

Untersuchung von Spurengasaustausch an Transportbarrieren mit flugzeuggetragenen Messungen in der unteren Stratosphäre

Dissertation
zur Erlangung des Grades
“Doktor
der Naturwissenschaften”
am Fachbereich Physik, Mathematik und Informatik
der Johannes Gutenberg-Universität
in Mainz

Hans-Christoph Lachnitt
geboren in Mainz

Mainz, den 17.05.2022

Datum der mündlichen Prüfung: 18. April 2023

Zusammenfassung

Die obere Troposphäre und untere Stratosphäre (UTLS) ist eine Übergangsregion zwischen den beiden sehr unterschiedlichen Atmosphärenschichten Troposphäre und Stratosphäre. Die Zusammensetzung und die Verteilung von Spurengasen in der UTLS hat einen großen Einfluss auf das Strahlungsbudget der Atmosphäre und damit auf das Erdklima. Innerhalb der UTLS gibt es verschiedene Transportbarrieren, die einen direkten Austausch zwischen verschiedenen Regionen, bzw. Atmosphärenschichten (Höhenbereichen) erschweren. So trennt beispielsweise die Tropopause stratosphärische und troposphärische Luftmassen, oder im späten Winter der untere Bereich des Polarwirbels Luftmassen aus den polaren Regionen und den mittleren Breiten. Ein Weg diese Barrieren zu Überwindung ist zum Beispiel schwerewelleninduzierte Turbulenz. Diese ermöglicht auch in der stabil geschichteten Stratosphäre einen nicht-isentropen Austausch und Mischung. Direkte Beobachtungen in solchen Bereichen sind selten und daher mit einigen Unsicherheiten behaftet. Das Ziel dieser Arbeit ist die Untersuchung von kleinskaligen Mischungsprozessen an solchen Transportbarrieren im Rahmen von drei Fallstudien.

Grundlage für die Untersuchungen sind flugzeuggetragene Spurengasmessungen von N_2O , CO und O_3 , während der Messkampagnen DEEPWAVE, GW-LCYCLE II und SouthTRAC. Die zeitliche Auflösung der Messdaten von 1 bis 100 Hz erlaubt die Analyse von kleinskaligen Austauschprozessen auf Skalen kleiner als 200 m. Die Messdaten werden mit Hilfe von Zeitreihen-, Korrelations- sowie Zeit-Frequenz-Analysen auf Mischung untersucht. Ferner erlauben Daten aus numerischen Modellen (ECMWF) die Messdaten in einen größeren Kontext der meteorologischen Verhältnisse zu setzen.

Der Effekt von schwerewelleninduzierter turbulenter Mischung auf die Zusammensetzung der untersten Stratosphäre konnte im Rahmen eines Messflugs über den Gebirgsrücken der Südalpen untersucht werden. Dabei können durch die Verwendung der Spurengaskorrelationen zwei Luftschichten mit unterschiedlicher chemischer Zusammensetzung identifiziert werden, zwischen denen irreversibles Mischen stattgefunden hat. Spektrale Analysen der Messdaten (spektrale Leistungsdichte, Wavelet-Analyse) sowie Analysen der atmosphärischen Stabilität aus Modelldaten zeigen deutliche Hinweise auf Turbulenz über dem Gebirge, die in Verbindung mit Schwerewellen in der Tropopausenregion aufgetreten ist. Die schwerewelleninduzierte Turbulenz führt zu diabatischen Spurengasflüssen, die die chemische Zusammensetzung in der unteren Stratosphäre nachhaltig verändern.

In einer zweiten Fallstudie konnte erstmals Mischung, die aus Spurengaskorrelationen abgeleitet wurde, direkt mit turbulenten Flüssen in Verbindung gebracht werden. Auf mehreren Flughöhen zeigen die Spurengaskorrelationen an einer Tropopausenfalte deutliche Mischungslinien zwischen troposphärischen und stratosphärischen Luftmassen. Die Berechnung von vertikalen Spurengasflüssen hat ergeben, dass diese Mischungslinien gemeinsam mit lokalen vertikalen Spurengasflüssen auftreten. Durch die spektrale Analyse der Messdaten (spektrale Leistungsdichte, Wavelet-Analyse) wurden eindeutige Hinweise auf Turbulenz im Bereich der Mischungslinien gefunden. Weiterführende Analysen von Modelldaten deuten darauf hin, dass die Turbulenz in diesem Fall durch Scherung des Windes induziert wird. Die Analysen zeigen, dass Turbulenz an Tropopausenfalten lokale Spurengasflüsse erzeugen kann und es dadurch zu irreversibler Mischung von Luftmassen aus der Troposphäre und der Stratosphäre gekommen ist. Dieser direkte Zusammenhang von Korrelationen und turbulenter Mischung konnte vorher noch nicht beobachtet werden.

In einer dritten Fallstudie konnte der Einfluss von Turbulenz auf Mischung und den Export von Luftmassen aus dem Polarwirbel nachgewiesen werden. Messungen von Spurengasen, die in turbulenten Regionen am Rand des antarktischen Wirbels stattfanden, zeigen deutliche Mischungssignale in der Stratosphäre. Die Messungen und die Modelldaten zeigen, dass dabei Luftmassen gemischt wurden, die in einem Fall aus dem polaren Wirbel stammen und chemisch im Wirbel prozessiert worden sind. Diese werden mit nicht-prozessierter Luft aus mittleren Breiten gemischt. Aus den Beobachtungen lässt sich ferner schließen, dass die Turbulenz durch Schwerewellen verursacht wurde, die wiederum dafür verantwortlich ist, dass ozonarme Luft aus dem Wirbel in die mittleren Breiten gelangen konnte.

Die Ergebnisse der drei Fallstudien erweitern das Verständnis von Mischungsprozessen an den Transportbarrieren. Die Fallstudien unterstreichen auch die Bedeutung der Spurengasdiagnostik, um die Auswirkung von kurzlebigen Prozessen, wie Turbulenz, auf die Zusammensetzung der UTLS zu untersuchen. Die Spurengasverteilung ist charakteristisch für irreversible diabatische Prozesse und kann daher für eine bessere quantitative Abschätzung von kleinskaligen diabatischen Prozessen zu irreversiblen Austausch sorgen.

Abstract

The upper troposphere and lower stratosphere (UTLS) is a transition region between the two different atmospheric layers troposphere and stratosphere. The composition and the distribution of trace gases in the UTLS have a wide influence on the radiation budget of the earth and thereby on the global climate. Within the UTLS there are different transport barriers which impede the direct exchange between different atmospheric regimes. For example, the tropopause separates stratospheric and tropospheric air masses, or in late winter the lower part of the polar vortex separates air masses from polar regions and mid-latitudes. Occurrence of turbulence in the region of these barriers constitute an important process to overcome these barriers. This could lead to cross-isentropic exchange and mixing in the stably stratified stratosphere. Direct observations in these areas are rare and come with a range of uncertainties. The main goal of this thesis is to analyse small-scale mixing events at such transport barriers based on three case studies.

Based on airborne in-situ trace gas measurements of nitrous monoxide (N_2O), carbon monoxide (CO) and ozone (O_3) during the DEEPWAVE, GW-LCYCLE II and South-TRAC campaigns. A time resolution of 1 to 100 Hz allows the analysis of small-scale exchange processes on scales less than 200 m. Using different trace gas and time-frequency analysis methods the data are analysed for small-scale mixing and turbulence occurrence and are supported by model data (ECMWF).

The effect of gravity wave induced turbulent mixing on the composition of the lowermost stratosphere was investigated within the scope of a research flight above the mountain ridge of the Southern Alps. Two atmospheric layers with different chemical compositions could be identified by using the tracer-tracer correlation of N_2O and CO . Between these layers irreversible mixing occurred. The spectral analysis of in-situ data (power spectral density, wavelet analysis) as well as the analysis of atmospheric stability from model data show clear evidence of turbulence above the mountains that appear in connection with gravity waves in the tropopause region. This gravity wave induced turbulence leads to diabatic trace gas fluxes changing the chemical composition of the lower stratosphere effectively.

In a second case study observations obtained in the vicinity of a tropopause fold were analysed with respect to mixing. This analysis revealed a direct link between mixing lines in the tracer-tracer diagnostic to turbulent tracer fluxes. On several flight altitudes through the tropopause fold the correlations (N_2O - CO , O_3 - CO) show distinct mixing lines between tropospheric and stratospheric air masses. The calculation of vertical trace gas fluxes shows that these mixing lines are associated to enhanced local vertical trace gas fluxes. Clear evidence of turbulence in the vicinity of the mixing lines was found using spectral analysis of in-situ data (power spectral density, wavelet analysis). Further analysis of model data indicate that the turbulence was induced by shear in this case. The analysis shows that turbulence at tropopause folds could induce local trace gas fluxes leading to irreversible mixing of air masses originating from the troposphere and the stratosphere. This direct connection of correlations with turbulent mixing was never observed before.

In a third case study the influence of turbulence on mixing and export of air masses from the polar vortex was studied. Trace gas measurements at the lower edge of the Antarctic polar vortex show a clear signal of mixing. Turbulence was detected by high resolution

in-situ data of measured 3D wind. The measurements as well as the model data show that air masses from the polar vortex, which have been chemically processed in the vortex, are mixed with unprocessed air masses from mid-latitudes. Turbulence was induced by gravity waves as could be inferred from observations. The data show that gravity wave induced turbulence lead to the decay of the vortex filament and mixing between different air masses. This allows the processed air masses carrying low amounts of ozone to reach the mid-latitude lower stratosphere.

The results of the three case studies extend the understanding of mixing processes at transport barriers. The case studies also highlight the importance of tracer diagnostics to identify the effect of highly transient processes like turbulence on the UTLS composition. The tracer distribution carries the signature of irreversible diabatic processes and can therefore provide for a better quantitative assessment of small-scale diabatic processes to irreversible exchange.

