme, stark rußhaltige

ge Typen zu einer Abnahme der Radianz. Bei den mineralhaltigen Typen kann beides eintreten. Im untersuchten Spektralbereich haben Aerosole also einen relativ „breitbandigen“ Einfluß auf die spektrale Radianz.

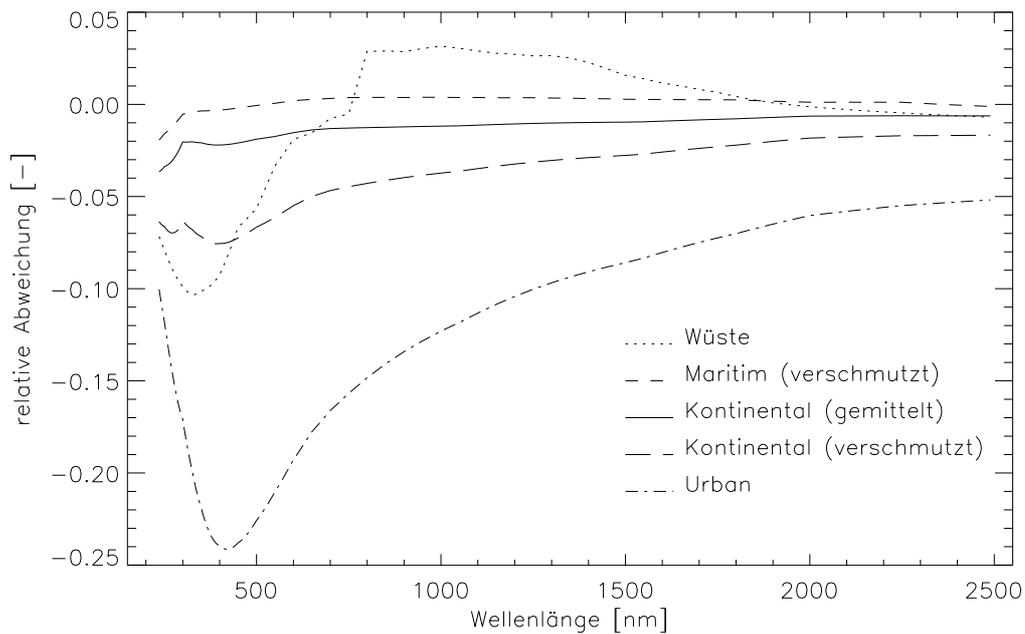
Das in dieser Arbeit entwickelte *SCIATRAN*-Aerosol-Modell ermöglicht es die derzeitig bekannten atmosphärischen Aerosole-Eigenschaften wiederzugeben. Es ist zudem flexibel in der Wahl der Parameter und relativ leicht zu handhaben. Als weitere Verbesserung könnten die Einarbeitung genauerer Brechungsindizes und die Weiterentwicklung der Vertikal-Profile empfohlen werden. Beides ist jedoch aus Mangel an konkreten Forschungsergebnissen nur sehr schwer möglich.



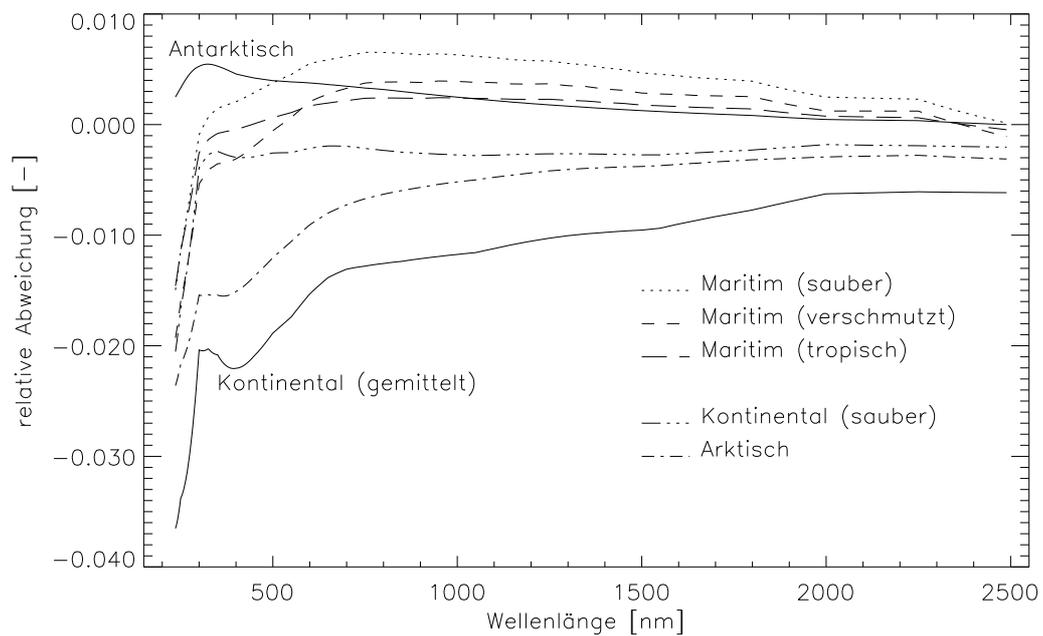
**Abbildung 7.1:** Der Einfluß dreier ausgewählter Aerosol-Typen auf die spektrale Radianz am Oberrand der Atmosphäre. Die durchgezogene Linie zeigt den Verlauf der Radianz ohne Aerosole.



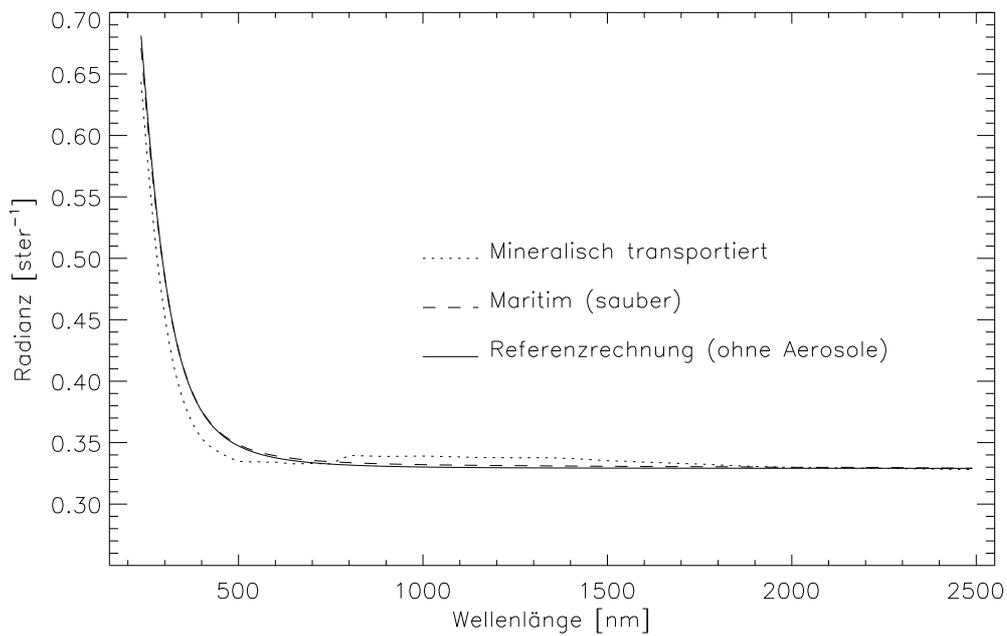
**Abbildung 7.2:** Der Einfluß der restlichen Aerosol-Typen auf die Radianz. Verglichen mit der Referenzrechnung führen die drei maritimen Typen zu einer Zunahme, die verbleibenden vier Typen zu einer Abnahme der Radianz.



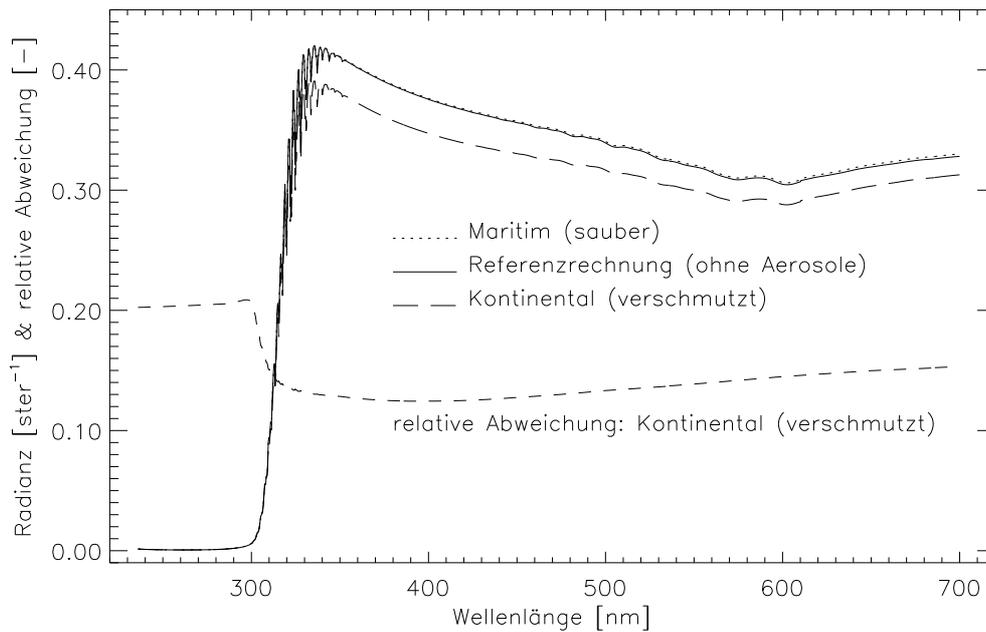
**Abbildung 7.3:** Die auf die Referenzrechnung bezogene relative Abweichung mit einem Darstellungsbereich von -25 bis + 5 %. Die Aerosol-Typen: Wüste, Kontinental (verschmutzt) und Urban zeigen einen relativ starken Einfluß auf die Radianz. Um die Größenordnungen besser mit Abbildung 7.4 vergleichen zu können, sind die beiden Typen Maritim (verschmutzt) und Kontinental (gemittelt) ebenfalls dargestellt.



**Abbildung 7.4:** Gegenüberstellung der auf die Referenzrechnung bezogenen relativen Abweichung der Aerosol-Typen mit vergleichbar geringem Einfluß auf die Radianz. Der Darstellungsbereich der relativen Abweichung reicht von -4 bis +1 %.



**Abbildung 7.5:** Der Einfluß eines über weite Strecken transportierten Wüsten-Aerosols auf die Radianz. In einem Höhebereich zwischen 2 und 3,5 km wurde eine aus der Aerosol-Komponente „Mineralisch, (transportiert)“ bestehende Aerosol-Schicht eingelagert. Im „boundary layer“ (0 bis 2 km) wurde der saubere maritime Aerosol-Typ verwendet.



**Abbildung 7.6:** Der Einfluß des verschmutzten kontinentalen und des sauberen maritimen Aerosol-Typs auf die Radianz unter Berücksichtigung der Ozonabsorption. In den drei oberen Spektren sind Absolutwerte aufgetragen. Die untere gestrichelte Linie zeigt die relative Abweichung des verschmutzten kontinentalen Aerosol-Typs bezüglich der Referenzrechnung von bis zu 8 % bei einer Wellenlänge von etwa 400 nm. Unterhalb 280 nm beträgt die Abweichung aufgrund der starken stratosphärischen Ozonabsorption nahezu 0 %.

# Kapitel 8

## Zusammenfassung

Im Rahmen dieser Arbeit wurde eine Aerosol-Parametrisierung für Strahlungstransport-Simulationen im ultravioletten bis nahinfraroten Spektralbereich erarbeitet.

Um eine möglichst umfangreiche und flexible Beschreibung der Aerosol-Eigenschaften zu erreichen wurde zunächst eine Einteilung in geeignete *Aerosol-Komponenten* vorgenommen. Aus den mikrophysikalischen Eigenschaften dieser Komponenten, dem Brechungsindex und der Größenverteilung, wurden mittels Mie-Theorie deren optischen Eigenschaften, genauer die Extinktions- und Streukoeffizienten sowie die Phasenfunktionen, errechnet.

Diese optischen Eigenschaften der Aerosol-Komponenten wurden in einem Wellenlängenbereich von 236 bis 2500 nm in einer umfangreichen Aerosol-Datenbank zusammengestellt. Durch geeignete Gewichtung der Aerosol-Komponenten ist es mit dieser Datenbank möglich, die optischen Eigenschaften charakteristischer *Aerosol-Typen* zu erhalten. Unter Auswahl vertikaler Aerosol-Verteilungen war es hiermit möglich realistische Aerosol-Szenarien zu definieren.

Die auf diese Weise modellierten Aerosol-Eigenschaften wurden in das Strahlungstransportprogramm *SCIATRAN* implementiert. Mit dieser *SCIATRAN*-Aerosol-Parametrisierung ist es möglich, die spektrale Radianz am Oberrand der Atmosphäre zu berechnen. Durch Vergleich mit einer Referenzrechnung ohne Aerosole wurde der für charakteristische Aerosol-Szenarien zu erwartende Aerosol-Einfluß auf die spektrale Radianz bestimmt. Die Berechnung dieses Aerosol-Einflusses bildet eine wichtige Grundlage für die Datenauswertung des *SCIAMACHY* Satellitenspektrometers.

# **Anhang**



# Anhang A

## Datentabellen

Die für die Mie-Rechnung benötigten Parameter der Größenverteilung und der komplexe Brechungsindex werden in diesem Anhang in Tabellenform aufgelistet.

### A.1 Größenverteilungen

Es folgen fünf Tabellen mit den für die Größenverteilungen notwendigen Parametern. Die dafür verwendete Log-Normalverteilung wird in Kapitel 2.2 auf Seite 12 näher erläutert. Hierbei ist  $\sigma$  die Standardabweichung,  $r_M$  der Modenradius sowie  $r_{min}$  die untere und  $r_{max}$  die obere Integrationsgrenze.

Bei den vier hygroskopischen Aerosol-Komponenten wurde die relative Luftfeuchtigkeit mit „rel. F.“ abgekürzt, und  $\sigma$  ist jeweils unabhängig von der Feuchtigkeit.

rel. F. [%]	$\sigma$	$r_M$ [ $\mu\text{m}$ ]	$r_{min}$ [ $\mu\text{m}$ ]	$r_{max}$ [ $\mu\text{m}$ ]
0	2,239	0,0212	0,0050	20,0
50		0,0262	0,0060	25,0
70		0,0285	0,0064	27,4
80		0,0306	0,0067	29,8
90		0,0348	0,0071	35,0
95		0,0399	0,0074	42,8
98		0,0476	0,0078	58,5
99		0,0534	0,0079	74,9

*Tabelle A.1: Die Größenverteilungs-Parameter der wasserlöslichen Aerosol-Komponente [Koepke und Hess 1994].*

rel. F. [%]	$\sigma$	$r_M$ [ $\mu\text{m}$ ]	$r_{min}$ [ $\mu\text{m}$ ]	$r_{max}$ [ $\mu\text{m}$ ]
0	2,03	0,209	0,0050	20,0
50		0,336	0,0077	32,2
70		0,378	0,0085	36,3
80		0,416	0,0090	39,9
90		0,497	0,0099	47,8
95		0,605	0,0108	58,5
98		0,801	0,0115	78,3
99		0,995	0,0118	98,6

**Table A.2:** Die Größenverteilungs-Parameter der *Seesalz*, (Akkumulation) Aerosol-Komponente [Koepke und Hess 1994].

rel. F. [%]	$\sigma$	$r_M$ [ $\mu\text{m}$ ]	$r_{min}$ [ $\mu\text{m}$ ]	$r_{max}$ [ $\mu\text{m}$ ]
0	2,03	1,75	0,0050	20,0
50		2,82	0,0077	32,2
70		3,17	0,0085	36,3
80		3,49	0,0090	39,9
90		4,18	0,0099	47,8
95		5,11	0,0108	58,5
98		6,84	0,0115	78,3
99		8,59	0,0118	98,6

**Table A.3:** Die Größenverteilungs-Parameter der *grobkörnigen Seesalz* Aerosol-Komponente [Koepke und Hess 1994].

rel. F. [%]	$\sigma$	$r_M$ [ $\mu\text{m}$ ]	$r_{min}$ [ $\mu\text{m}$ ]	$r_{max}$ [ $\mu\text{m}$ ]
0	1,86	0,0695	0,0010	2,00
50		0,0980	0,0014	2,01
70		0,1090	0,0015	3,16
80		0,1180	0,0016	3,41
90		0,1350	0,0018	3,94
95		0,1580	0,0020	4,66
98		0,1950	0,0021	6,03
99		0,2310	0,0022	7,50

*Table A.4: Die Größenverteilungs-Parameter der **Sulfat** Aerosol-Komponente [Koepke und Hess 1994].*

Aerosol-Komponente	$\sigma$	$r_M$ [ $\mu\text{m}$ ]	$r_{min}$ [ $\mu\text{m}$ ]	$r_{max}$ [ $\mu\text{m}$ ]
Ruß	2,0	0,0118	0,0005	5,0
Unlöslich	2,512	0,471	0,005	20,0
Mineralisch, (Nukleation)	1,95	0,07	0,001	20,0
Mineralisch, (Akkumulation)	2,00	0,39	0,02	60,0
Mineralisch, (grobkörnig)	2,15	1,90	0,02	60,0
Mineralisch, (transportiert)	2,20	0,5	0,01	20,0
Vulkanische Asche	1,77	0,217	0,01	10,0
Meteoriten-Staub	3,162	0,03	0,0001	20,0

*Table A.5: Die Parameter der Größenverteilung der **nicht**-hygroskopischen Aerosol-Komponenten nach [WMO 1983, Koepke und Hess 1994, Jursa 1985].*

## A.2 Brechungsindex

In den Tabellen sind jeweils der Real- und Imaginärteil des komplexen Brechungsindex der Aerosol-Komponenten angegeben. In der linken Spalte befindet sich die Wellenlänge  $\lambda$ , in der Mitte der Realteil  $n_r$  und rechts der Imaginärteil  $n_i$  des komplexen Brechungsindex. Desweiteren sind in den Tabellen-Bezeichnungen die Aerosol-Komponenten Nummern 1 bis 12 und die Quelle der Daten angegeben.

$\lambda$ [ $\mu\text{m}$ ]	$n_r$	$n_i$
0.200	1.396	-0.110E-06
0.250	1.362	-0.335E-07
0.300	1.349	-0.160E-07
0.337	1.345	-0.845E-08
0.400	1.339	-0.186E-08
0.488	1.335	-0.969E-09
0.515	1.334	-0.118E-08
0.550	1.333	-0.196E-08
0.633	1.332	-0.146E-07
0.694	1.331	-0.305E-07
0.860	1.329	-0.329E-06
1.060	1.326	-0.418E-05
1.300	1.323	-0.369E-04
1.536	1.318	-0.997E-04
1.800	1.312	-0.115E-03
2.000	1.306	-0.110E-02
2.250	1.292	-0.390E-03
2.500	1.261	-0.174E-02

*Tabelle A.6: Der Brechungsindex von Wasser [Jursa 1985].*

$\lambda$ [ $\mu\text{m}$ ]	$n_r$	$n_i$
0.200	1.530	-7.00E-02
0.250	1.530	-3.00E-02
0.300	1.530	-8.00E-03
0.337	1.530	-5.00E-03
0.400	1.530	-5.00E-03
0.488	1.530	-5.00E-03
0.515	1.530	-5.00E-03
0.550	1.530	-6.00E-03
0.633	1.530	-6.00E-03
0.694	1.530	-7.00E-03
0.860	1.520	-1.20E-02
1.060	1.520	-1.70E-02
1.300	1.510	-2.00E-02
1.536	1.510	-2.30E-02
1.800	1.460	-1.70E-02
2.000	1.420	-8.00E-03
2.250	1.420	-1.00E-02
2.500	1.420	-1.20E-02

*Tabelle A.7: Der Brechungsindex der wasserlöslichen Aerosol-Komponente, Nr. 1 [WMO 1983].*

$\lambda$ [ $\mu\text{m}$ ]	$n_r$	$n_i$
0.200	1.510	-1.00E-04
0.250	1.510	-5.00E-06
0.300	1.510	-2.00E-06
0.337	1.510	-4.00E-07
0.400	1.500	-3.00E-08
0.488	1.500	-2.00E-08
0.515	1.500	-1.00E-08
0.550	1.500	-1.00E-08
0.633	1.490	-2.00E-08
0.694	1.490	-1.00E-07
0.860	1.480	-3.00E-06
1.060	1.470	-2.00E-04
1.300	1.470	-4.00E-04
1.536	1.460	-6.00E-04
1.800	1.450	-8.00E-04
2.000	1.450	-1.00E-03
2.250	1.440	-2.00E-03
2.500	1.430	-4.00E-03

*Tabelle A.8: Der Brechungsindex der Seesalz Aerosol-Komponenten, Nr. 2 und 3 [Jursa 1985].*

$\lambda$ [ $\mu\text{m}$ ]	$n_r$	$n_i$
0.200	1.498	-1.00E-08
0.250	1.484	-1.00E-08
0.300	1.469	-1.00E-08
0.337	1.459	-1.00E-08
0.400	1.440	-1.00E-08
0.488	1.432	-1.00E-08
0.515	1.431	-1.00E-08
0.550	1.430	-1.00E-08
0.633	1.429	-1.47E-08
0.694	1.428	-1.99E-08
0.860	1.425	-1.79E-07
1.060	1.420	-1.50E-06
1.300	1.410	-1.00E-05
1.536	1.403	-1.37E-04
1.800	1.390	-5.50E-04
2.000	1.384	-1.26E-03
2.250	1.370	-1.80E-03
2.500	1.344	-3.76E-03

**Tabelle A.9:** Der Brechungsindex der **Sulfat** Aerosol-Komponente, Nr. 4 [WMO 1983].

$\lambda$ [ $\mu\text{m}$ ]	$n_r$	$n_i$
0.200	1.530	-7.00E-02
0.250	1.530	-3.00E-02
0.300	1.530	-8.00E-03
0.337	1.530	-8.00E-03
0.400	1.530	-8.00E-03
0.488	1.530	-8.00E-03
0.515	1.530	-8.00E-03
0.550	1.530	-8.00E-03
0.633	1.530	-8.00E-03
0.694	1.530	-8.00E-03
0.860	1.520	-8.00E-03
1.060	1.520	-8.00E-03
1.300	1.460	-8.00E-03
1.536	1.400	-8.00E-03
1.800	1.330	-8.00E-03
2.000	1.260	-8.00E-03
2.250	1.220	-9.00E-03
2.500	1.180	-9.00E-03

**Tabelle A.10:** Der Brechungsindex der **unlöslichen** Aerosol-Komponente, Nr. 5 [WMO 1983].

$\lambda$ [ $\mu\text{m}$ ]	$n_r$	$n_i$
0.200	1.500	-0.350
0.250	1.620	-0.450
0.300	1.740	-0.470
0.337	1.750	-0.470
0.400	1.750	-0.460
0.488	1.750	-0.450
0.515	1.750	-0.450
0.550	1.750	-0.440
0.633	1.750	-0.430
0.694	1.750	-0.430
0.860	1.750	-0.430
1.060	1.750	-0.440
1.300	1.760	-0.450
1.536	1.770	-0.460
1.800	1.790	-0.480
2.000	1.800	-0.490
2.250	1.810	-0.500
2.500	1.820	-0.510

*Tabelle A.11: Der Brechungsindex der **Ruß** Aerosol-Komponente, Nr. 6 [WMO 1983].*

$\lambda$ [ $\mu\text{m}$ ]	$n_r$	$n_i$
0.200	1.530	-3.000E-02
0.250	1.530	-3.000E-02
0.300	1.530	-2.500E-02
0.350	1.530	-1.700E-02
0.400	1.530	-1.300E-02
0.450	1.530	-8.500E-03
0.500	1.530	-7.800E-03
0.550	1.530	-5.500E-03
0.600	1.530	-4.500E-03
0.650	1.530	-4.500E-03
0.700	1.530	-4.000E-03
0.750	1.530	-4.000E-03
0.800	1.530	-1.200E-03
0.900	1.530	-1.200E-03
1.000	1.530	-1.000E-03
1.250	1.530	-1.300E-03
1.500	1.420	-1.420E-03
1.750	1.370	-1.800E-03
2.000	1.267	-2.000E-03
2.500	1.180	-3.400E-03

*Tabelle A.12: Der Brechungsindex der **mineralischen** Aerosol-Komponenten, Nr. 7 bis 10 [Koepke und Hess 1994].*

$\lambda$ [ $\mu\text{m}$ ]	$n_r$	$n_i$
0.200	1.500	-7.00E-02
0.250	1.500	-3.00E-02
0.300	1.500	-1.00E-02
0.337	1.500	-8.00E-03
0.400	1.500	-8.00E-03
0.488	1.500	-8.00E-03
0.515	1.500	-8.00E-03
0.550	1.500	-8.00E-03
0.633	1.500	-8.00E-03
0.694	1.500	-8.00E-03
0.860	1.500	-8.00E-03
1.060	1.500	-8.00E-03
1.300	1.500	-8.00E-03
1.536	1.490	-8.00E-03
1.800	1.480	-8.00E-03
2.000	1.460	-8.00E-03
2.250	1.460	-8.00E-03
2.500	1.460	-9.00E-03

*Tabelle A.13: Der Brechungsindex der vulkanischen Asche, Nr. 11 [WMO 1983].*

$\lambda$ [ $\mu\text{m}$ ]	$n_r$	$n_i$
0.200	1.515	-1.23E-05
0.250	1.515	-2.41E-05
0.300	1.515	-4.18E-05
0.337	1.514	-5.94E-05
0.400	1.514	-9.95E-05
0.488	1.513	-1.81E-04
0.515	1.513	-2.13E-04
0.550	1.513	-2.61E-04
0.633	1.512	-3.99E-04
0.694	1.511	-5.30E-04
0.860	1.509	-1.02E-03
1.060	1.506	-1.95E-03
1.300	1.501	-3.72E-03
1.536	1.495	-6.34E-03
1.800	1.488	-1.06E-02
2.000	1.482	-1.51E-02
2.250	1.474	-2.24E-02
2.500	1.467	-3.18E-02

*Tabelle A.14: Der Brechungsindex von Meteoriten-Staub, Nr. 12 [Jursa 1985].*

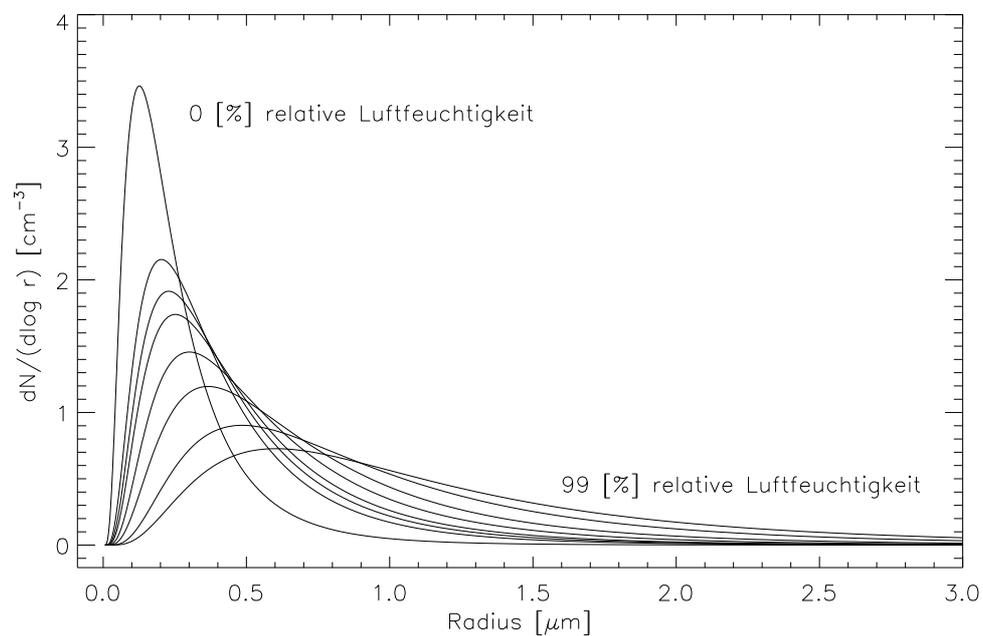
# Anhang B

## Abbildungen

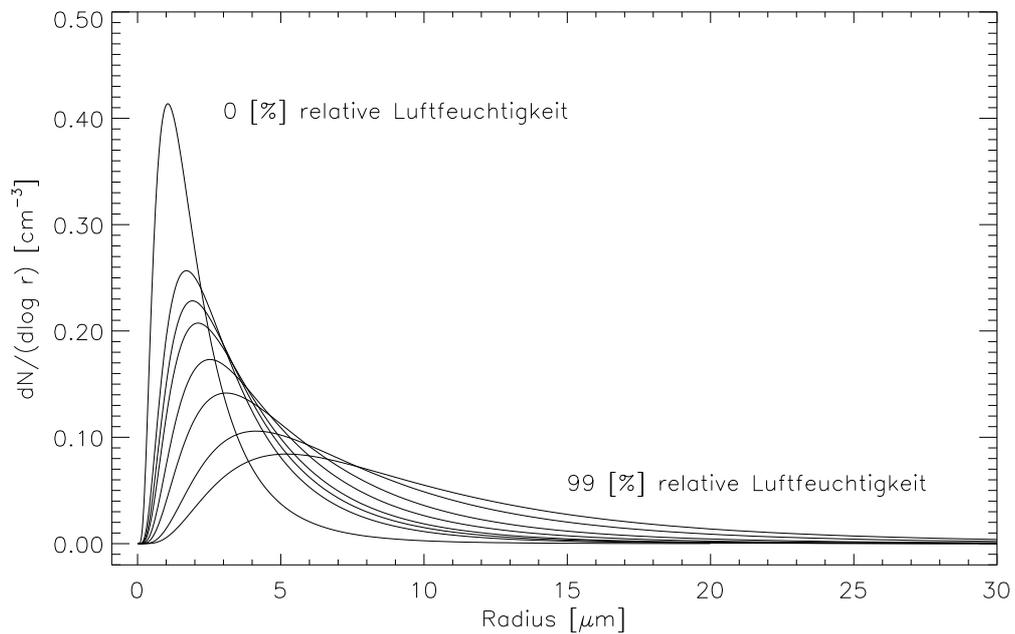
In diesem Anhang sind die Abbildungen der mikrophysikalischen und optischen Parameter der 12 *SCIATRAN*-Aerosol-Komponenten zu finden, also: Größenverteilung, Brechungsindex sowie Extinktions- und Streukoeffizient.