Inhaltsverzeichnis

Inhaltsverzeichnis	viii
1. Grundlagen	1
1.1. Die Tropopausenregion	1
1.2. Schwerewellen in der Atmosphäre	9
1.3. Atmosphärische Stabilität	11
1.4. Spurengasverteilung und -transport an Transportgrenzflächen	13
1.5. Ziele und Gliederung der Arbeit	20
2. Methoden	22
2.1. Diagnose des Transports durch Spurengasverteilungen	22
2.2. Zeit-Frequenz-Diagnostik	26
2.3. Numerische Modelldaten	30
3. Nicht-isentrope Mischung während DEEPWAVE	37
3.1. Die DEEPWAVE 2014 Kampagne und Messflug 9	37
3.2. Die synoptischen Bedingungen	38
3.3. In-situ Messungen und Gebirgswellen während Messflug 9	43
3.4. Identifizierung von Mischung	45
3.5. Verteilung und Mischung der Spurengase	47
3.6. Turbulenzanalyse	60
3.7. Zusammenfassung	64
4. Mischung und lokale Spurengasflüsse an einer Tropopausenfalte	67
4.1. Die Messkampagne GW-LCYCLE II	67
4.2. Wetterbedingungen und Flugübersicht	75
4.3. Mischungslinien der Spurengaskorrelationen	83
4.4. Berechnung lokaler Ozonflüsse	85
4.5. Analyse der spektralen Leistungsdichte und Wavelet-Analyse an der Tropopausenfalte	91
4.6. Diskussion	96
4.7. Zusammenfassung	97
5. Untersuchung von welleninduziertem Austausch am antarktischen polaren Wirbel	99
5.1. SouthTRAC-Kampagne	99
5.2. Der polare Wirbel zum Zeitpunkt von ST17	100
5.3. Analyse meteorologischer Parameter	105
5.4. Zeitreihen des Messflugs	108
5.5. Untersuchung der O ₃ -N ₂ O-Korrelationen	109

Inhaltsverzeichnis

5.6. Einfluss der Turbulenz und Mischung	112
5.7. Untersuchung und Vergleich der Spurengasflüsse	115
5.8. Zusammenfassung	117
6. Zusammenfassung und Ausblick	119
6.1. Zusammenfassung	119
6.2. Ausblick	122
Anhang	127
A. Ergänzungen zur Wavelet-Analyse	127
B. Skalenanalyse des O ₃ -Profils	132
C. Berechnung lokaler N ₂ O-Flüsse	133
D. Ergänzungen zur spektralen Leistungsdichte	133
Abkürzungsverzeichnis	136
Abbildungsverzeichnis	139
Tabellenverzeichnis	140
Literaturverzeichnis	140

1. Grundlagen

1.1. Die Tropopausenregion

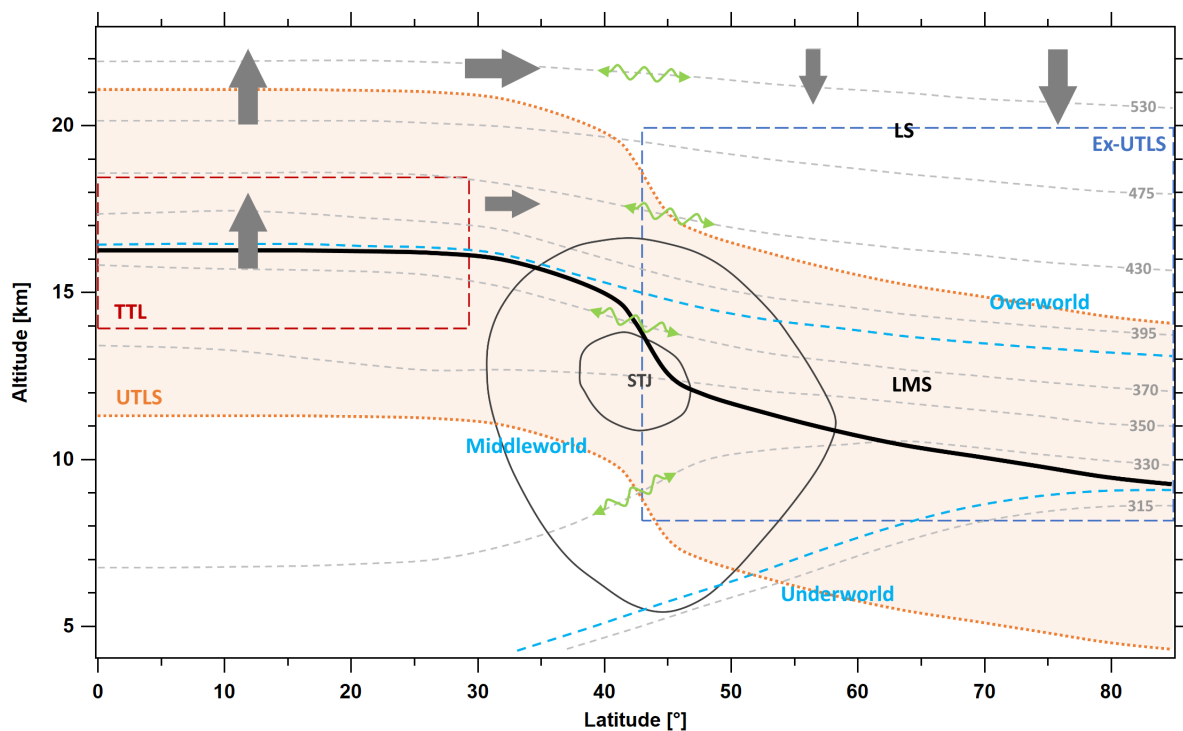


Abbildung 1.1.: Schematischer Querschnitt des zonalen Mittels der oberen Troposphäre und unteren Stratosphäre im nordhemisphärischen Sommer. Der orange markierte Bereich zeigt die UTLS-Region und die dicke schwarze Linie die thermische Tropopause. Graue gestrichelte Linien repräsentieren Isentropen und durchgezogene graue Konturen den Subtropen-Strahlstrom (STJ). Der dunkelblaue Kasten markiert die extratropische UTLS (Ex-UTLS) und der rote Kasten die tropische Tropopausenschicht (TTL). Die beiden hellblauen gestrichelten Linien (zirka bei 320 K und 380 K) trennen Oberwelt, Mittelwelt und Unterwelt. Graue Pfeile symbolisieren Transportwege der Residualzirkulation und grüne Pfeile bidirektionalen irreversiblen Austausch. Abbildung adaptiert nach Riese et al. (2014).

Als UTLS (**U**pper **T**roposphere and **L**ower **S**tratosphere) wird ein atmosphärischer Bereich bezeichnet, der ungefähr ± 5 km um die Tropopause liegt (Gettelman et al., 2011). Diese Grenzregion trennt die gut durchmischte Troposphäre und die statisch sehr stabile Stratosphäre, also die beiden untersten Schichten der Atmosphäre, die für den Transport eine Barriere darstellt. In Abbildung 1.1 entspricht dies dem orangenen markierten Bereich.

1. Grundlagen

In den Extratropen, das heißt zwischen den Polen und der Lage des Subtropen-Strahlstrom, der hier mit STJ (**S**ub**T**ropical **J**et) abgekürzt ist, also je nach Jahreszeit bei einem Breitengrad von zirka 30° bis 40°, liegt die UTLS (Ex-UTLS; dunkelblauer Kasten) in einem Höhenbereich zwischen 8 und 20 km.

In den Tropen wird der Übergangsbereich zwischen Troposphäre und Stratosphäre als tropische Tropopausenschicht, kurz TTL (**T**ropical **T**ropopause **L**ayer), bezeichnet (Highwood und Hoskins, 1998). Diese liegt im Höhenbereich von 14 bis 18,5 km, bzw. 355-425 K (potentielle Temperatur), oder 150-70 hPa (Fueglistaler et al., 2009) und ist in Abbildung 1.1 durch den roten Kasten dargestellt.

Eine weitere Möglichkeit zur Einteilung der UTLS wurde durch Hoskins (1991) beschrieben. Dabei wird die UTLS in die sogenannte Oberwelt („Overworld“), Unterwelt („Underworld“) und Mittelwelt („Middleworld“) aufgeteilt. Die Ober- und die Unterwelt sind so definiert, dass die in ihr verlaufenden Isentropen nicht die Tropopause schneiden, wobei die Isentropen der Oberwelt über der Tropopause liegen und die Isentropen der Unterwelt darunter. Im Gegensatz dazu schneiden die Isentropen in der Mittelwelt die Tropopause. Die Grenzlinie (hellblaue gestrichelte Linien) zwischen Mittelwelt und Oberwelt liegt ungefähr bei 380 K und bildet gleichzeitig die Grenze zwischen der untersten Stratosphäre, abgekürzt LMS (**L**ower**M**ost **S**tratosphere) und der unteren Stratosphäre, kurz LS (**L**ower **S**tratosphere).

1.1.1. Tropopausendefinitionen

Aufgrund der unterschiedlichen chemischen, dynamischen und thermischen Eigenschaften von Troposphäre und Stratosphäre gibt es verschiedene Möglichkeiten die Tropopause zu definieren. Je nach Definition kann sich die Höhe der Tropopause unterscheiden.

Die thermische Tropopause

Nach WMO (**W**orld **M**eteorological **O**rganization) Definition (WMO (World Meteorological Organization), 1957) ist die Tropopause das unterste Niveau, bei dem der Temperaturgradient, also die Änderung der Temperatur mit der Höhe, kleiner als 2 K km^{-1} ist und dieser Wert in einer Schicht von mindestens 2 km darüber, im Mittel nicht überschritten wird. Diese Definition hat den Vorteil, dass die Tropopause einfach bestimmt werden kann, z.B. schon aus einem Radiosondenaufstieg. Allerdings kann es zu schlecht definierten Tropopausen kommen, zum Beispiel in Tropopausenfalten, an Strahlströmen, oder in den polaren Gebieten (Zängl und Wirth, 2002). Aufgrund der Temperaturinversion an der thermischen Tropopause wird der vertikale Austausch zwischen Troposphäre und Stratosphäre unterdrückt.

Die dynamische Tropopause

Die potentielle Wirbelstärke (PV) ist eine Größe zur Beschreibung der Dynamik, die horizontale Bewegungen und die statische Stabilität (siehe Abschnitt 1.3) verbindet. Aufgrund der Temperaturzunahme mit der Höhe, also der stabilen Schichtung, ist die PV in der Stratosphäre größer als in der Troposphäre. Dadurch existiert zwischen beiden Schichten

ein Bereich mit einem großen PV-Gradienten, der es ermöglicht die dynamische Tropopause zu definieren (Hoskins et al., 1985; Holton et al., 1995; Gettelman et al., 2011). Als Grenze zwischen Stratosphäre und Troposphäre wird anstatt des isentropen Gradienten häufig die 2 pvu-Isofläche verwendet (z.B. Holton et al., 1995). Je nach Jahreszeit und geographischer Position sind allerdings auch Werte zwischen 1,5 und 5 pvu möglich (Kunz et al., 2011). Wegen des isentropen PV-Gradienten ist die dynamische Tropopause eine dynamische Barriere gegen isentropen Transport, solange die PV erhalten ist. Dadurch entstehen an der Tropopause starke Spurengasgradienten.

Nach Ertel (1942) ist die potentielle Vortizität, bzw. potentielle Wirbelstärke (Q) wie folgt definiert:

$$Q = \frac{1}{\rho} \vec{\eta} \cdot \vec{\nabla} \theta \quad (1.1)$$

Dabei ist ρ die Dichte und $\vec{\eta} = \vec{\xi} + 2\vec{\Omega}$ die absolute Wirbelstärke. Diese setzt sich aus der relativen Wirbelstärke $\vec{\xi} = \vec{\nabla} \times \vec{u}$ (wobei \vec{u} der 3-dimensionale Windvektor ist) und $2\vec{\Omega}$ der planetaren Wirbelstärke (wobei $\vec{\Omega}$ der Vektor der Erdrotation ist) zusammen. θ bezeichnet potentielle Temperatur (siehe Formel (1.3)). Die Einheit der PV wird in pvu (potential vorticity unit) angegeben (Reed, 1955; Shapiro, 1980), wobei 1 pvu gleich $10^{-6} \text{ K m}^2 \text{ kg}^{-1} \text{ s}^{-1}$ entsprechen. Die PV stellt eine Größe dar, die unter adiabatischen und reibungsfreien Bedingungen erhalten ist. Daher eignet sie sich besonders gut, um Transport und Mischung (speziell in der Stratosphäre) zu untersuchen.

Die Erhaltungsgleichung der PV lässt sich schreiben als:

$$\frac{D}{Dt} Q = \frac{1}{\rho} (\vec{\nabla} \times \vec{F}) \cdot \vec{\nabla} \theta + \frac{1}{\rho} \vec{\eta} \cdot \vec{\nabla} \dot{\theta} \quad (1.2)$$

Hierbei ist \vec{F} die Summe aller nicht-konservativen Kräfte (Reibung, Diffusion, Turbulenz) und $\dot{\theta}$ die diabatische Heizrate. Die PV ist damit bei adiabatischen, reibungsfreien Strömungen materiell erhalten (Hoskins et al., 1985; Spreitzer et al., 2019). Damit ein Luftpaket von der Troposphäre, also einem Bereich mit niedriger PV, in die Stratosphäre, d.h. hohe PV, gelangen kann, muss ein diabatischer Prozess auf das Luftpaket gewirkt haben.

Die potentielle Temperatur

Die potentielle Temperatur ist die Temperatur die ein Luftpaket hätte, wenn es trockenadiabatisch (d.h. ohne Wärmeaustausche mit der Umgebung) auf einen Referenzdruck (Bodendruck) gebracht wird. Sie ist definiert als:

$$\theta = T \cdot \left(\frac{p_0}{p} \right)^{\frac{R_d}{c_p}} \quad (1.3)$$

wobei T die Temperatur, p_0 Referenzdruck (1000 hPa), p Luftdruck, R_d Gaskonstante von trockener Luft ($287,05 \frac{\text{J}}{\text{kg}\cdot\text{K}}$) und c_p spezifische Wärmekapazität von trockener Luft bei konstantem Druck ($1004 \frac{\text{J}}{\text{kg}\cdot\text{K}}$) ist. Aufgrund der Eigenschaft, dass die potentielle Temperatur mit der Höhe monoton größer wird, eignet sie sich gut als alternative Höhenkoordinate für Untersuchungen der chemischen Zusammensetzung und von Transportprozessen. Die Flächen gleicher potentieller Temperatur, bzw. gleicher Entropie werden als Isentropen bezeichnet. Der Zusammenhang zwischen potentieller Temperatur und Entropie s ist

1. Grundlagen

durch

$$s = c_p \ln(\theta) \quad (1.4)$$

gegeben, womit die potentielle Temperatur die Entropie-Variable der Atmosphäre ist (Plumb, 2007). Wird ein Luftpaket unter trockenadiabatischen Bedingungen ausgelenkt, stellt die potentielle Temperatur eine Erhaltungsgröße dar. Ein solcher Prozess ist reversibel und damit wichtig für die Untersuchung von Transport und Mischung. In der Stratosphäre laufen Transportprozesse wegen der Zunahme der statischen Stabilität auf kurzen Zeitskalen (d.h. Tagen), im allgemeinen näherungsweise entlang von Isentropen (quasi-isentrop) ab (Proffitt et al., 1990; Holton et al., 1995). Die Luftpakete bewegen sich also adiabatisch entlang von Linien gleicher Entropie. Eine Änderung der potentiellen Temperatur entspricht einer Änderung der Entropie und ist mit diabatischen Prozessen verbunden. Ein diabatischer Prozess ist irreversibel, wodurch sich ein Luftpaket nicht-isentrop bewegt. Damit handelt es sich um einen nicht-konservativen Prozess, der die PV verändert und so zu Mischung führen kann. Die einzigen relevanten diabatischen Prozesse in der Atmosphäre sind Strahlungsprozesse und nicht-konservative Mischungsprozesse.

Die chemische Tropopause

Aufgrund der deutlichen Zunahme in der Stratosphäre ist Ozon (O_3 ; siehe Abbildung 1.8) gut geeignet, um aus der Änderung des O_3 -Gradienten eine Tropopause zu definieren. Bei der Verwendung von Ozon muss allerdings beachtet werden, dass es chemisch nicht inert ist und außerdem eine Saisonalität aufweist. Wegen des Charakters der Tropopause als dynamische Transportbarriere (aufgrund der PV-Erhaltung für adiabatische reibungsfreie Strömung), kann auch über das absolute Mischungsverhältnis von verschiedenen Spurengasen, z.B. O_3 , Distickstoffmonoxid (N_2O), eine chemische Tropopause definiert werden (Bethan et al., 1996). Ein anderer Weg zur Bestimmung der Tropopause sind Korrelationen von verschiedenen Spurengasen, wie beispielsweise der O_3 -Kohlenstoffmonoxid (CO) (Fischer et al., 2000; Zahn et al., 2000; Hoor et al., 2002; Pan et al., 2004), oder N_2O - CO (Assonov et al., 2013; Müller et al., 2015). Mit Hilfe der chemischen Tropopause können Luftmassen auf Transport- und Mischungsprozesse untersucht werden. Die Eigenschaften der Spurengase werden in Abschnitt 1.4.1 und die Mischungsdiagnostik in Abschnitt 2.1.2 beschrieben.

1.1.2. Tropopausenfalten

In den mittleren Breiten sind Tropopausenfalten eine wichtige Regionen für den Austausch zwischen Troposphäre und Stratosphäre (Danielsen, 1968; Shapiro, 1980; Sprenger et al., 2007). Sie entwickeln sich im Zusammenhang mit Tiefdruckgebieten (Shapiro, 1980; Holton et al., 1995) und entstehen in baroklinen Wellen, bzw. brechenden Rossby-Wellen auf der synoptischen und planetaren Skala, unterhalb des Windmaximums des Subtropen-, oder Polar-Strahlstroms durch ageostrophische Zirkulation (Keyser und Shapiro, 1986). Ihr geographisches Auftreten ist von der Jahreszeit abhängig, wobei es im Winter ein Maximum und im Sommer ein Minimum der Auftrittswahrscheinlichkeit gibt (Eibern et al., 1998; Sprenger et al., 2003; Škerlak et al., 2015). Die Verteilung zwischen Nord- und Südhemisphäre ist ebenfalls unterschiedlich (Eibern et al., 1998; Škerlak et al., 2015). An Tropopausenfalten können sich große horizontale Gradienten der Windgeschwindigkeit, der

potentiellen Temperatur, der potentiellen Wirbelstärke, oder der Spurengasmischungsverhältnisse bilden. Abbildung 1.2 zeigt die PV-Verteilung im Bereich eines Tiefdruckgebiets, auf der diese Gradienten bei zwei Tropopausenfalten eindeutig zu erkennen sind.

Tropopausenfalten sind Regionen, in denen häufig Scherung und Turbulenz auftritt (Shapiro, 1976, 1980; Stohl et al., 2003; Koch et al., 2005; Sharman et al., 2012; Spreitzer et al., 2019; Söder et al., 2021), die auch einen Gefahrenbereich für die Luftfahrt darstellen. Durch diabatische und turbulente Prozesse, wie Konvektion (z.B. Homeyer et al., 2011) und Scherinstabilitäten (z.B. Shapiro, 1980; Holton et al., 1995; Langford et al., 1996; Cho et al., 1999; Stohl et al., 2003; Brioude et al., 2006), kann es zu Mischung an Tropopausenfalten kommen. Durch turbulente, oder strahlungsbedingte Prozesse kann sich die Tropopausenfalte zurück formen, bzw. erodieren. Dabei werden auch Spurengas- und PV-Gradienten abgebaut (Shapiro, 1980; Spreitzer et al., 2019). Auf den Spurengasaustausch und -transport an Tropopausenfalten wird in Abschnitt 1.4.2 eingegangen.