### B.1 Größenverteilungen

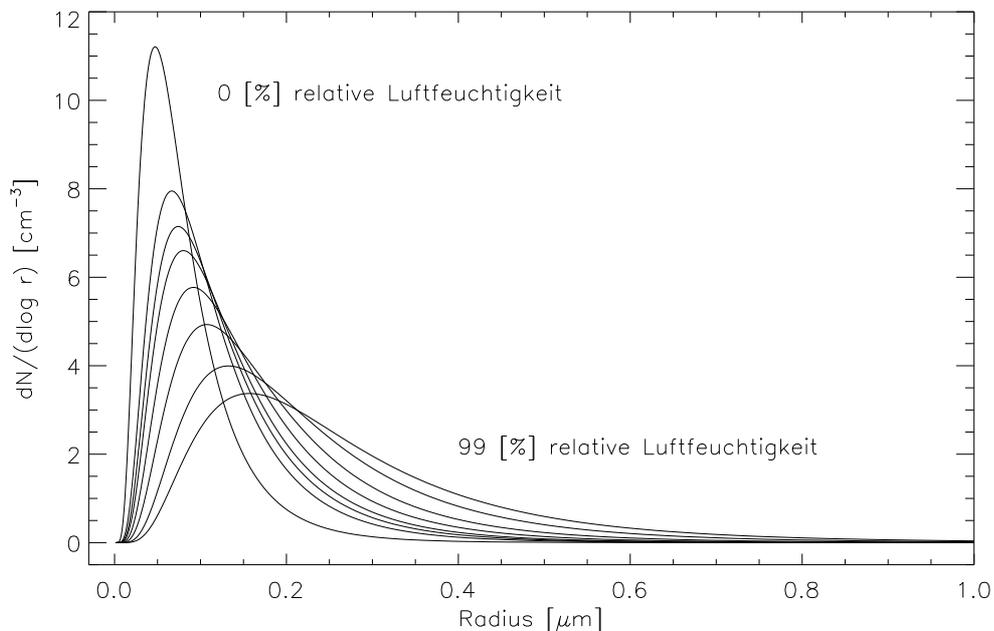
In den Abbildungen B.1, B.2 und B.3 sind die noch fehlenden Größenverteilungsdarstellungen der drei hygroskopischen Seesalz (Akkumulation und grobkörnig) und Sulfat Aerosol-Komponenten wiedergegeben. Die Darstellungen der Größenverteilungen der wasserlöslichen Aerosol-Komponente sind in Abbildung 2.1 auf Seite 14 zu finden. Um einen Überblick über die verschiedenen mineralischen Größenverteilungen zu bekommen sind sie in Abbildung B.4 auf Seite 63 zusammengestellt worden.



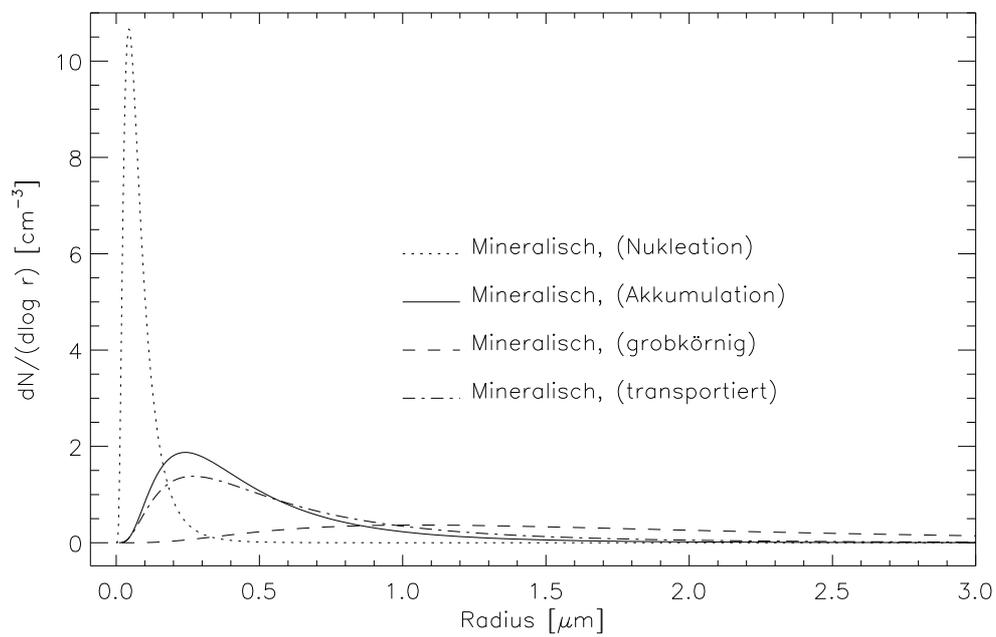
**Abbildung B.1:** Die Größenverteilungen der Seesalz (Akkumulation) Aerosol-Komponente in Abhängigkeit der relativen Luftfeuchtigkeit. Dargestellt wird die Größenverteilung für 8 Feuchtigkeits-Werte: 0, 50, 70, 80, 90, 95, 98 und 99 Prozent.



**Abbildung B.2:** Die Größenverteilungen der **grobkörnigen Seesalz** Aerosol-Komponente in Abhängigkeit der relativen Luftfeuchtigkeit. Dargestellt wird die Größenverteilung für 8 Feuchtigkeits-Werte: 0, 50, 70, 80, 90, 95, 98 und 99 Prozent.



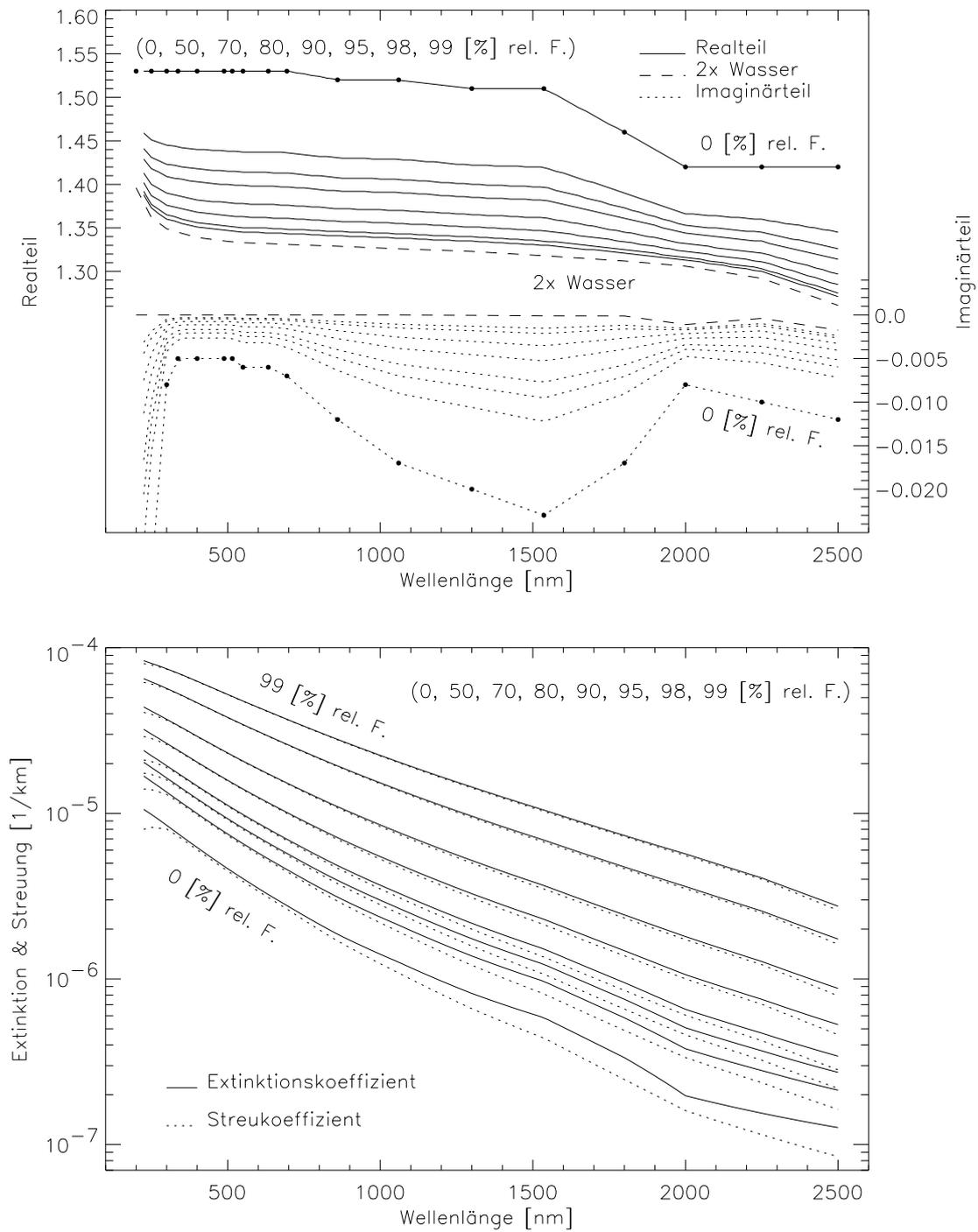
**Abbildung B.3:** Die Größenverteilungen der **Sulfat** Aerosol-Komponente in Abhängigkeit der relativen Luftfeuchtigkeit. Dargestellt wird die Größenverteilung für 8 Feuchtigkeits-Werte: 0, 50, 70, 80, 90, 95, 98 und 99 Prozent.



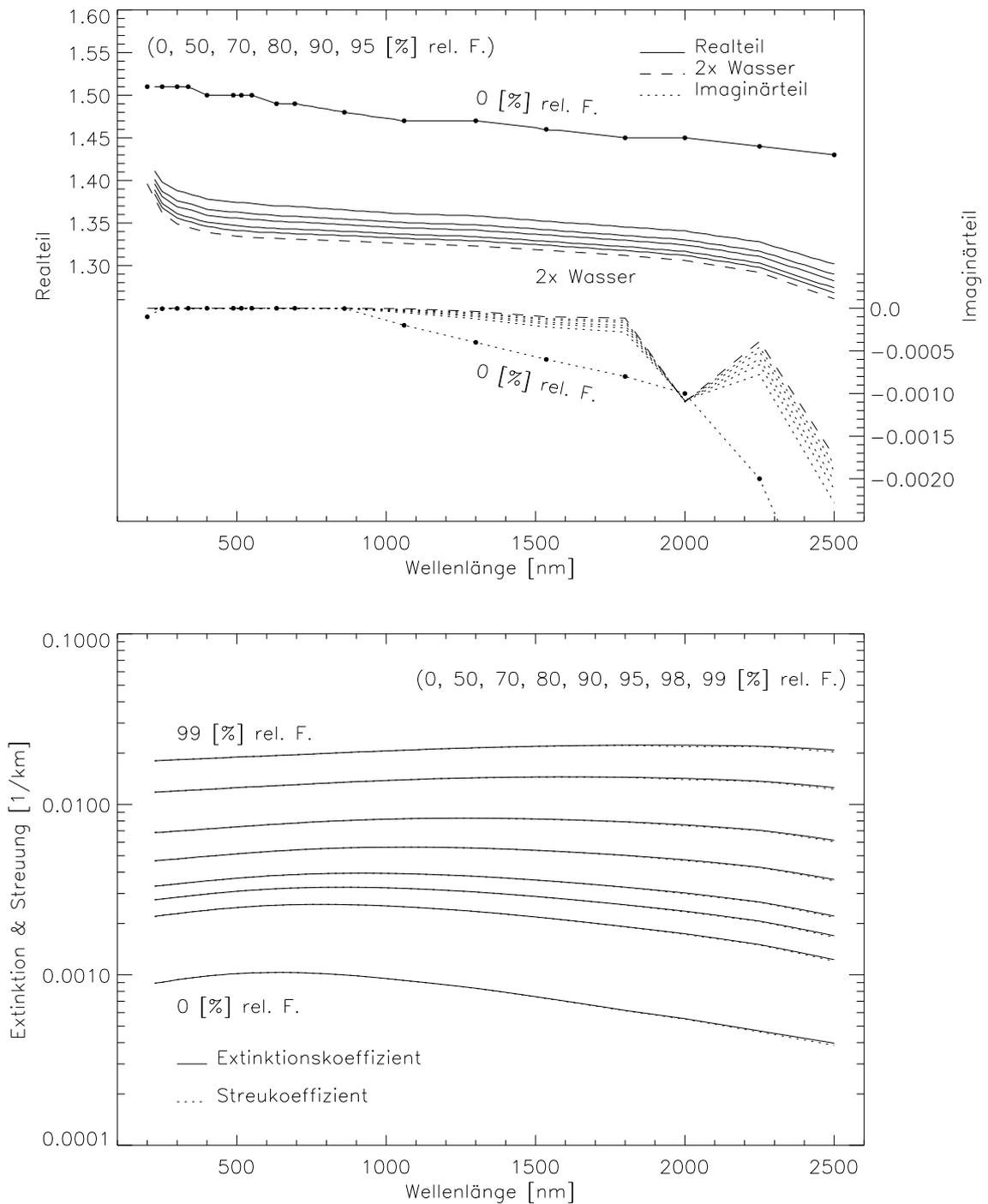
**Abbildung B.4:** Die Größenverteilungen der vier *mineralischen* Aerosol-Komponenten im Überblick.