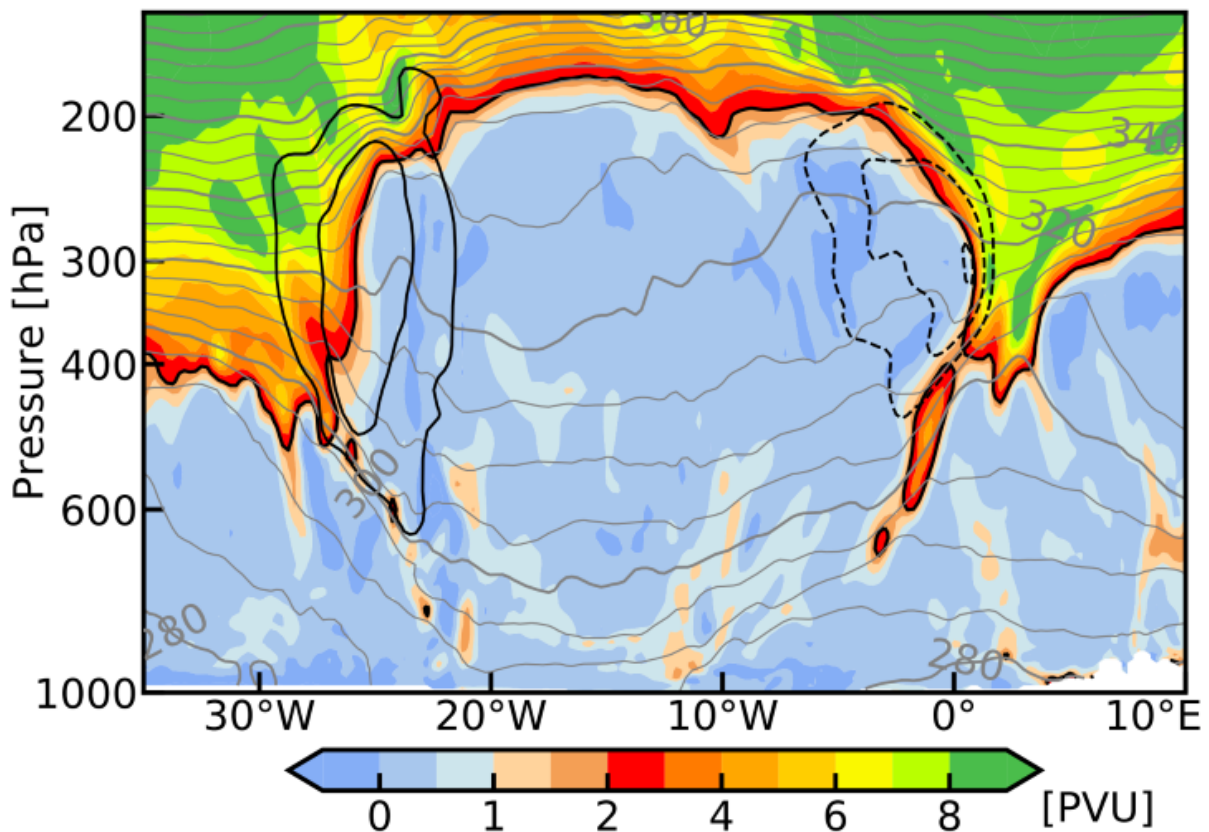


Abbildung 1.2.: Vertikaler Querschnitt einer Tropopausenfalte bei 48°N um 0 UTC am 6. Februar 2017. Die Farbskala zeigt die PV aus dem ECMWF IFS-Modell, die durchgezogene schwarze Linie die 2 puv-Konturen und die grauen Linien Isentropen. Die dünnen schwarzen durchgezogenen/gestrichelten Linien repräsentieren nördliche/südliche Meridionalwinde mit Geschwindigkeiten $> 40 \text{ m s}^{-1}$ in Intervallen von 15 m s^{-1} . Modifizierte Abbildung aus Spreitzer et al. (2019) © American Meteorological Society. Used with permission.

1.1.3. Der polare Wirbel

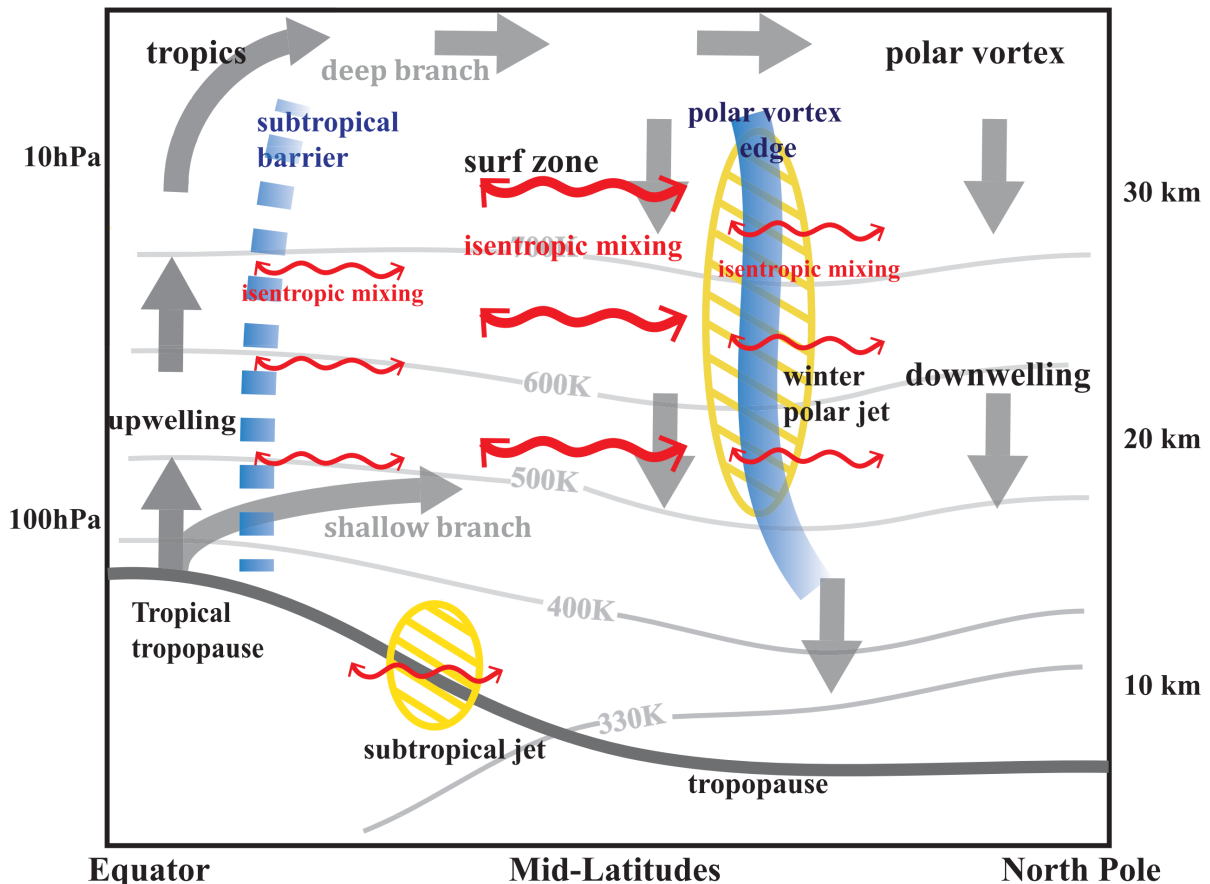


Abbildung 1.3.: Schematisches Diagramm von Transport und Mischung in der winterlichen Stratosphäre. Dicke blaue Linien zeigen Barrieren, graue Pfeile kennzeichnen die Richtung der Brewer-Dobson-Zirkulation. Gelb schraffierte Flächen stehen für starke Westwinde. Rote Doppelpfeile geben isentropes Mischen an, wobei die dickeren Pfeile starkes Mischen in der sogenannten „surf zone“ und die dünneren Pfeile jeweils schwächeres Mischen über die Transportbarrieren zeigen. Die dicke graue Linie symbolisiert die Tropopause und die dünnen grauen Linien Isentropen. Modifizierte Abbildung aus Tao et al. (2015).

Abbildung 1.3 zeigt schematisch den Transport in der Stratosphäre während des Winters. Der polare Wirbel liegt zwar zum Großteil oberhalb der UTLS, kann aber einen großen Einfluss auf diese haben. Durch quasi-horizontales Mischen durch den flachen Zweig der Brewer-Dobson-Zirkulation (siehe Abschnitt 1.4.2) und diabatisches Absinken aus der Stratosphäre wird die polare UTLS beeinflusst und verbindet so die tropische und die arktische Tropopausenregion.

Im Winter, also während der Polarnacht auf der jeweiligen Hemisphäre, kühlt sich die Luft in der Stratosphäre stark ab und die Luftmassen sinken diabatisch ab. Aufgrund der dadurch entstehenden Temperatur- und Druckdifferenzen zwischen der Polarregion und den mittleren Breiten entsteht der Polarnacht-Strahlstrom (Schoeberl et al., 2006), der den Pol aufgrund der Erdrotation als Westwind (zyklonal) umströmt. Der dadurch entstehende polare Wirbel liegt im Höhenbereich von ungefähr 10 bis 30 km (Schoeberl

und Hartmann, 1991; Wallace und Hobbs, 2006).

Der polare Wirbel dominiert die stratosphärische Zirkulation der jeweiligen Winterhemisphäre. Insbesondere führen die niedrigen Temperaturen und die Isolation zum katalytischen polaren Ozonabbau am Ende des Winters.

Die Temperaturen innerhalb des Wirbels werden durch Strahlungsprozesse und durch dynamische Prozesse bestimmt. Dabei ist die Abkühlung durch die Emission von Wärmestrahlung in jedem Winter ähnlich. Die Temperaturen hängen von Stärke des abwärts gerichteten Zweiges der Brewer-Dobson-Zirkulation, die durch die Aktivität der planetaren Wellen bestimmt wird, ab und können sowohl von Jahr zu Jahr, als auch zwischen Nord- und Südpol stark variieren. So führt eine hohe Wellenaktivität, die hauptsächlich durch planetare Wellenaktivität verursacht wird, zu erhöhtem Absinken von Luftmassen innerhalb des Polarwirbels. Dies erzeugt wiederum höhere Temperaturen, die den Wirbel instabiler machen. Auf der anderen Seite sorgt eine geringe Wellenaktivität für eine schwache Absinkbewegung mit niedrigen Temperaturen innerhalb des Wirbels und somit zu einem stabileren polaren Wirbel (Polvani et al., 2010).

Durch die ausgeprägte zonale Strömung und die geringe Aktivität von planetaren Wellen, stellt der polare Wirbel eine meridionale Transportbarriere dar, die die Luftmassen innerhalb des Wirbels größtenteils von den umgebenden Luftmassen isoliert (Hartmann et al., 1989; Tao et al., 2015). Anders als die Tropopause ist der Polarwirbel eine zeitlich limitierte Transportbarriere. Durch die Isolation und das diabatische Absinken entstehen zwischen den Luftmassen innerhalb und außerhalb des Wirbels starke horizontale Gradienten (Temperatur, Spurengasmischungsverhältnisse, PV). Diese können genutzt werden um den Rand des polaren Wirbels zu definieren, d.h. die isentropen Gradienten definieren Wirbelrand.

Am Ende des Winters vermischen sich bei der Auflösung des polaren Wirbels dessen Luftmassen mit den Luftmassen der mittleren Breiten und können die chemische Zusammensetzung der unteren Stratosphäre, bzw. in der UTLS beeinflussen (Knudsen und Groß, 2000; Bönisch et al., 2009; Krause et al., 2018). Die niedrigen Temperaturen im polaren Wirbel haben außerdem einen Einfluss auf die Länge des Zeitraums, in dem heterogene Chemie abläuft. Damit ändern sich auch die Zeiten in denen Ozonzerstörung und -erholung stattfindet. Dies beeinflusst das troposphärische Klima im Frühling und Sommer, sowie die Dynamik in Troposphäre und Stratosphäre (z.B. Polvani et al., 2011; Manney et al., 2005; McLandress und Shepherd, 2009; Son et al., 2010).