## **B.2 Brechungsindex, Extinktions- und Streukoeffizienten**

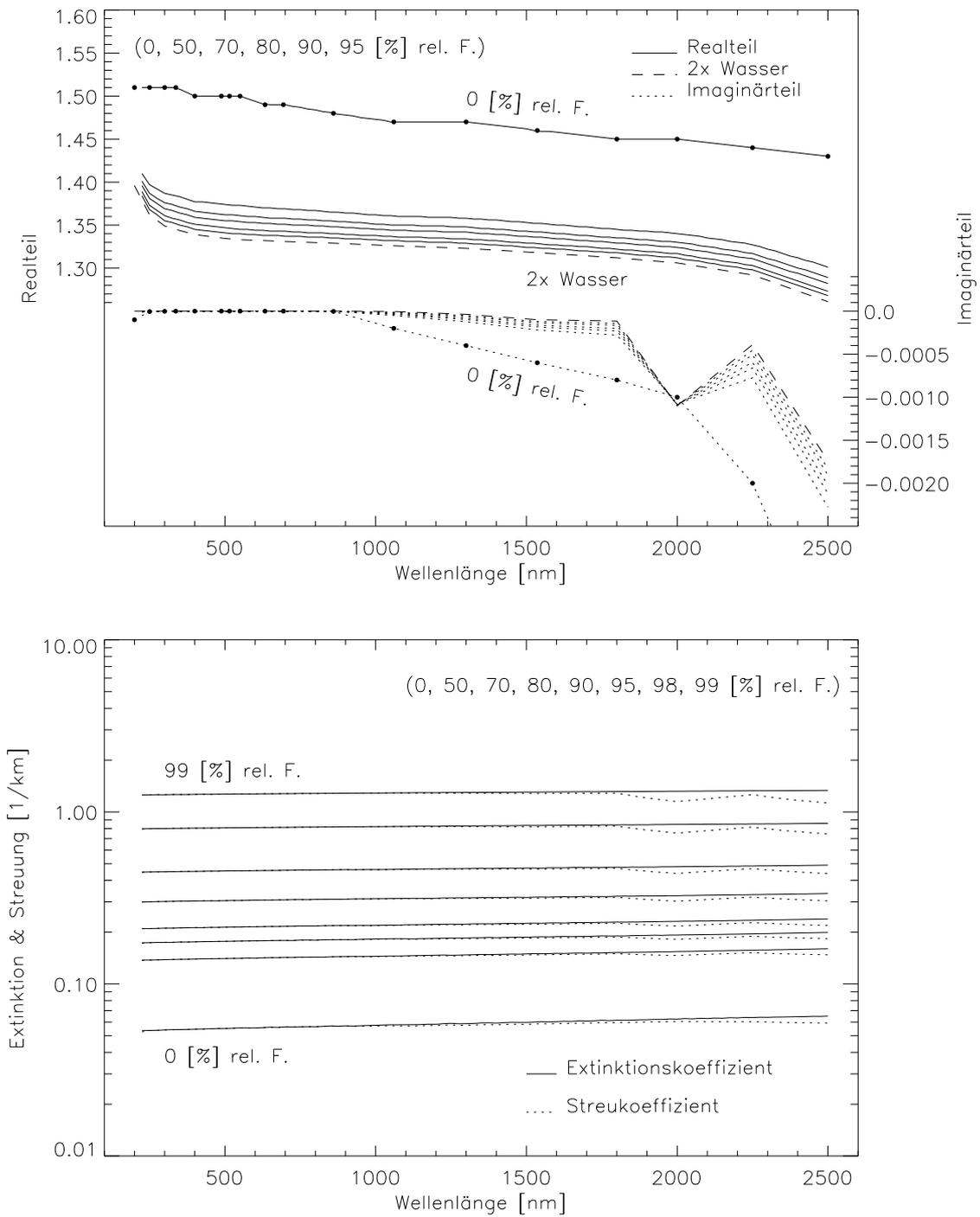
Auf den folgenden Seiten sind die Abbildungen des Brechungsindex sowie des Extinktions- und Streukoeffizienten zu finden. Bei den vier hygroskopisch Aerosol-Komponenten wurde relative Luftfeuchtigkeit durch "rel. F." abgekürzt. Die Extinktions- und Streukoeffizienten sind jeweils auf ein Teilchen pro  $\text{cm}^3$  normiert.



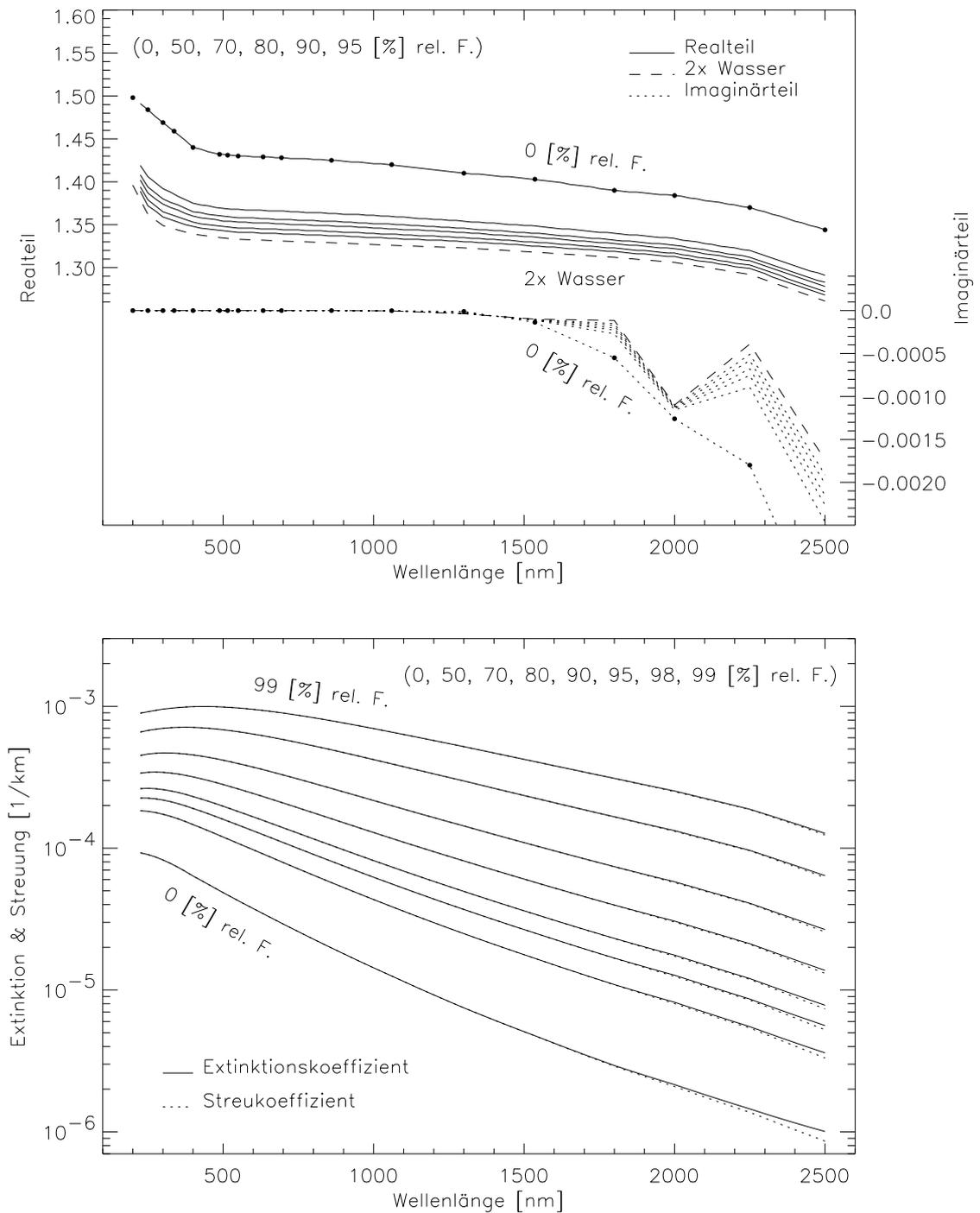
**Abbildung B.5:** *Oben: Brechungsindex. Unten: Extinktions- und Streukoeffizient der wasserlöslichen Aerosol-Komponente.*



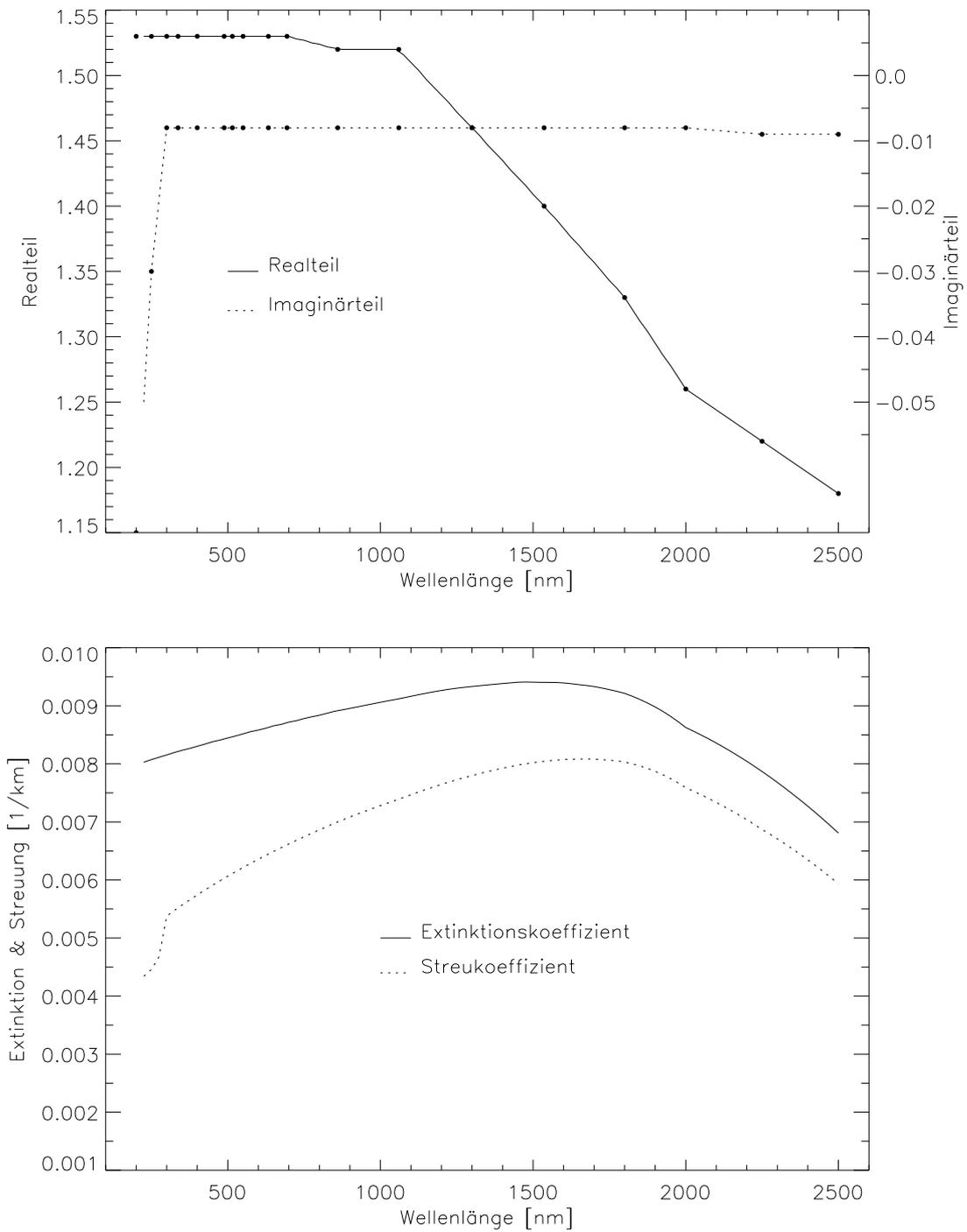
**Abbildung B.6:** Oben: Brechungsindex. Unten: Extinktions- und Streukoeffizient der Seesalz (Akkumulation) Aerosol-Komponente.



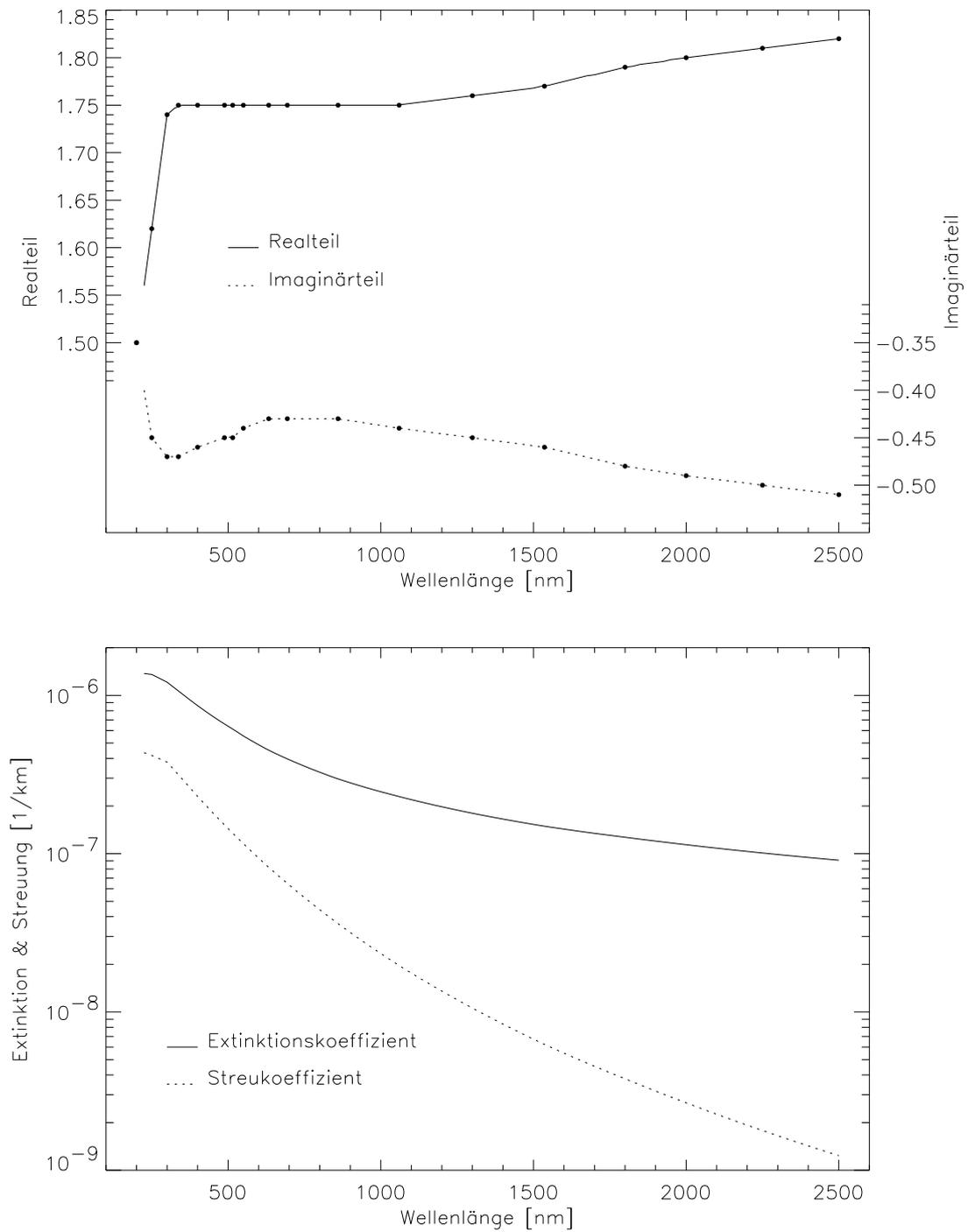
**Abbildung B.7:** Oben: Brechungsindex. Unten: Extinktions- und Streukoeffizient der Seesalz (grobkörnig) Aerosol-Komponente.