1.1.4. Klimarelevanz der UTLS

Für die Forschung ist die UTLS von besonderem Interesse. Das Auftreten von Stratosphären-Troposphären-Austausch, kurz STE (**S**tratosphere-**T**roposphere-**E**xchange), spielt eine wichtige Rolle in der Tropopausenregion, da dieser sowohl die stratosphärische Chemie, als auch die Ozonchemie in der Troposphäre beeinflusst. So verändert der Eintrag von stratosphärischer ozonreicher Luft die Chemie und Strahlung in der Troposphäre. Auf der anderen Seite stört der Transport von verschmutzter troposphärischer Luft die Gleichgewichte in der Stratosphäre. Die chemischen und dynamischen Prozesse in der UTLS sind außerdem von großer Bedeutung für das troposphärische Klima der Erde (Holton et al., 1995; Gettelman et al., 2011; Riese et al., 2012). Infrarotaktive Substanzen wie Wasser (H_2O), Ozon (O_3), Kohlenstoffdioxid (CO_2), oder Methan (CH_4) beeinflussen das Strahlungsbudget der Erdatmosphäre. Kleine Änderung des Budgets, bzw. der Mischungsver-

1. Grundlagen

hältnisse der Spurengase, können in dieser Höhenregion wiederum einen großen Einfluss auf die Oberflächentemperaturen haben (Forster und Shine, 1997, 2002; Riese et al., 2012). Die UTLS verbindet Troposphäre und Stratosphäre außerdem auch auf dynamischer Ebene. Schwerwellen, die vor allem in der Troposphäre entstehen, breiten sich vertikal über die UTLS in die Stratosphäre aus, in der sie auch brechen können. Dadurch sind sie ein wichtiger Antreiber für die Dynamik in der Stratosphäre (Chen und Robinson, 1992; Kim et al., 2003).

Da Schwerwellen einen Beitrag zu Turbulenz und Mischung, den Transport von Energie und Impuls und einen Einfluss auf die mittlere Zirkulation und die thermischen Struktur der Atmosphäre haben (Fritts und Alexander, 2003), werden sie in Abschnitt 1.2 genauer beschrieben.

1.1.5. Überwindung von dynamischen Transportbarrieren

Für den Austausch zwischen Troposphäre und Stratosphäre stellt die Tropopause eine Transportbarriere dar (Gettelman et al., 2011). Das gleiche gilt für den Polarwirbel, der im Winter polare Luftmassen und Luftmassen aus den mittleren Breiten trennt. Die Transportbarrieren liegen in Regionen mit einem starken PV-Gradienten. Abbildung 1.2 zeigt dies für das Beispiel einer Tropopausenfalte.

Um diese dynamischen Barrieren zu überwinden, werden nicht-konservative Prozesse benötigt, d.h. Prozesse die die potentielle Wirbelstärke ändern. Im allgemeinen können dies Wolkenmikrophysik (z.B. Cooper et al., 2005; Bourqui, 2006), Strahlung (z.B. Zierl und Wirth, 1997) und Turbulenz (z.B. Shapiro, 1980) sein.

An der Tropopause sind beispielsweise strahlungsgetriebene Prozesse, oder Phasenübergänge von Wasser und die damit verbundene Umwandlung von latenter Wärme Mechanismen zur Überwindung der Barriere. Auch das Auftreten von Turbulenz, z.B. durch Scherung oberhalb der Tropopause (Shapiro, 1980; Söder et al., 2021; Kaluza et al., 2021), ist eine weitere mögliche Quelle für nicht-konservative Prozesse, die zu Mischungs- und Austauschprozessen an der Tropopause führen können. Weitere Quellen von Turbulenz an der Tropopause können starke Windscherung an Strahlströmen (z.B. Kaluza et al., 2021), Konvektion (z.B. Stohl et al., 2003), frontale Hebung (z.B. Mullendore et al., 2005), die zu vertikaler Konvergenz des horizontalen Winds führt, und das Brechen von Wellen auf verschiedenen Skalen, d.h. von Rossby-Wellen auf der großen Skala, bis hin zu Schwerewellen auf der kleinen Skala, sein (z.B. Whiteway et al., 2003; Stohl et al., 2003; Kunkel et al., 2014, 2019; Söder et al., 2021). Damit findet der Austausch in den mittleren Breiten zwischen Troposphäre und Stratosphäre hauptsächlich im Bereich von Zyklonen, bzw. Tiefdruckgebieten (z.B. Reutter et al., 2015), Strahlströmen (z.B. Konopka und Pan, 2012), Tropopausenfalten (z.B. Shapiro, 1980; Škerlak et al., 2015), Schwerewellen (z.B. Lamarque et al., 1996; Schilling et al., 1999) und Konvektion (z.B. Wang, 2003; Mullendore et al., 2005) statt.

Im Bereich des Polarwirbels können großskalige Störungen (planetare Wellen), die zu lateraler Mischung, d.h. differentieller Advektion und Filamentbildung führen, oder kleinskalige Schwerewellen, die durch Wellenbrechen turbulente Mischung erzeugen (Hartmann et al., 1989) und die auch die PV verändern. Eine Möglichkeit um die Transportbarriere am Rand des Wirbels zu überwinden und damit sich Luftmassen aus dem polaren Wirbel mit Luftmassen aus den mittleren Breiten mischen können, ist also zum Beispiel das Brechen von Schwerewellen, das zu nicht-isentropen Spurengasflüssen führen kann

(Polvani et al., 2010). Außerdem kann es zu Mischung in Folge eines stratosphärisches Erwärmungsereignisses kommen (Konopka et al., 2004; Müller et al., 2005). Dieses entsteht in Folge von erhöhter Wellenanregung, die den Rand des polaren Wirbels abschwächt. Wenn es zu einem stratosphärisches Erwärmungsereignis kommt, verschiebt sich der Wirbel, oder bricht sogar zusammen (Tao et al., 2015; Polvani et al., 2010). Die Bildung von Filamentstrukturen, die durch differentielle Advektion entstehen (Appenzeller und Holton, 1997; Tomikawa et al., 2002), findet vor allem am Rand des polaren Wirbels, hinunter bis auf Höhen von ungefähr 100 hPa (380 K, bzw. 14 km) und in der unteren Stratosphäre statt (Appenzeller und Holton, 1997). Dabei können sowohl Luftmassen aus dem Polarwirbel heraus (Vaugh et al., 1994), als auch in den Polarwirbel hinein (Plumb, 1994) transportiert werden, was eine weitere Möglichkeit ist, wie Mischung am polaren Wirbel stattfinden kann.

Für die folgenden Analysen ist vor allem Turbulenz, z.B. durch dissipierende Schwerewellen, der entscheidende nicht-konservative Prozess. Wolken hingegen sind nur an der Tropopause manchmal von Relevanz und Strahlung auf Zeitskalen von Wochen bis Monaten. Auf die Rolle der Schwerewellen wird in Abschnitt 1.2 und 1.4.2 genauer eingegangen.

1.2. Schwerewellen in der Atmosphäre

Schwerewellen können in der Erdatmosphäre durch verschiedene Prozesse ausgelöst werden, z.B. durch Strömung über Orographie, durch Konvektion, durch Frontalsysteme, oder an Strahlströmen (Fritts und Alexander, 2003; Plougonven und Zhang, 2014; Nappo, 2012; Holton und Hakim, 2013). Die Luftströmung wird durch eine dieser Ursachen vertikal ausgelenkt. Damit es zu einer Schwingung kommen kann, muss die Atmosphäre stabil geschichtet sein. Dadurch wird die Luftströmung, bzw. das Luftpaket wieder in seine Gleichgewichtslage gezwungen und beginnt zu oszillieren. Die so erzeugte Schwerewelle kann sich in der Atmosphäre ausbreiten. Bei den rückstellenden Kräften handelt es sich um die Schwer- und Auftriebskraft. Durch adiabatische Abkühlung kann es bei solchen Oszillationen unter bestimmten Bedingungen zu Übersättigung und Eispartikelbildung, also zur Bildung von Wolken kommen.

In der Atmosphäre treten viele verschiedene Arten, bzw. Typen von Schwerewellen auf. Dabei kann zwischen externen Schwerewellen, bzw. Oberflächenschwerewellen und internen Schwerewellen unterschieden werden. Die internen Schwerewellen können weiter in nicht-orographische Schwerewellen und orographische Schwerewellen, die auch Gebirgswellen genannt werden, unterteilt werden. Weiter Unterarten sind z.B. Leewellen und Trägheitsschwerewellen, sowie einige hier nicht genannte weitere. Während orographische Schwerewellen global viele Hotspots von Schwerewellen erzeugen (Hoffmann et al., 2013) ist die Verteilung von nicht-orographische Schwerewellen weiter verbreitet, z.B. durch Konvektion in den Tropen, oder durch Jet- und Frontalsysteme in den mittleren Breiten (Plougonven und Zhang, 2014).

Die Ausbreitung von Schwerewellen ist in alle Raumrichtungen möglich und in allen Schichten (d.h. Höhen) der Atmosphäre zu beobachten. Dabei können sich Schwerewellen auch über atmosphärische Grenzschichten, wie beispielsweise die Tropopause, bzw. die UTLS hinweg bewegen (Woods und Smith, 2010). Aufgrund der Änderung der statischen Stabilität in der UTLS können sich die Eigenschaften der Welle beim Durchqueren allerdings auch verändern. Die Wellenlängen liegen in der horizontalen Richtung im Bereich

1. Grundlagen

von wenigen Kilometern bis hin zu mehreren hundert Kilometern, bzw. zum Teil sogar tausend Kilometern. In der vertikalen Richtung sind Wellenlängen bis zu einigen zehn Kilometern möglich (Fritts und Alexander, 2003).

Schwerewellen, die in der UTLS, oder am Boden entstehen, können sich bis in die Thermosphäre (~ 110 km) ausbreiten und koppeln somit die untere und obere Atmosphäre (Kim et al., 2003). Dabei werden sie hauptsächlich durch das atmosphärische Windfeld kontrolliert. Die Stärke der Anregung kann einen Einfluss auf die Ausbreitung der Welle haben (Kaifler et al., 2015). Aufgrund der abnehmenden Dichte nimmt die Wellenamplitude mit der Höhe zu und die Welle kann dissipieren, z.B. durch Saturierung und Brechung sowie Reflektion und Absorption an einem kritischen Level. Dabei haben Schwerewellen einen großen Einfluss auf die dynamische und thermische Struktur der Atmosphäre auf allen Größenskalen (Fritts und Alexander, 2003; Kim et al., 2003; Smith et al., 2008). Durch Brechung und Dissipation von Schwerewellen in der oberen Stratosphäre und Mesosphäre wird die Brewer-Dobson-Zirkulation angetrieben (Butchart, 2014). Somit haben Schwerewellen einen Effekt auf die großräumige Zirkulation der Atmosphäre (Fritts und Alexander, 2003) und transportieren Impuls und Energie über große Distanzen, bzw. Höhenbereiche (Smith et al., 2008; Sharman et al., 2012; Geller et al., 2013; Kruse und Smith, 2015; Wright et al., 2016; Holton und Hakim, 2013), indem sie ihre Energie an die Hintergrundströmung abgeben (Welle-Grundstromwechselwirkung).