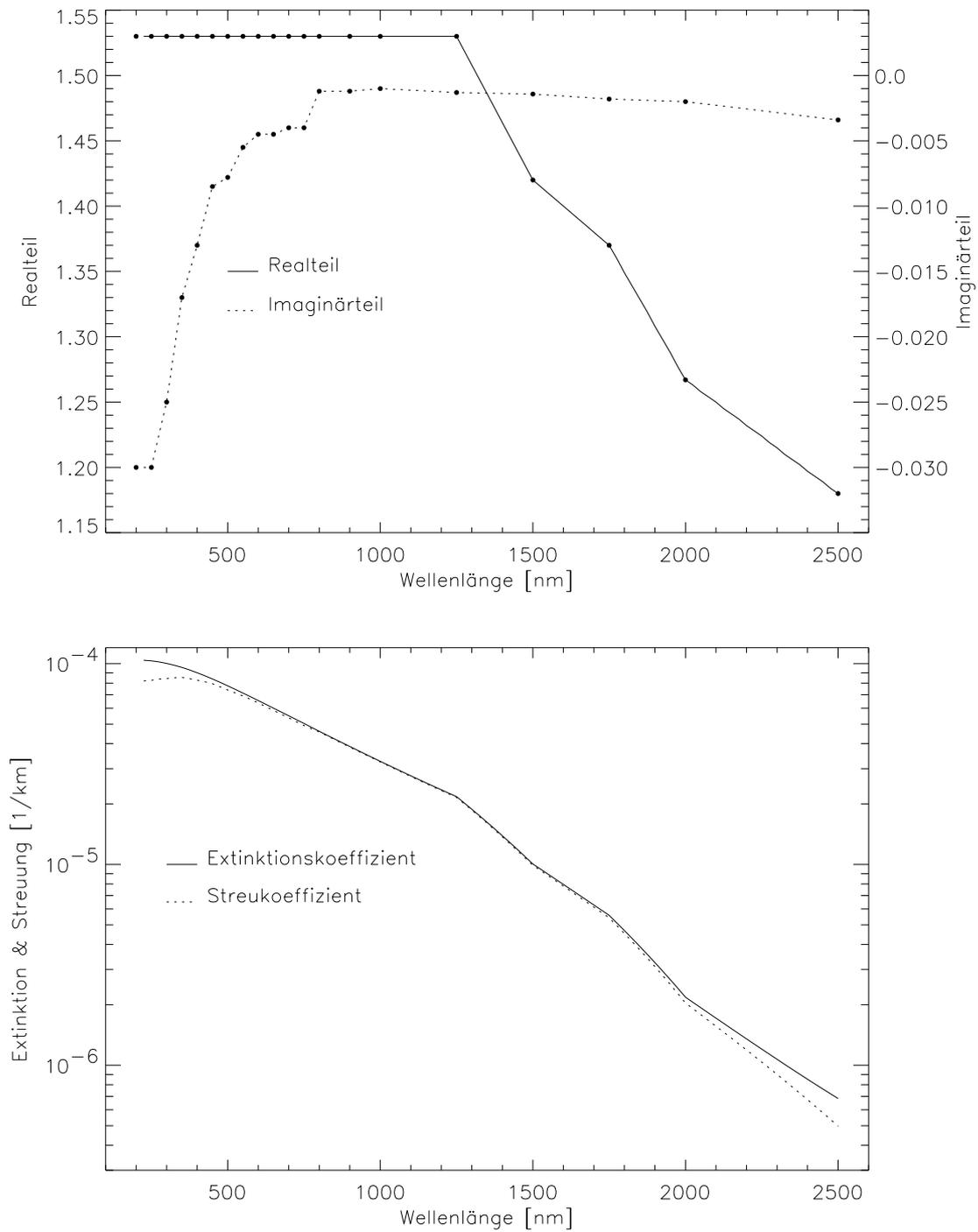
**Abbildung B.8:** Oben: Brechungsindex. Unten: Extinktions- und Streukoeffizient der Sulfat Aerosol-Komponente.



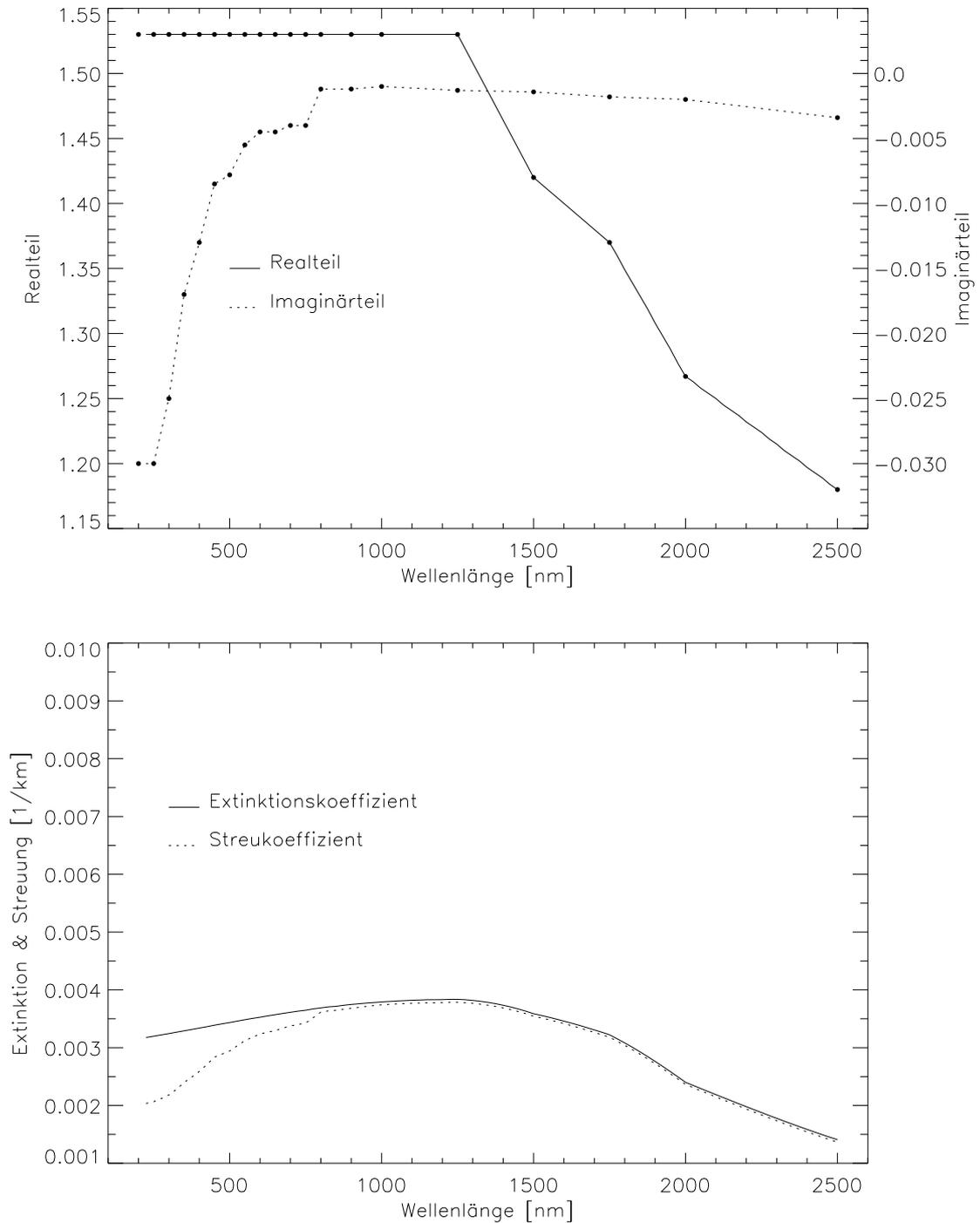
**Abbildung B.9:** *Oben: Brechungsindex. Unten: Extinktions- und Streukoeffizient der unlöslichen Aerosol-Komponente.*



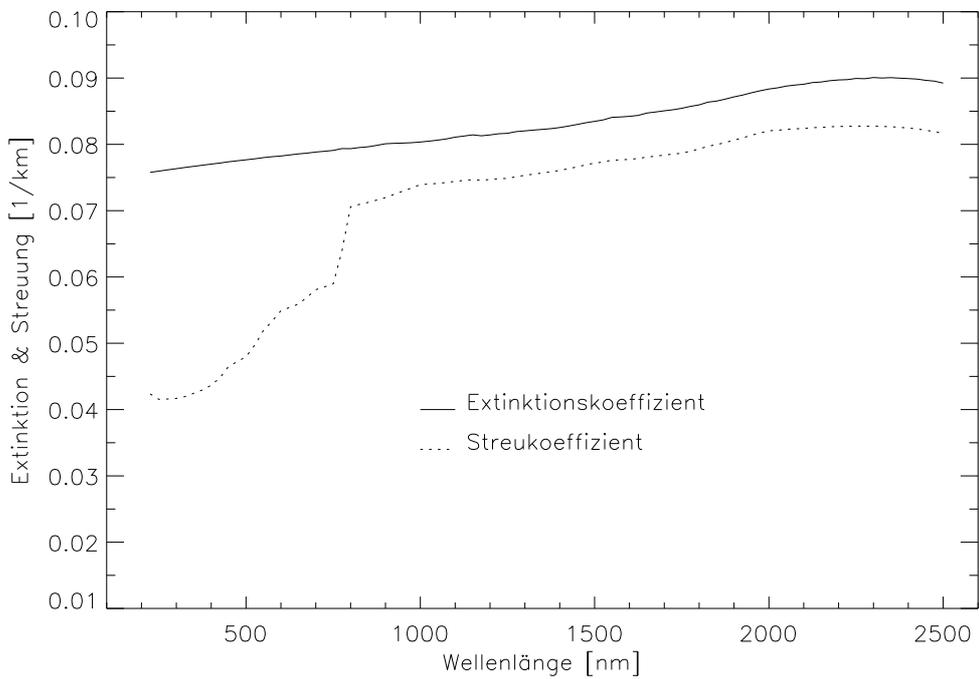
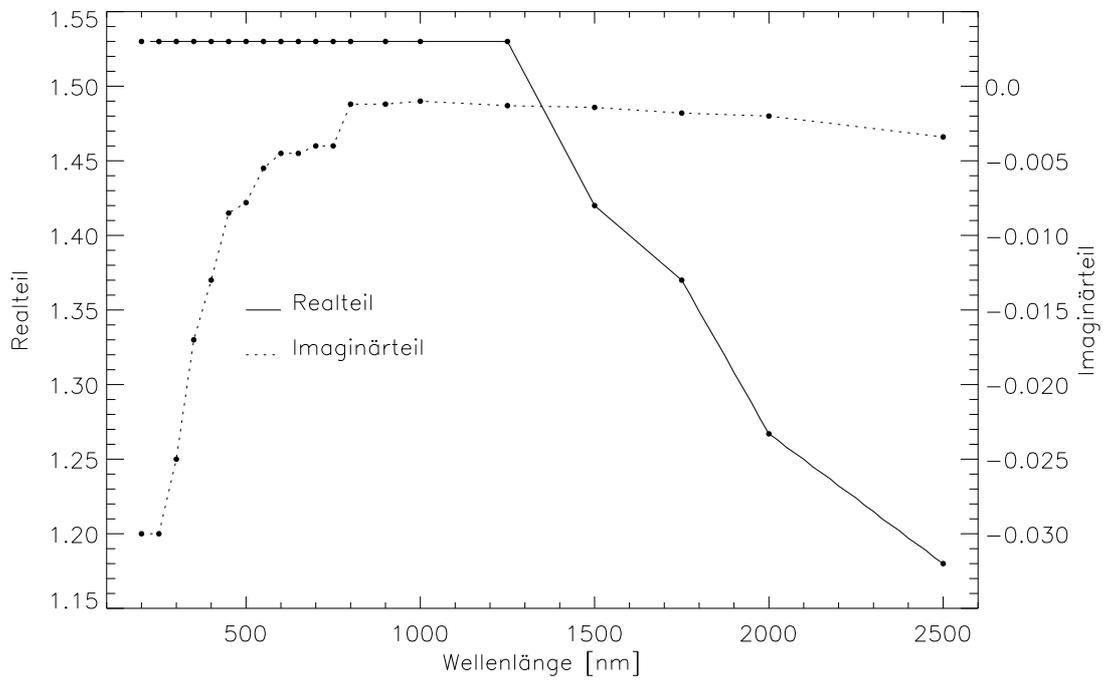
**Abbildung B.10:** Oben: Brechungsindex. Unten: Extinktions- und Streukoeffizient der Ruß Aerosol-Komponente.



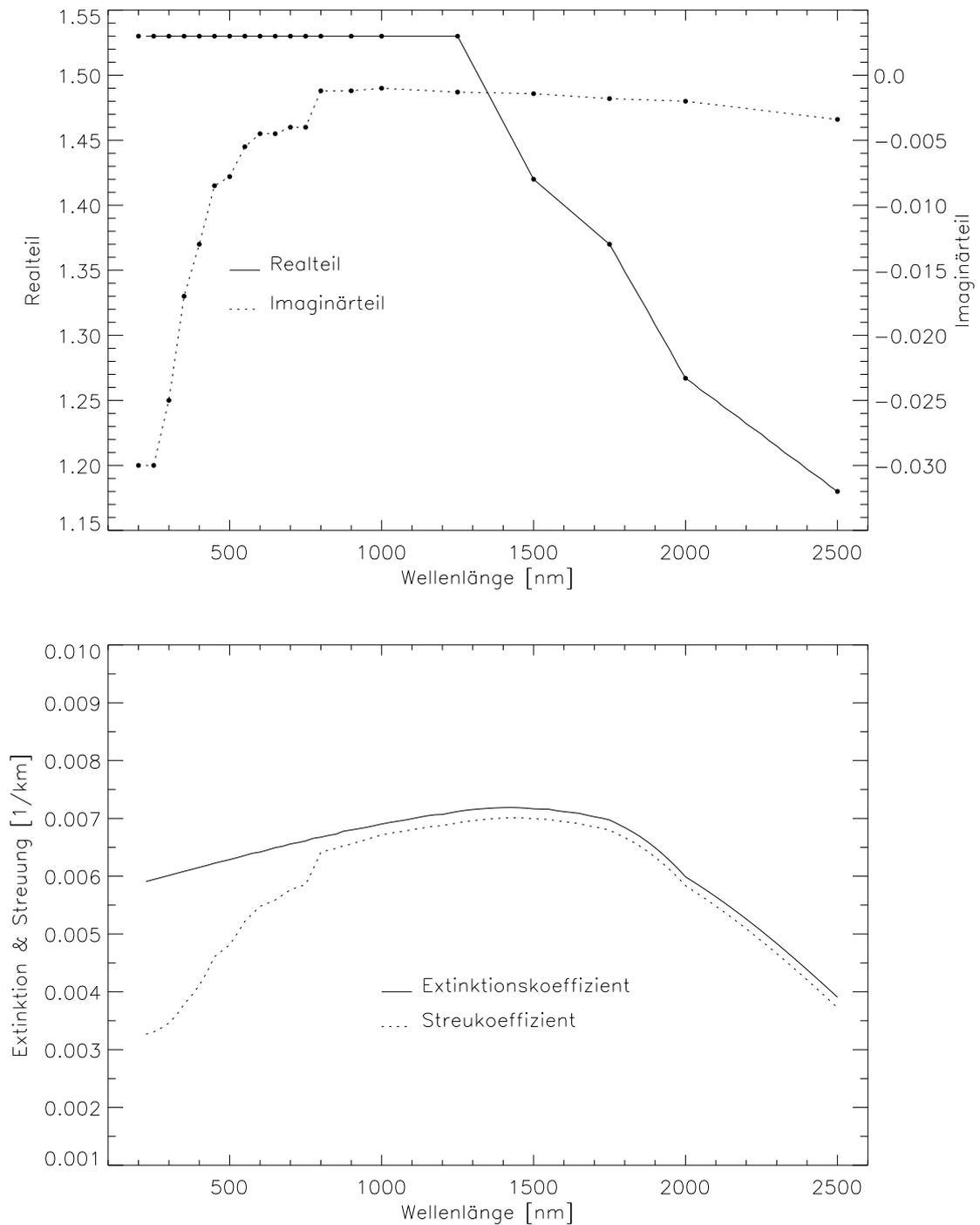
**Abbildung B.11:** Oben: Brechungsindex. Unten: Extinktions- und Streukoeffizient der mineralischen (Nukleation) Aerosol-Komponente.



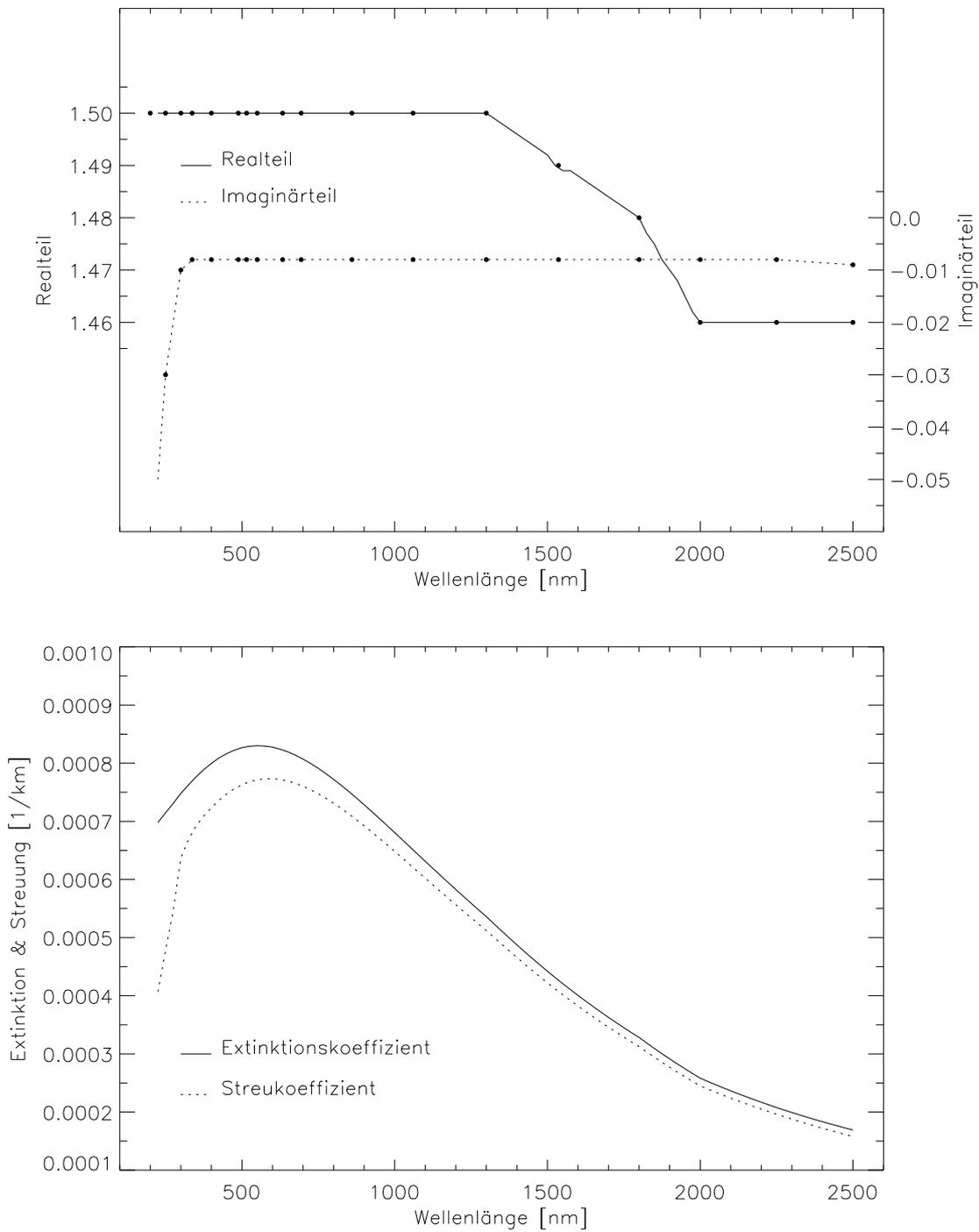
**Abbildung B.12:** Oben: Brechungsindex. Unten: Extinktions- und Streukoeffizient der mineralischen (Akkumulation) Aerosol-Komponente.



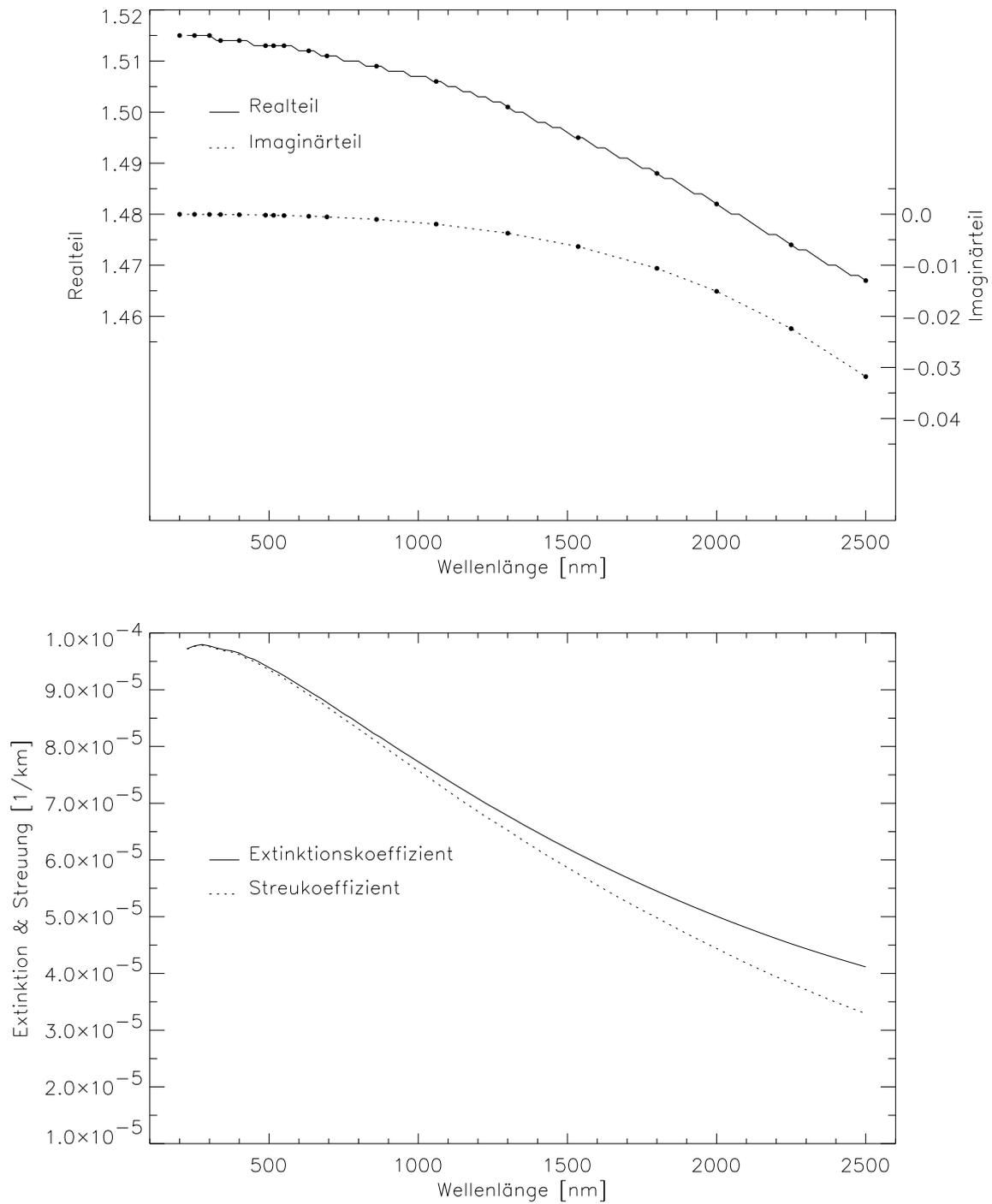
**Abbildung B.13:** Oben: Brechungsindex. Unten: Extinktions- und Streukoeffizient der mineralischen (grobkörnig) Aerosol-Komponente.



**Abbildung B.14:** Oben: Brechungsindex. Unten: Extinktions- und Streukoeffizient der mineralischen (transportiert) Aerosol-Komponente.



**Abbildung B.15:** Oben: Brechungsindex. Unten: Extinktions- und Streukoeffizient der vulkanischen Aerosol-Komponente.



**Abbildung B.16:** Oben: Brechungsindex. Unten: Extinktions- und Streukoeffizient der Aerosol-Komponente: **Meteoriten-Staub.**

# Anhang C

## Die *SCIATRAN* Aerosol-Datenbank

In diesem Anhang wird die *SCIATRAN* Aerosol-Datenbank in Auszügen wiedergegeben. Sie enthält die mittels Mie-Theorie berechneten Aerosol-Parameter Extinktions- und Streukoeffizienten sowie die 50 Legendre-Momente der Phasenfunktion. Da innerhalb von *SCIATRAN* die hygroskopischen Aerosol-Komponenten für jeden Wert der relativen Luftfeuchtigkeit „mitgezählt“ werden geht der „aerosol component index“ von 1 bis 40. Die Bedeutung der einzelnen Variablen ist in der Datei erklärt.

Mit diesen drei Zeilen:

```
*****  
*** etc. etc. etc.***  
*****
```

sind jeweils die Stellen markiert, an denen Bereiche der Datei aus Gründen der Platzeinsparung nicht wiedergegeben wurden.

Die Original-Datei mie\_aer\_lib.dat hat etwa eine Größe von 1,7 [MB].

```
C*****C  
C  
C      SCIATRAN - Version 1.1 - Last modification: 9 Sept 1998  
C  
C      Copyright (C) 1998, Institute of Remote Sensing,  
C                          University of Bremen, Germany  
C  
C*****C  
C Aerosol library data.  
C  
C                          =====  
C                          MIE PARAMETERIZATION  
C                          =====  
C  
C-----  
C Relative humidities [%] of data base:  
C  
C      DATA GT_AER_HUMS /  0., 50., 70., 80., 90., 95., 98., 99. /  
C
```

```

C -----
C Wavelengths [nm] of data base:
C
  DATA GT_AER_WAVS / 225.0, 250.0, 275.0, 300.0, 325.0,
$                   350.0, 400.0, 450.0, 500.0, 550.0,
$                   600.0, 650.0, 700.0, 750.0, 800.0,
$                   850.0, 900.0, 950.0, 1000.0, 1050.0,
$                   1100.0, 1150.0, 1200.0, 1250.0, 1300.0,
$                   1350.0, 1400.0, 1450.0, 1500.0, 1550.0,
$                   1600.0, 1650.0, 1700.0, 1750.0, 1800.0,
$                   1850.0, 1900.0, 1950.0, 2000.0, 2050.0,
$                   2100.0, 2150.0, 2200.0, 2250.0, 2300.0,
$                   2350.0, 2400.0, 2450.0, 2475.0, 2500.0 /
C
C -----
C Names of the various aerosol components:
C
C -----
C GT_COMP_TXT ( I )
C -----
C
C I = 1, 40 --> aerosol component index
C
  DATA GT_COMP_TXT / 'water sol. 0%' , 'water sol. 50%' ,
$                   'water sol. 70%' , 'water sol. 80%' ,
$                   'water sol. 90%' , 'water sol. 95%' ,
$                   'water sol. 98%' , 'water sol. 99%' ,
$                   'sea salt acc. 0%' , 'sea salt acc. 50%' ,
$                   'sea salt acc. 70%' , 'sea salt acc. 80%' ,
$                   'sea salt acc. 90%' , 'sea salt acc. 95%' ,
$                   'sea salt acc. 98%' , 'sea salt acc. 99%' ,
$                   'sea salt coa. 0%' , 'sea salt coa. 50%' ,
$                   'sea salt coa. 70%' , 'sea salt coa. 80%' ,
$                   'sea salt coa. 90%' , 'sea salt coa. 95%' ,
$                   'sea salt coa. 98%' , 'sea salt coa. 99%' ,
$                   'sulfate 0%' , 'sulfate 50%' ,
$                   'sulfate 70%' , 'sulfate 80%' ,
$                   'sulfate 90%' , 'sulfate 95%' ,
$                   'sulfate 98%' , 'sulfate 99%' ,
$                   'insoluble' , 'soot' ,
$                   'mineral nuc.' , 'mineral acc.' ,
$                   'mineral coarse' , 'mineral transp.' ,
$                   'fresh volcanic' , 'meteoric' /
C
C -----
C Extinction coefficients in [1/km]
C normalized to 1 particle per cm^3
C -----
C GT_AER_EXTCO ( I, J )
C -----
C
C I = 1, 40 --> aerosol component index

```

```

C
C           I = 1   water soluble  0 %
C           :     :   ( 50, 70, 80, 90, 95, 98 % rel.hum. )
C           I = 8   water soluble 99 %
C
C           I = 9   sea salt (acc. mode)  0 %
C           :     :   ( 50, 70, 80, 90, 95, 98 % rel.hum. )
C           I = 16  sea salt (acc. mode) 99 %
C
C           I = 17  sea salt (coarse mode)  0 %
C           :     :   ( 50, 70, 80, 90, 95, 98 % rel.hum. )
C           I = 24  sea salt (coarse mode) 99 %
C
C           I = 25  sulfate  0 %
C           :     :   ( 50, 70, 80, 90, 95, 98 % rel.hum. )
C           I = 32  sulfate 99 %
C
C           I = 33  insoluble
C           I = 34  soot
C           I = 35  mineral (nucleation mode)
C           I = 36  mineral (accumulation mode)
C           I = 37  mineral (coarse mode)
C           I = 38  mineral (transported)
C           I = 39  volcanic ash ( or fresh volcanic )
C           I = 40  meteoric dust
C
C J = 1, 50  --> wavelength index
C
C           J = 1...5    225,  250,  275,  300,  325,
C           J = 6...10   350,  400,  450,  500,  550,
C           J = 11...15  600,  650,  700,  750,  800,
C           J = 16...20  850,  900,  950, 1000, 1050,
C           J = 21...25 1100, 1150, 1200, 1250, 1300,
C           J = 26...30 1350, 1400, 1450, 1500, 1550,
C           J = 31...35 1600, 1650, 1700, 1750, 1800,
C           J = 36...40 1850, 1900, 1950, 2000, 2050,
C           J = 41...45 2100, 2150, 2200, 2250, 2300,
C           J = 46...50 2350, 2400, 2450, 2475, 2500 nm
C
C           DATA ( GT_AER_EXTCO ( 1, J ), J = 1, GT_N_AER_WAVS ) /
C           & 1.05642E-05, 9.85669E-06, 9.14956E-06, 8.46820E-06, 7.83178E-06,
C           & 7.24513E-06, 6.21760E-06, 5.35625E-06, 4.63549E-06, 4.03661E-06,
C           & 3.52700E-06, 3.09768E-06, 2.73474E-06, 2.41294E-06, 2.13905E-06,
C           & 1.90494E-06, 1.71406E-06, 1.55118E-06, 1.40954E-06, 1.28588E-06,
C           & 1.16897E-06, 1.06423E-06, 9.71893E-07, 8.90251E-07, 8.17861E-07,
C           & 7.57871E-07, 7.04169E-07, 6.55967E-07, 6.12591E-07, 5.67044E-07,
C           & 5.10417E-07, 4.59497E-07, 4.13635E-07, 3.72261E-07, 3.34876E-07,
C           & 2.95644E-07, 2.59834E-07, 2.27090E-07, 1.97098E-07, 1.87083E-07,
C           & 1.77913E-07, 1.69503E-07, 1.61779E-07, 1.54676E-07, 1.48135E-07,
C           & 1.42104E-07, 1.36536E-07, 1.31389E-07, 1.28962E-07, 1.26627E-07 /
C           DATA ( GT_AER_EXTCO ( 2, J ), J = 1, GT_N_AER_WAVS ) /
C           & 1.68004E-05, 1.55989E-05, 1.44969E-05, 1.34298E-05, 1.24583E-05,