Schwerewellen können aber auch in allen anderen Bereichen der Atmosphäre brechen, zum Beispiel in der Tropopausenregion (z.B. Wang, 2003; Lane und Sharman, 2006; Smith et al., 2008; Wagner et al., 2017; Schilling et al., 1999), oder am Rand des polaren Wirbels (z.B. Hartmann et al., 1989; Plumb, 2002; Shepherd, 2007; Günther et al., 2008; Polvani et al., 2010). In den Polarregionen kann das Brechen von Schwerewellen beispielsweise zur dynamischen und chemischen Störung des polaren Wirbels führen (Holton et al., 1995; Günther et al., 2008).

Des Weiteren können Schwerewellen in der UTLS lokal zur Entstehung von konvektiven Instabilitäten (Lane und Sharman, 2006), aber auch zu dynamischer Instabilität durch vertikale Windscherung (Kunkel et al., 2014, 2019) führen. Durch beide Prozesse kann Turbulenz erzeugt werden. Besonders wenn Wellenbrechen auftritt, kann dies wiederum zu dynamischer Instabilität in Verbindung mit Turbulenz und Mischung an der Tropopause führen, was durch Modell- und Messdaten gezeigt werden konnte (z.B. Pavelin et al., 2001, 2002; Tomikawa et al., 2002; Whiteway et al., 2003; Wang, 2003). Die Mischung und der irreversible Transport von Spurengasen kann durch Schwerewellen mit unterschiedlichen Wellenlängen hervorgerufen werden (Hartmann et al., 1989; Danielsen et al., 1991; Lamarque et al., 1996; Tomikawa et al., 2002; Whiteway et al., 2003; Moustou et al., 2010), die ebenfalls die thermische Struktur der Tropopause beeinflussen (Kunkel et al., 2014, 2016), d.h. sie deformieren die Tropopause, und mit Tropopausenfalten wechselwirken (Koch et al., 2005; Woiwode et al., 2018) können.

In dieser Arbeit wird sich hauptsächlich mit Gebirgswellen beschäftigt, weshalb auf die weiteren Unterschiede nicht weiter eingegangen wird und der allgemeine Begriff Schwerewelle verwendet wird.

1.3. Atmosphärische Stabilität

Da die Stabilität der Atmosphäre eine wichtige Rolle bei der Entstehung von Wellen, bzw. Turbulenz spielt, werden im Folgenden einige relevante Größen, das heißt die statische Stabilität, die vertikale Scherung des Horizontalwindes und die Richardson-Zahl kurz vorgestellt und beschrieben.

1.3.1. Statische Stabilität

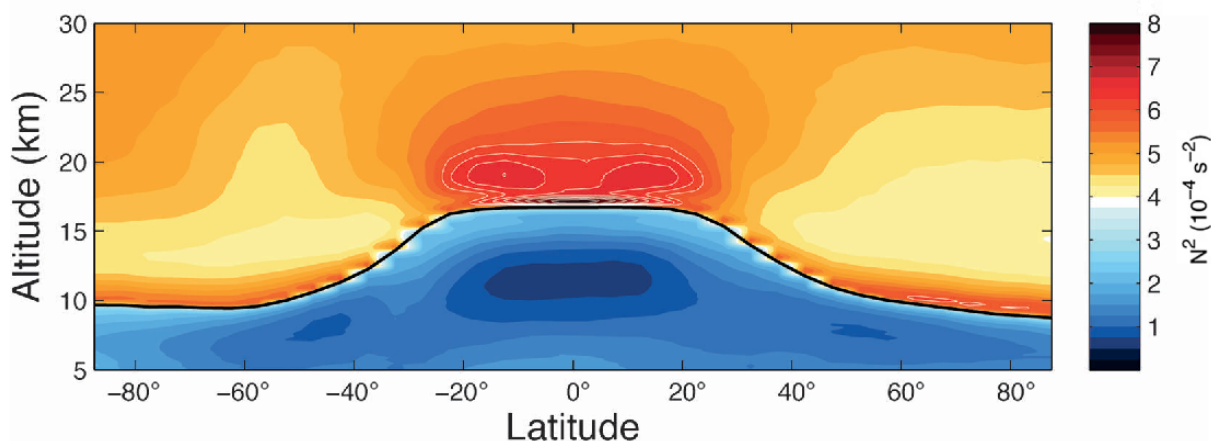


Abbildung 1.4.: Querschnitt der jährlich und zonal gemittelten statischen Stabilität in tropopausenrelativen Koordinaten. Die dicke schwarze Linie zeigt die thermische Tropopause im jährlichen und zonalen Mittel. Die Schritte der Farbskala haben ein Intervall von $2,5 \cdot 10^{-5} \text{ s}^{-2}$. Die dünnen weißen Konturen heben Farbschattierung mit Werten größer als $6,0 \cdot 10^{-4} \text{ s}^{-2}$ hervor. Das jährliche Mittel basiert auf dem Durchschnitt von April 2002 bis März 2008. Die statische Stabilität wurde aus GPS Temperaturprofilen des CHAMP Satelliten berechnet. Modifizierte Abbildung aus Grise et al. (2010) © American Meteorological Society. Used with permission.

Die Brunt-Väisälä-Frequenz stellt ein Maß für die statische Stabilität der Atmosphäre dar. Sie ist definiert als:

$$N^2 = \frac{g}{\theta} \frac{\partial \theta}{\partial z} \quad (1.5)$$

Dabei ist g die Erdbeschleunigung, θ die potentielle Temperatur (siehe Abschnitt 1.1.1) und z die Höhe (z.B. Holton und Hakim, 2013; Roedel und Wagner, 2017; Wallace und Hobbs, 2006). Bei positivem N^2 ist die Atmosphäre stabil geschichtet und ein ausgelenktes Luftpaket oszilliert um seine Ausgangshöhe. Diese Schwingungen können zu Schwerewellen führen. Wenn die potentielle Temperatur mit der Höhe abnimmt, ist N^2 negativ und die Atmosphäre ist labil geschichtet. Ein ausgelenktes Luftpaket verlagert sich unter diesen Bedingungen immer weiter in Auslenkungsrichtung. Bei $N^2 = 0 \text{ s}^{-2}$ ist die Atmosphäre statisch neutral. Ein ausgelenktes Luftpaket wird nicht weiter beschleunigt, sondern bleibt an seinem neuen Ort im Gleichgewicht. Aufgrund der Temperaturzunahme mit der Höhe ist die Stratosphäre im Normalfall stabiler geschichtet (hohe statische Stabilität), als die Troposphäre (niedrige statische Stabilität). Abbildung 1.4 zeigt einen Meridionalschnitt

1. Grundlagen

der statischen Stabilität in tropopausenrelativen Koordinaten bei dem zu erkennen ist, dass es über alle Breitengrade ein Maximum an der Tropopause gibt. In der Stratosphäre hat die statische Stabilität typischerweise Werte $> 4 \cdot 10^{-4} \text{ s}^{-2}$ (z.B. Birner, 2006; Grise et al., 2010) und in der Troposphäre ist $N^2 \approx 1 \cdot 10^{-4} \text{ s}^{-2}$.

Die statische Stabilität kann zur Identifizierung von Wellenbrechen genutzt werden. Wenn die Wellenamplitude einer sich vertikal ausbreitenden Welle mit der Höhe ansteigt, kann dies zur Versteilung („steepening“), zum Überschlagen („overtuning“) und schließlich zum Brechen der Welle führen. Die daraus resultierende Turbulenz und Mischung erzeugt eine neutrale oder instabile Schichtung, d.h. $\frac{\partial \theta}{\partial z} \approx 0$ oder negativ (Fritts und Alexander, 2003; Lin, 2007; Sharman et al., 2012; Bramberger et al., 2017; Wilms et al., 2020). Statische Instabilität ($\frac{\partial \theta}{\partial z} < 0$) kann außerdem bei konvektiver Instabilität, oder an einer kritischen Schicht (d.h. die Phasengeschwindigkeit der Welle ist gleich der Hintergrundgeschwindigkeit des Horizontalwinds), die die Ausbreitung der Schwerewelle verhindert, auftreten (Fritts und Alexander, 2003; Kim et al., 2003; Lin, 2007).

1.3.2. Vertikale Scherung des Horizontalwindes

Die quadrierte vertikale Scherung des Horizontalwindes ist definiert als:

$$S^2 = \left(\frac{\partial u}{\partial z} \right)^2 + \left(\frac{\partial v}{\partial z} \right)^2 \quad (1.6)$$

mit u der meridionalen Windgeschwindigkeit, v der zonalen Windgeschwindigkeit und z der Höhe (z.B. Wallace und Hobbs, 2006). Erhöhte vertikale Scherung des Horizontalwinds kann zu dynamischer Instabilität führen. Diese tritt häufig in Randbereichen von Strahlströmen oder in Bereichen von Schwerewellen auf. Abbildung 1.5 zeigt, dass S^2 eine maximale Auftrittshäufigkeitsverteilung direkt oberhalb der Tropopause besitzt. Die erhöhte Scherung steht im Zusammenhang mit der hohen statischen Stabilität (Abbildung 1.4) und kann gleichzeitig auch zu erhöhter dynamischer Instabilität führen (siehe Abschnitt 1.3.3).