```

```

& 1.15561E-05, 9.95755E-06, 8.62687E-06, 7.50264E-06, 6.56217E-06,
& 5.76678E-06, 5.09001E-06, 4.51182E-06, 4.00278E-06, 3.56556E-06,
& 3.18852E-06, 2.87295E-06, 2.60057E-06, 2.36231E-06, 2.15313E-06,
& 1.95981E-06, 1.78684E-06, 1.63353E-06, 1.49725E-06, 1.37578E-06,
& 1.27150E-06, 1.17788E-06, 1.09363E-06, 1.01764E-06, 9.41530E-07,
& 8.54695E-07, 7.76271E-07, 7.05330E-07, 6.41061E-07, 5.82747E-07,
& 5.24689E-07, 4.71706E-07, 4.23282E-07, 3.78964E-07, 3.55632E-07,
& 3.34234E-07, 3.14583E-07, 2.96511E-07, 2.79872E-07, 2.64028E-07,
& 2.49542E-07, 2.36287E-07, 2.24147E-07, 2.18464E-07, 2.13022E-07 /

```

```
*****
```

```
*** etc. etc. etc.***
```

```
*****
```

```

DATA ( GT_AER_EXTCO ( 39, J ), J = 1, GT_N_AER_WAVS ) /
& 6.98007E-04, 7.14606E-04, 7.30844E-04, 7.47996E-04, 7.62624E-04,
& 7.76429E-04, 7.99714E-04, 8.16443E-04, 8.26691E-04, 8.30056E-04,
& 8.27643E-04, 8.19559E-04, 8.07153E-04, 7.91197E-04, 7.72216E-04,
& 7.51235E-04, 7.28544E-04, 7.04873E-04, 6.80553E-04, 6.55919E-04,
& 6.31255E-04, 6.06797E-04, 5.82722E-04, 5.59111E-04, 5.36119E-04,
& 5.11440E-04, 4.87506E-04, 4.64407E-04, 4.42153E-04, 4.20850E-04,
& 4.00609E-04, 3.81238E-04, 3.62738E-04, 3.45093E-04, 3.28278E-04,
& 3.09385E-04, 2.91439E-04, 2.74417E-04, 2.58292E-04, 2.47120E-04,
& 2.36504E-04, 2.26415E-04, 2.16827E-04, 2.07713E-04, 1.99167E-04,
& 1.91049E-04, 1.83335E-04, 1.76003E-04, 1.72474E-04, 1.69032E-04 /

```

```

DATA ( GT_AER_EXTCO ( 40, J ), J = 1, GT_N_AER_WAVS ) /
& 9.72402E-05, 9.77432E-05, 9.79806E-05, 9.77294E-05, 9.73516E-05,
& 9.70445E-05, 9.64750E-05, 9.53492E-05, 9.39029E-05, 9.24887E-05,
& 9.08427E-05, 8.92107E-05, 8.75446E-05, 8.57569E-05, 8.41062E-05,
& 8.23163E-05, 8.06918E-05, 7.89804E-05, 7.73188E-05, 7.56678E-05,
& 7.40170E-05, 7.24087E-05, 7.08255E-05, 6.92755E-05, 6.77829E-05,
& 6.62707E-05, 6.48436E-05, 6.34119E-05, 6.20525E-05, 6.07068E-05,
& 5.93858E-05, 5.81205E-05, 5.68787E-05, 5.56694E-05, 5.44921E-05,
& 5.33415E-05, 5.22238E-05, 5.11364E-05, 5.00791E-05, 4.90492E-05,
& 4.80492E-05, 4.70783E-05, 4.61355E-05, 4.52202E-05, 4.43547E-05,
& 4.35156E-05, 4.27021E-05, 4.19133E-05, 4.15280E-05, 4.11485E-05 /

```

```
C
```

```
C -----
```

```
C Scattering coefficients in [1/km]
```

```
C normalized to 1 particle per cm3
```

```
C -----
```

```
C GT_AER_SCACO ( I, J )
```

```
C -----
```

```
C
```

```
C I = 1, 40 --> aerosol component index
```

```
C J = 1, 50 --> wavelength index
```

```
C
```

```

DATA ( GT_AER_SCACO ( 1, J ), J = 1, GT_N_AER_WAVS ) /
& 8.01449E-06, 8.24127E-06, 8.13193E-06, 8.03891E-06, 7.53397E-06,
& 7.01486E-06, 6.02198E-06, 5.18759E-06, 4.48813E-06, 3.88136E-06,
& 3.38861E-06, 2.96770E-06, 2.60071E-06, 2.26631E-06, 1.98240E-06,
& 1.74026E-06, 1.54526E-06, 1.37965E-06, 1.23588E-06, 1.11056E-06,
& 9.97199E-07, 8.96847E-07, 8.08518E-07, 7.30543E-07, 6.61515E-07,
& 6.04501E-07, 5.53559E-07, 5.07921E-07, 4.66934E-07, 4.26614E-07,

```

```
& 3.82210E-07, 3.42577E-07, 3.07166E-07, 2.75498E-07, 2.47154E-07,
& 2.21864E-07, 1.99151E-07, 1.78741E-07, 1.60392E-07, 1.49689E-07,
& 1.39872E-07, 1.30853E-07, 1.22555E-07, 1.14910E-07, 1.07856E-07,
& 1.01339E-07, 9.53099E-08, 8.97256E-08, 8.70878E-08, 8.45469E-08 /
  DATA ( GT_AER_SCACO ( 2, J ), J = 1, GT_N_AER_WAVS ) /
& 1.40029E-05, 1.39126E-05, 1.34669E-05, 1.30098E-05, 1.21688E-05,
& 1.13326E-05, 9.76672E-06, 8.46154E-06, 7.35751E-06, 6.40806E-06,
& 5.62872E-06, 4.95960E-06, 4.37651E-06, 3.85368E-06, 3.40525E-06,
& 3.01902E-06, 2.69842E-06, 2.42251E-06, 2.18138E-06, 1.96986E-06,
& 1.77969E-06, 1.61084E-06, 1.46131E-06, 1.32852E-06, 1.21027E-06,
& 1.10879E-06, 1.01779E-06, 9.35990E-07, 8.62279E-07, 7.91566E-07,
& 7.17786E-07, 6.51437E-07, 5.91693E-07, 5.37833E-07, 4.89218E-07,
& 4.44930E-07, 4.04850E-07, 3.68545E-07, 3.35631E-07, 3.12294E-07,
& 2.90892E-07, 2.71237E-07, 2.53163E-07, 2.36521E-07, 2.19178E-07,
& 2.03265E-07, 1.88648E-07, 1.75209E-07, 1.68897E-07, 1.62840E-07 /
*****
*** etc. etc. etc.***
*****
  DATA ( GT_AER_SCACO ( 39, J ), J = 1, GT_N_AER_WAVS ) /
& 4.06859E-04, 4.77581E-04, 5.45445E-04, 6.36971E-04, 6.68463E-04,
& 6.92408E-04, 7.23415E-04, 7.47068E-04, 7.63028E-04, 7.71484E-04,
& 7.73467E-04, 7.69301E-04, 7.60345E-04, 7.47451E-04, 7.31250E-04,
& 7.12743E-04, 6.92322E-04, 6.70693E-04, 6.48238E-04, 6.25310E-04,
& 6.02213E-04, 5.79195E-04, 5.56445E-04, 5.34070E-04, 5.12219E-04,
& 4.88652E-04, 4.65755E-04, 4.43618E-04, 4.22265E-04, 4.01801E-04,
& 3.82342E-04, 3.63706E-04, 3.45895E-04, 3.28897E-04, 3.12691E-04,
& 2.94416E-04, 2.77051E-04, 2.60575E-04, 2.44963E-04, 2.34219E-04,
& 2.24009E-04, 2.14306E-04, 2.05085E-04, 1.96320E-04, 1.87837E-04,
& 1.79781E-04, 1.72130E-04, 1.64860E-04, 1.61361E-04, 1.57951E-04 /
  DATA ( GT_AER_SCACO ( 40, J ), J = 1, GT_N_AER_WAVS ) /
& 9.71646E-05, 9.76454E-05, 9.78581E-05, 9.75953E-05, 9.71862E-05,
& 9.68486E-05, 9.62061E-05, 9.50163E-05, 9.35183E-05, 9.20016E-05,
& 9.02717E-05, 8.85486E-05, 8.67658E-05, 8.48549E-05, 8.30904E-05,
& 8.11981E-05, 7.93877E-05, 7.75434E-05, 7.57387E-05, 7.39647E-05,
& 7.21234E-05, 7.03079E-05, 6.85498E-05, 6.68600E-05, 6.52169E-05,
& 6.34759E-05, 6.18292E-05, 6.02075E-05, 5.86601E-05, 5.71271E-05,
& 5.55457E-05, 5.40373E-05, 5.25835E-05, 5.11770E-05, 4.98177E-05,
& 4.83852E-05, 4.70096E-05, 4.56865E-05, 4.44125E-05, 4.30849E-05,
& 4.18112E-05, 4.05879E-05, 3.94122E-05, 3.82814E-05, 3.71175E-05,
& 3.60027E-05, 3.49338E-05, 3.39082E-05, 3.34107E-05, 3.29232E-05 /
C
C -----
C Legendre moments of Mie phase function
C -----
C GT_AER_PHASMOMS ( K, I, J )
C -----
C K = 1, 40 --> aerosol component index
C I = 1, 50 --> wavelength index
C J = 1, 50 --> Legendre moment index
C
C Aerosol type 1 (water soluble 0% rel.hum.), wavelength = 225.
  DATA ( GT_AER_PHASMOMS ( 1, 1, J ), J = 1, 50 ) /
```

```

& 1.00000E+00, 7.12339E-01, 4.99397E-01, 3.31075E-01, 2.24442E-01,
& 1.54778E-01, 1.09169E-01, 7.92100E-02, 5.86766E-02, 4.42237E-02,
& 3.42119E-02, 2.64641E-02, 2.11815E-02, 1.67111E-02, 1.37105E-02,
& 1.10073E-02, 9.18693E-03, 7.49884E-03, 6.33281E-03, 5.25056E-03,
& 4.47222E-03, 3.76073E-03, 3.22548E-03, 2.74588E-03, 2.36981E-03,
& 2.03849E-03, 1.76985E-03, 1.53569E-03, 1.34107E-03, 1.17217E-03,
& 1.02934E-03, 9.05341E-04, 7.99238E-04, 7.06815E-04, 6.27064E-04,
& 5.57261E-04, 4.96640E-04, 4.43318E-04, 3.96746E-04, 3.55592E-04,
& 3.19463E-04, 2.87406E-04, 2.59119E-04, 2.33932E-04, 2.11601E-04,
& 1.91654E-04, 1.73888E-04, 1.57971E-04, 1.43735E-04, 1.30947E-04 /
C Aerosol type 1 (water soluble 0% rel.hum.), wavelength = 250.
  DATA ( GT_AER_PHASMOMS ( 1, 2, J ), J = 1, 50 ) /
& 1.00000E+00, 6.90686E-01, 4.76837E-01, 3.04262E-01, 2.01225E-01,
& 1.33997E-01, 9.21982E-02, 6.50468E-02, 4.72661E-02, 3.47869E-02,
& 2.66201E-02, 2.01082E-02, 1.60573E-02, 1.23467E-02, 1.01743E-02,
& 7.95066E-03, 6.68892E-03, 5.31774E-03, 4.52950E-03, 3.66721E-03,
& 3.14539E-03, 2.59215E-03, 2.23292E-03, 1.87021E-03, 1.61673E-03,
& 1.37313E-03, 1.19166E-03, 1.02361E-03, 8.92094E-04, 7.73365E-04,
& 6.77422E-04, 5.91574E-04, 5.20858E-04, 4.57686E-04, 4.04950E-04,
& 3.57727E-04, 3.18029E-04, 2.82251E-04, 2.51988E-04, 2.24634E-04,
& 2.01339E-04, 1.80211E-04, 1.62088E-04, 1.45651E-04, 1.31433E-04,
& 1.18529E-04, 1.07268E-04, 9.70624E-05, 8.80929E-05, 7.99665E-05 /
*****
*** etc. etc. etc.***
*****
C Aerosol type 40 (meteoric), wavelength =2475.
  DATA ( GT_AER_PHASMOMS (40, 49, J ), J = 1, 50 ) /
& 1.00000E+00, 7.09286E-01, 5.04329E-01, 3.35100E-01, 2.31405E-01,
& 1.62547E-01, 1.18013E-01, 8.87380E-02, 6.80311E-02, 5.38889E-02,
& 4.32177E-02, 3.54160E-02, 2.94004E-02, 2.46210E-02, 2.09728E-02,
& 1.78299E-02, 1.54782E-02, 1.33166E-02, 1.17184E-02, 1.01878E-02,
& 9.05233E-03, 7.94506E-03, 7.10845E-03, 6.29277E-03, 5.65882E-03,
& 5.04743E-03, 4.55723E-03, 4.09170E-03, 3.70691E-03, 3.34622E-03,
& 3.04025E-03, 2.75688E-03, 2.51150E-03, 2.28579E-03, 2.08748E-03,
& 1.90550E-03, 1.74388E-03, 1.59572E-03, 1.46314E-03, 1.34138E-03,
& 1.23195E-03, 1.13122E-03, 1.04029E-03, 9.56342E-04, 8.80353E-04,
& 8.10096E-04, 7.46289E-04, 6.87172E-04, 6.33311E-04, 5.83379E-04 /
C Aerosol type 40 (meteoric), wavelength =2500.
  DATA ( GT_AER_PHASMOMS (40, 50, J ), J = 1, 50 ) /
& 1.00000E+00, 7.09697E-01, 5.04417E-01, 3.35266E-01, 2.31389E-01,
& 1.62511E-01, 1.17919E-01, 8.86163E-02, 6.78994E-02, 5.37437E-02,
& 4.30768E-02, 3.52755E-02, 2.92662E-02, 2.44948E-02, 2.08516E-02,
& 1.77200E-02, 1.53713E-02, 1.32211E-02, 1.16255E-02, 1.01047E-02,
& 8.97142E-03, 7.87208E-03, 7.03794E-03, 6.22858E-03, 5.59749E-03,
& 4.99147E-03, 4.50393E-03, 4.04220E-03, 3.65967E-03, 3.30258E-03,
& 2.99918E-03, 2.71865E-03, 2.47554E-03, 2.25224E-03, 2.05570E-03,
& 1.87578E-03, 1.71582E-03, 1.56930E-03, 1.43812E-03, 1.31781E-03,
& 1.20954E-03, 1.10997E-03, 1.02009E-03, 9.37241E-04, 8.62212E-04,
& 7.92854E-04, 7.29870E-04, 6.71569E-04, 6.18492E-04, 5.69295E-04 /

```

Ende der SCIATRAN Aerosol-Datenbank.