1.3.3. Richardson-Zahl

Die Richardson-Zahl wird in vielen Studien genutzt um eine Aussage über Turbulenz, oder Instabilitäten treffen zu können (z.B. Pavelin et al., 2002; Koch et al., 2005; Galperin et al., 2007; Malinowski et al., 2013; Kunkel et al., 2014; Guarino et al., 2016; Heller et al., 2017; Podglajen et al., 2017; Kaluza et al., 2018; Söder et al., 2021). Sie stellt das Verhältnis von Auftriebskräften und Scherkräften dar und ist definiert als:

$$Ri = \frac{N^2}{S^2} \quad (1.7)$$

Wobei N^2 die statische Stabilität und S^2 die vertikale Scherung des Horizontalwinds ist (z.B. Stull, 1988; Nappo, 2012; Foken, 2016). Bei $Ri < 0$ wird von konvektiver Instabilität und bei $0 \leq Ri \leq 0,25$ von dynamische Instabilität gesprochen. In der Atmosphäre tritt $Ri < 0,25$ beispielsweise bei Kelvin-Helmholtz Instabilitäten auf, die durch Scherung ausgelöst wird (z.B. Kaluza et al., 2021). Schwerewellen können die Richardson-Zahl lokal

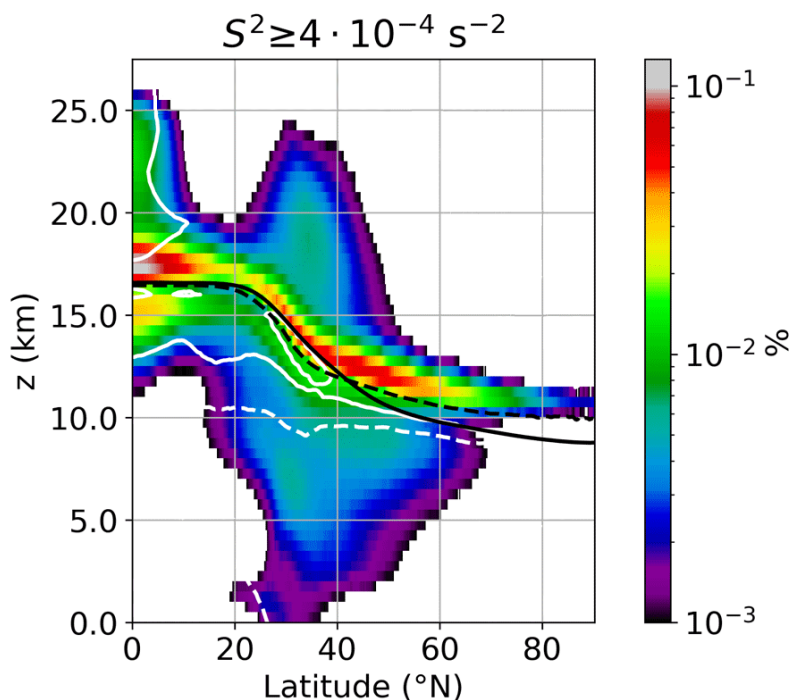


Abbildung 1.5.: Auftretshäufigkeitsverteilung für starke vertikale Windscherung ($S^2 \geq 4 \cdot 10^{-4} \text{ s}^{-2}$) auf der nördlichen Hemisphäre im Zeitraum zwischen dem 1.1.2008 und dem 31.12.2017 in Vertikalkoordinaten relative zur thermischen Tropopause. Die durchgezogene schwarze Linie zeigt die mittlere thermische Tropopause. Die Konturen der Auftretshäufigkeitsverteilung wurden vertikal gebinnt, mit $dz = 500 \text{ m}$. Die gestrichelte dünne schwarze Linie zeigt die thermische Tropopause, wenn 1,5 km über der Orographie abgeschnitten wird. Durchgezogene (gestrichelte) weiße Linien markieren Bereiche in denen die Abnahme (Zunahme) des Horizontalwinds mit der Höhe 75% der starken vertikalen Windscherung ($S^2 \geq 4 \cdot 10^{-4} \text{ s}^{-2}$) ausmachen. Modifizierte Abbildung aus Kaluza et al. (2021).

ebenfalls unter diesen kritischen Wert reduzieren und durch dynamische Instabilität Turbulenz erzeugen (Pavelin et al., 2001; Lane et al., 2004; Koch et al., 2005; Wilms et al., 2020). Aber auch großskalige Schwerellen können, wenn sie Überschlagen, durch konvektive Instabilität zu Turbulenz führen (Guarino et al., 2016; Wilms et al., 2020), wobei die statische Stabilität gering ist. Durch starke Windscherung sind kleine Richardson-Zahlen allerdings auch in statisch stabilen Schichten der Atmosphäre möglich, beispielsweise in der Tropopausenregion, oder der Stratosphäre.

1.4. Spurengasverteilung und -transport an Transportgrenzflächen

1.4.1. Verteilung von Spurengasen

Als Spurengase werden Gase bezeichnet, die in der Atmosphäre nur in Spuren, d.h. in geringen Konzentrationen vorkommen. Ihr Gesamtanteil liegt bei weniger als 1%. Dabei

1. Grundlagen

haben Spurengase einen großer Einfluss auf Strahlungsbilanz der Erde, sowie auf chemische Prozesse in der Atmosphäre. Aufgrund von sehr unterschiedlichen Aufenthaltszeiten, ebenso wie verschiedenen chemischen und physikalischen Eigenschaften, ist die räumliche und zeitliche Verteilung von Spurengasen sehr vielfältig (Seinfeld und Pandis, 2016). Im Folgenden werden die für diese Arbeit wichtigsten Spurengase etwas genauer beschrieben.

Distickstoffmonoxid

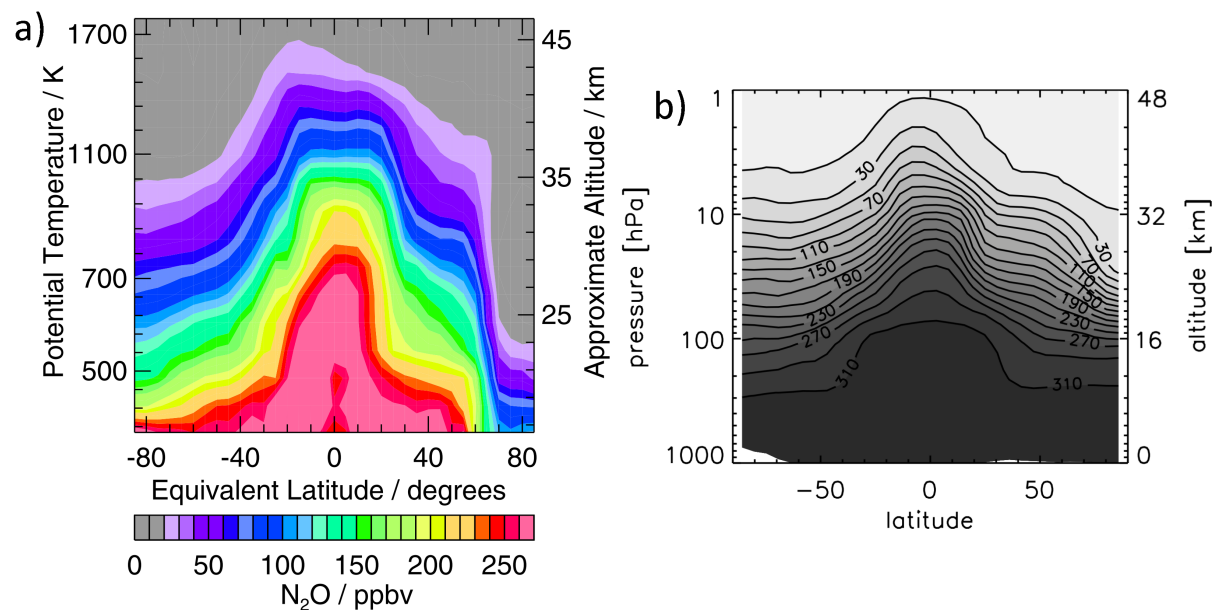


Abbildung 1.6.: Zonal gemittelte N_2O -Verteilungen. a) Für den Zeitraum zwischen dem 10. und 16. März 2005 aus Daten des MLS-Instruments des Aura Satelliten. Modifizierte Abbildung aus Manney et al. (2007). b) Aus dem CMAM-Modell für den März 2000. Modifizierte Abbildung aus Hegglin und Shepherd (2007).

Distickstoffmonoxid (N_2O), das auch als Lachgas bezeichnet wird, ist ein Treibhausgas das ungefähr 300-mal klimawirksamer als CO_2 ist und dessen Quellen ausschließlich in der Troposphäre liegen (Seinfeld und Pandis, 2016). Die Hauptquellen von N_2O sind mikrobiologische Prozesse in Ozeanen und Böden, sowie Biomassenverbrennung. Sie können sowohl natürlich, als auch anthropogen sein. Die chemische Lebenszeit¹ von N_2O beträgt ungefähr 120 Jahre (Ko et al., 2013). In der Troposphäre ist N_2O annähernd homogen verteilt, wie Abbildung 1.6b zeigt, nimmt aber zurzeit mit einer jährlichen Rate von $0,99 \text{ ppbv}^2$ zu (Ehhalt et al., 2001; WMO (World Meteorological Organization), 2021). Unterhalb von 25 km gibt es keine chemischen Senken. Diese liegen also in der Stratosphäre und sind die Reaktion mit angeregtem Sauerstoff ($O(^1D)$) und vor allem die Fotodissoziation, die mit zunehmender Höhe größer wird. Dies hat zur Folge, dass das N_2O -Mischungsverhältnis in der Stratosphäre mit zunehmender Höhe abnimmt (Abbildung 1.6). In der UTLS ist N_2O ein konservatives Spurengas, d.h. es ist chemisch inert und hat keine Quellen und

¹die Zeit bis das Mischungsverhältnis eines Gases durch chemische Abbauprozesse auf das e^{-1} -Fache seines ursprünglichen Werts abgefallen ist

²parts per billion volume

Senken. Damit wird das Mischungsverhältnis an der Tropopause nur durch die Dynamik kontrolliert. Wegen der homogenen Verteilung in der Troposphäre ist N_2O zudem gut geeignet um Austauschprozesse zwischen Troposphäre und Stratosphäre zu untersuchen. Allerdings ist aufgrund des schwachen vertikalen Gradienten an der Tropopause ist eine hohe Messgenauigkeit nötig. Das N_2O kann aufgrund des vorhandenen Spurengasgradienten auch zur Bestimmung einer chemischen Tropopause (Abschnitt 1.1.1) genutzt werden. Abbildung 1.6a zeigt außerdem, dass die N_2O -Isoplethen die Isentropen schneiden, d.h. sie verlaufen nicht horizontal. In den Bereichen von ungefähr $65^\circ N$, $25^\circ N$ und $25^\circ S$ verlaufen die Isoplethen annähernd senkrecht, d.h. es existieren starke horizontale Spurengasgradienten, wodurch sie Transportbarrieren für den quasi-horizontalen Transport in der Stratosphäre zeigen. Dabei handelt es sich um die sogenannte „tropical pipe“ (bei 20° - 30°) und den polaren Wirbel. Sie entstehen durch signifikant unterschiedliche vertikale Transportregime in Tropen, Extratropen und im Winter in der polaren Regionen, die sich durch die Brewer-Dobson-Zirkulation ergibt (Abschnitt 1.4.2).