# Abbildungsverzeichnis

2.1	Größenverteilung: Wasserlöslich . . . . .	14
2.2	Größenverteilung: Kleine Aerosol-Komponenten . . . . .	15
2.3	Größenverteilung: Große Aerosol-Komponenten . . . . .	15
2.4	Brechungsindex: Wasserlöslich . . . . .	17
4.1	Extinktions- und Streukoeffizienten der wasserlöslichen Komponente.	34
6.1	Drei Vertikal-Profile des Extinktionskoeffizienten . . . . .	38
7.1	Radianz: mineralisch, kontinental, urban . . . . .	43
7.2	Radianz von 7 Aerosol-Typen . . . . .	44
7.3	Radianz: Relativdarstellung Nr. 1 . . . . .	45
7.4	Radianz: Relativdarstellung Nr. 2 . . . . .	46
7.5	Aerosol-Szenario: mineralisch transportiert . . . . .	47
7.6	Radianz mit Ozonabsorption . . . . .	48
B.1	Größenverteilung: Seesalz, (Akkumulation) . . . . .	61
B.2	Größenverteilung: Seesalz, (grobkörnig) . . . . .	62
B.3	Größenverteilung: Sulfat . . . . .	62
B.4	Größenverteilung: Mineralisch, 4 Moden . . . . .	63
B.5	Eigenschaften: Wasserlöslich . . . . .	65
B.6	Eigenschaften: Seesalz, (Akkumulation) . . . . .	66
B.7	Eigenschaften: Seesalz, (grobkörnig) . . . . .	67
B.8	Eigenschaften: Sulfat . . . . .	68
B.9	Eigenschaften: Unlöslich . . . . .	69
B.10	Eigenschaften: Ruß . . . . .	70
B.11	Eigenschaften: Mineralisch, (Nukleation) . . . . .	71
B.12	Eigenschaften: Mineralisch, (Akkumulation) . . . . .	72
B.13	Eigenschaften: Mineralisch, (grobkörnig) . . . . .	73
B.14	Eigenschaften: Mineralisch, (transportiert) . . . . .	74
B.15	Eigenschaften: Vulkanische Asche . . . . .	75
B.16	Eigenschaften: Meteoriten-Staub . . . . .	76



# Tabellenverzeichnis

2.1	<i>SCIATRAN</i> Aerosol-Komponenten . . . . .	9
6.1	Vergleich der optischen Dicke: <i>OPAC</i> , <i>SCIATRAN</i> . . . . .	39
6.2	<i>OPAC</i> Aerosol-Typen . . . . .	40
A.1	Größenverteilung: Wasserlöslich . . . . .	52
A.2	Größenverteilung: Seesalz, (Akkumulation) . . . . .	53
A.3	Größenverteilung: Seesalz, (grobkörnig) . . . . .	53
A.4	Größenverteilung: Sulfat . . . . .	54
A.5	Die Größenverteilungen der nicht-hygrokopischen Komponenten . .	54
A.6	Brechungsindex von Wasser . . . . .	55
A.7	Brechungsindex: Wasserlöslich . . . . .	56
A.8	Brechungsindex: Seesalz . . . . .	56
A.9	Brechungsindex: Sulfat . . . . .	57
A.10	Brechungsindex: Unlöslich . . . . .	57
A.11	Brechungsindex: Ruß . . . . .	58
A.12	Brechungsindex: Mineralisch . . . . .	58
A.13	Brechungsindex: Vulkanische Asche . . . . .	59
A.14	Brechungsindex: Meteoriten-Staub . . . . .	59



# Literaturverzeichnis

- [Bohren und Huffman 1983] Bohren, C. F. und Huffman, D. R., 1983. *Absorption and Scattering of Light by Small Particles*. John Wiley & Sons, New York.
- [Buchwitz 1997] Buchwitz, M., 1997. *GOMETRAN++ User's Guide, Version 2.9*. Institut für Umweltphysik, Universität Bremen.
- [Burrows *et al.* 1990] Burrows, J. P., Schneider, W., und Chance, K. V., 1990. GOME and SCIAMACHY: Remote sensing of stratospheric and tropospheric gases. In *European Commission Air Pollution Research Report 34, Proc. 1st European Workshop on Polar Stratospheric Ozone*, Seiten 99–102, Schliersee, Germany, 3-5 October.
- [Burrows *et al.* 1995] Burrows, J. P., Hölzle, E., Goede, A. P. H., Visser, H., und Fricke, W., 1995. SCIAMACHY - Scanning Imaging Absorption Spectrometer for Atmospheric Cartography. *Acta Astronautica*, **35**, 445–451.
- [d'Almeida *et al.* 1991] d'Almeida, G. A., Koepke, P., und Shettle, E. P., 1991. *Atmospheric Aerosols: Global Climatology and Radiative Characteristics*. A. Deepak Publishing.
- [Davies 1974] Davies, C. N., 1974. Size distribution of atmospheric particles. *Aerosol Science*, **5**, 293–300.
- [Eichmann 1995] Eichmann, K.-U., Juni 1995. Optimierung und Validierung des pseudo-sphärischen Strahlungstransportmodells GOMETRAN. Diplomarbeit, Institut für Umweltphysik, Universität Bremen.
- [George 1995] George, U., März 1995. Durch die Wüste lebt der Regenwald. *GEO, Das neue Bild der Erde*, **3**, 14–40.
- [Gras 1991] Gras, J. L., March 1991. Southern Hemisphere Tropospheric Aerosol Microphysics. *Journal of Geophysical Research*, **96**(D3), 5345–5356.
- [Guzzi *et al.* 1998] Guzzi, R., Cattani, E., Cervino, M., Levoni, C., Torricella, F., Kurosu, T., und Burrows, J. P., February 1998. GOME Cloud and Aerosol Data Products Algorithms Development (CADAPA). Final Report, European Space Agency. ESA Contract 11572/95/NL/CN.

- [Heinemann 1995] Heinemann, T., 1995. Satellitengestützte Fernerkundung von Aerosolen. Diplomarbeit, Institut für Weltraumwissenschaften, Freie Universität Berlin. Strahlung in Atmosphäre und Ozean, Beiträge zur Fernerkundung, Heft 1.
- [Hess *et al.* 1998] Hess, M., Koepke, P., und Schult, I., May 1998. Optical Properties of Aerosols and Clouds: The Software Package OPAC. *Bulletin of the American Meteorological Society*, **79**(5), 831–844.
- [Hänel und Zankl 1979] Hänel, G. und Zankl, B., 1979. Aerosol size and relative humidity: water uptake by mixtures of salts. *Tellus*, **31**, 478–486.
- [Hobbs *et al.* 1985] Hobbs, P. V., Bowdle, D. A., und Radke, L. F., 1985. Particles in the Lower Troposphere over the High Plains of the United States. Part I: Size Distributions, Elemental Compositions and Morphologies. *Journal of Climate and Applied Meteorology*, **24**, 1344–1356.
- [Hoogen 1995a] Hoogen, R., 1995. *Aerosol Parameterization in GOMETRAN++*. Institut für Umweltphysik, Universität Bremen. Technischer Bericht.
- [Hoogen 1995b] Hoogen, R., 1995. *Mie Theory Outline & IUPMIE User's Guide*. Institut für Umweltphysik, Universität Bremen. Technischer Bericht.
- [Jaenicke 1992] Jaenicke, R., 1992. Vertical Distribution of Atmospheric Aerosols. In Fukuta, N. und Wagner, P. E., Editoren, *Nucleation and Atmospheric Aerosols, Proceedings of the Thirteenth International Conference on Nucleation and Atmospheric Aerosols*, Seiten 417–425. A. Deepak Publishing. ISBN 0-937194-26-3.
- [Jaenicke 1993] Jaenicke, R., 1993. Tropospheric Aerosols. In Hobbs, P. V., Editor, *Aerosol-Cloud-Climate Interactions*, Kapitel 1, Seiten 1–31. Academic Press.
- [Joussaume 1990] Joussaume, S., February 1990. Three-Dimensional Simulations of the Atmospheric Cycle of Desert Dust Particles Using a General Circulation Model. *Journal of Geophysical Research*, **95**(D2), 1909–1941.
- [Jursa 1985] Jursa, A. S., Editor, 1985. *Optical and infrared properties of the atmosphere*, Kapitel 18. Air Force Geophysics Laboratory AFGL. Handbook of Geophysics and the Space Environment, AFGL-TR-85-0315, AD-A167 00.
- [Kneizys *et al.* 1986] Kneizys, F. X., Shettle, E. P., Abreu, L. W., Chetwynd, J. H., Anderson, G. P., Gallery, W. O., Selby, J. E. A., und Clough, S. A., 1986. Users Guide to LOWTRAN 7. Technical Report, Air Force Geophysics Laboratory AFGL. TR-88-0177.

- [Koepke *et al.* 1997] Koepke, P., Hess, M., Schult, I., und Shettle, E. P., September 1997. Global Aerosol Data Set. Technischer Bericht, Max-Planck-Institut für Meteorologie Hamburg. ISSN 0937-1060, Report No. 243.
- [Koepke und Hess 1994] Koepke, P. und Hess, M., Mai 1994. *Manual for the database OPAC, Optical Properties of Aerosols and Clouds, Version 1.0*. Meteorologisches Institut der Universität München.
- [Kurosu 1997] Kurosu, T., 1997. *Die Modellierung des Strahlungstransports in Wolken für atmosphärische Fernerkundung im ultravioletten und sichtbaren Spektralbereich*. Doktorarbeit, Institut für Umweltphysik, Universität Bremen. Mainz Verlag, Aachen, ISBN 3-89653-185-9.
- [Kurosu 1998] Kurosu, T., 1998. PMD cloud detection algorithm for the GOME instrument. Final Report, European Space Agency. Annex to the ESA CADAPA Study Contract No. 11572/95/NL/CN.
- [Liou 1980] Liou, K.-N., 1980. *An Introduction to Atmospheric Radiation*. Academic Press, San Diego.
- [McCormick *et al.* 1993] McCormick, M. P., Wang, P.-H., und Poole, L. R., 1993. Stratospheric Aerosols and Clouds. In Hobbs, P. V., Editor, *Aerosol-Cloud-Climate Interaction*, Kapitel 8, Seiten 205–222. Academic Press.
- [Mie 1908] Mie, G., 1908. Beiträge zur Optik trüber Medien, speziell kolloidaler Metallösungen. *Annalen der Physik*, **25**, 377–445.
- [Quenzel und Müller 1978] Quenzel, H. und Müller, H., 1978. Optical properties of single Mie particles: Diagrams of intensity-, extinction-, scattering-, and absorption efficiencies. Technischer Bericht, Meteorologisches Institut der Universität München. Nr. 34.
- [Rozanov *et al.* 1997] Rozanov, V. V., Diebel, D., Spurr, R. J. D., und Burrows, J. P., 1997. GOMETRAN: A radiative transfer model for the satellite project GOME, the plane-parallel version. *Journal of Geophysical Research*, **102**, 16683–16695.
- [Sasano 1996] Sasano, Y., August 1996. Tropospheric aerosol extinction coefficient profiles derived from scanning lidar measurements over Tsukuba, Japan, from 1990 to 1993. *Applied Optics*, **35**(24), 4941–4952.
- [Schutz *et al.* 1990] Schutz, L. W., Prospero, J. M., Buat-Ménard, P., Harriss, R., Carvalho, R. A. C., Heidam, N. Z., Cruzado, A., und Jaenicke, R., 1990. The Long-Range Transport of Mineral Aerosols: Group report. In Knap, A. H., Editor, *The Long-Range Atmospheric Transport of Natural and Contaminant Substances*, Band 297 der Reihe *NATO ASI Series, C: Mathematical and Physical Sciences*, Seiten 197–229. Kluwer Academic Publishers.

- [Shaw 1980] Shaw, G. E., November 1980. Transport of Asian Desert Aerosol to the Hawaiian Islands. *Journal of Applied Meteorology*, **19**, 1254–1980.
- [Shettle und Fenn 1979] Shettle, E. P. und Fenn, R. W., 1979. Models of the aerosols of the lower atmosphere and the effects of humidity variations on their optical properties. Technical Report, Air Force Geophysics Laboratory AFGL. AFGL-TR-79-0214, ADA 085951.
- [Teillet *et al.* 1994] Teillet, P. M., Fedosejevs, G., Ahern, F. J., und Gauthier, R. P., June 1994. Sensitivity of surface reflectance retrieval to uncertainties in aerosol optical properties. *Applied Optics*, **33**(18), 3933–3940.
- [Twomey 1977] Twomey, S., 1977. *Atmospheric Aerosols*. Elsevier Scientific Publishing Company.
- [vdH 1981] van de Hulst, H. C., 1981. *Light Scattering by Small Particles*. Dover Publications, New York.
- [Wiscombe 1979] Wiscombe, W. J., June 1979. Mie Scattering Calculations: Advances in Technique and Fast, Vector-Speed Computer Codes. Technical Note, National Center for Atmospheric Research, Boulder, Colorado. edited/revised August 1996, NCAR/TN-140+STR.
- [Wiscombe 1980] Wiscombe, W., May 1980. Improved Mie Scattering Algorithms. *Applied Optics*, **19**, 1505–1509.
- [WMO 1983] WMO, 1983. Report on the experts meeting on aerosols and their climatic effects. In Deepak, A. und Gerber, H. E., Editoren, *World Climate Research Programme*. World Meteorological Organization. WCP-55.

# Danke!

Zu guter Letzt möchte ich mich noch bei den Menschen bedanken, die zur Entstehung dieser Arbeit beigetragen haben.

Herrn *Prof. Dr. John P. Burrows* danke ich für die Überlassung des interessanten Themas. Der gesamten Arbeitsgruppe des IUP/IFE danke ich für die äußerst herzliche Atmosphäre, die sich nicht nur auf die Arbeit beschränkte.

*Michael Buchwitz* und *Ricarda Hoogen* waren in allen Fragen der Aerosol-Modellierung und des Strahlungstransports die wichtigsten Ansprechpartner.

*Bremen, im November 1998*