Kohlenstoffmonoxid

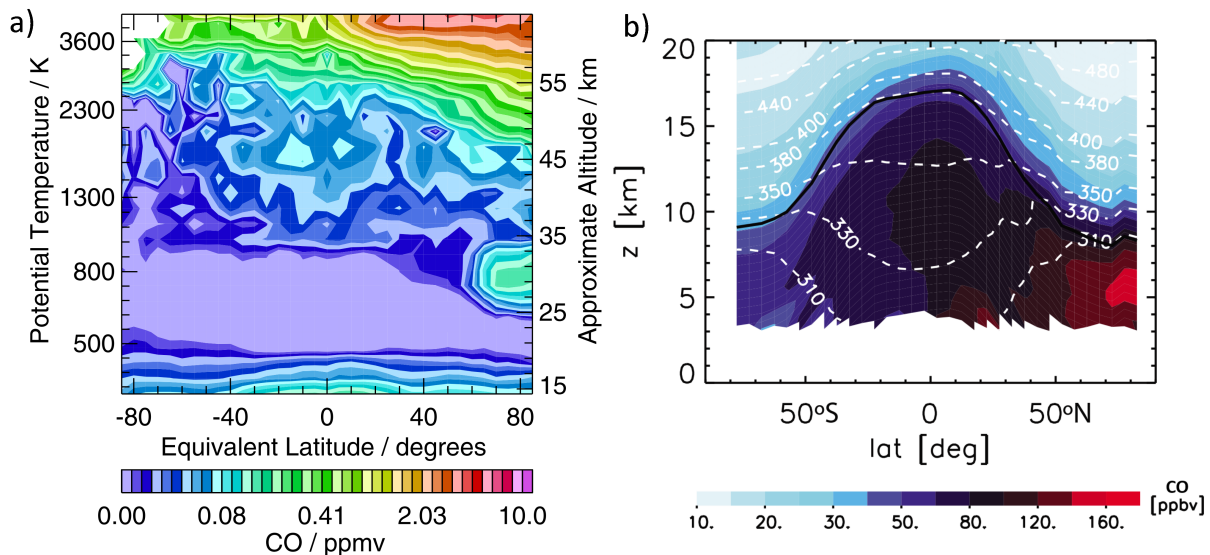


Abbildung 1.7.: Zonal gemittelte CO-Verteilung. a) Für den Zeitraum zwischen dem 10. und 16. März 2005 aus Daten des MLS -Instruments des Aura Satelliten. Modifizierte Abbildung aus Manney et al. (2007). b) Für der Zeitraum von Dezember bis Februar der Jahre 2004 bis 2008 aus ACE-FTS-Satellitendaten in tropopausenrelativen Koordinaten, die durch die jährliche mittlere Tropopausenhöhe skaliert wurden. Die dicke schwarze Linie zeigt die thermische Tropopause und gestrichelte weiße Linien Isentropen. Modifizierte Abbildung aus Gettelman et al. (2011).

Die größten Quellen von Kohlenstoffmonoxid, oder auch Kohlenmonoxid, sind Biomassenverbrennung und Verbrennung fossiler Brennstoffe. Diese liegen hauptsächlich in der Troposphäre und sind stark anthropogen beeinflusst. Daher weist CO auch einen starken Jahresgang auf (Schoeberl et al., 2006). In Abbildung 1.7b ist außerdem zu erkennen, dass die Mischungsverhältnisse in der Troposphäre, aufgrund der unterschiedlichen Verteilung

1. Grundlagen

der Quellen, auf der Nordhalbkugel größer sind als auf der Südhalbkugel. In der Stratosphäre ist die Methanoxidation die wichtigste Quelle für CO, wodurch das Mischungsverhältnis in der oberen Stratosphäre wieder ansteigt (Abbildung 1.7a). Senken von CO sind hauptsächlich die Reaktion mit Hydroxid (OH)-Radikalen und Aufnahme durch Böden. In der Troposphäre hat CO eine chemische Lebenszeit von 30 bis 90 Tagen und in der Stratosphäre von 2 bis 3 Monaten (Hoor et al., 2004; Pfister et al., 2004). Aufgrund der, im Vergleich zu den Transportzeitskalen, kurzen Lebenszeit weist es in der UTLS einen deutlichen größeren vertikalen Gradienten, sowie eine höhere Variabilität auf als N₂O. In einer ungestörten Stratosphäre (d.h. ohne Mischung mit der Troposphäre) liegt das Gleichgewichtsmischungsverhältnis von CO bei ungefähr 15 ppbv (Flocke et al., 1999). Es wird durch das Gleichgewicht von CO-Abbau und der langsameren Bildung aus Methan bestimmt. Jedes Mischungsverhältnis über diesem Wert ist also ein Hinweis auf einen troposphärischen Einfluss, d.h. dass troposphärische Luft innerhalb der chemischen Lebenszeit von CO (d.h. 2 bis 3 Monate) in die Stratosphäre transportiert wurde. Durch den abwärtsgerichteten Transport im polaren Wirbel ist die Wirbelgrenze bei 65°N (Abbildung 1.7) anhand des horizontalen Spurengasgradienten auch beim CO-Mischungsverhältnis zu beobachten, ähnlich wie beim N₂O (Abbildung 1.6).

Ozon

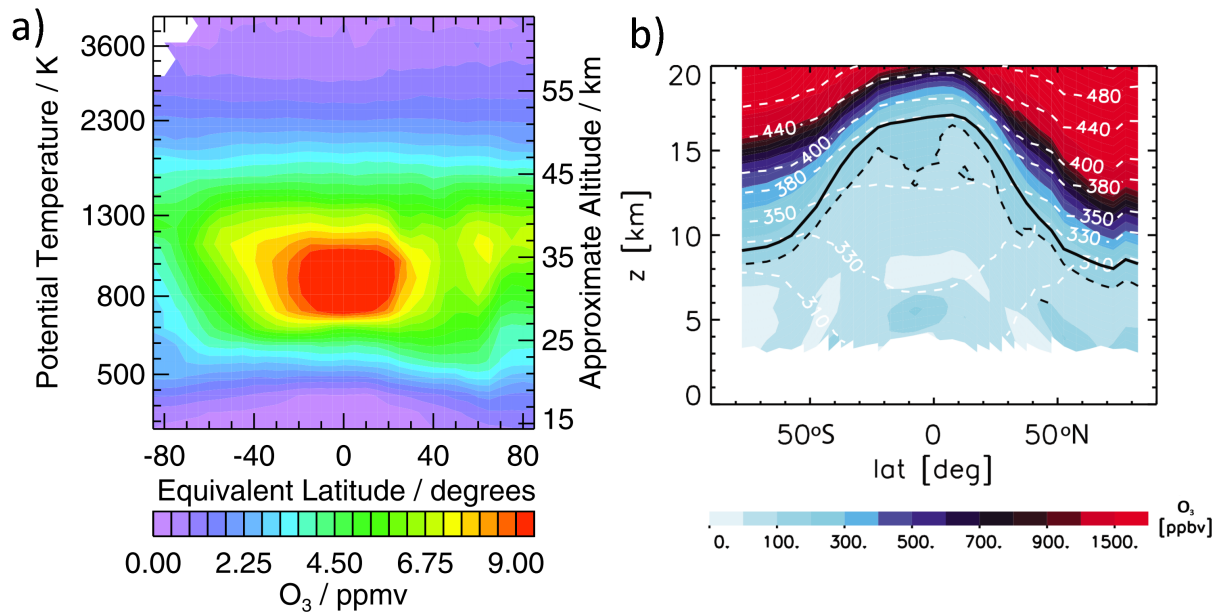


Abbildung 1.8.: Zonal gemittelte O₃-Verteilung. a) Für den Zeitraum zwischen dem 10. und 16. März 2005 aus Daten des MLS-Instruments des Aura Satelliten. Modifizierte Abbildung aus Manney et al. (2007). b) Für den Zeitraum von Dezember bis Februar der Jahre 2004 bis 2008 aus ACE-FTS-Satellitendaten in tropopausenrelativen Koordinaten, die durch die jährliche mittlere Tropopausenhöhe skaliert wurden. Die dicke schwarze Linie zeigt die thermische Tropopause, die gestrichelte schwarze Linie die 100 ppbv O₃-Kontur und gestrichelte weiße Linien Isentropen. Modifizierte Abbildung aus Gettelman et al. (2011).

Als Ozon wird 3-atomiger Sauerstoff bezeichnet, der ein starker Absorber für ultraviolet-

te Strahlung ist. In 20 bis 30 km Höhe weist Ozon sein Maximum auf (Abbildung 1.8a) und bildet die sogenannte Ozonschicht. In der Stratosphäre befindet sich somit auch ein Großteil des atmosphärischen Ozons. Allerdings findet sich Ozon auch in Bodennähe, wo er durch Stickstoff- und volatile organische Verbindungen gebildet wird. Durch die Absorptionsbanden im infraroten Frequenzbereich ist O_3 zudem ein wichtiges anthropogenes Treibhausgas.

In der Troposphäre sind die größten Quellen von Ozon photochemische Prozesse und der Transport aus der Stratosphäre, die sowohl natürlich, als auch anthropogen sein können. Die wichtigsten Senken von Ozon sind ebenfalls photochemische Prozesse. Aufgrund der kurzen Lebensdauer, die bei Tagen bis Wochen liegt (Ehhalt et al., 2001; WMO (World Meteorological Organization), 2021), ist Ozon in der Troposphäre ungleichmäßig verteilt und weist zudem einen starken Jahresgang auf. Typischerweise liegt das Mischungsverhältnisse von O_3 in der Troposphäre zwischen 15 und 100 ppbv (Abbildung 1.8b).

Die chemische Lebenszeit von Ozon beträgt in der unteren Stratosphäre mehrere Monate (Sankey und Shepherd, 2003; Shepherd, 2007). Die größte stratosphärische Quelle von Ozon ist die photochemische Dissoziation aus Sauerstoff, die mit dem Chapman-Reaktionszyklus (Chapman, 1930) beschrieben werden kann und das Vertikalprofil bestimmt. Dabei steigt das O_3 -Mischungsverhältnis mit zunehmender Höhe an und erreicht sein Maximum in der Ozonschicht mit Werten in der Größenordnung von mehreren ppmv³ (Abbildung 1.8). Ähnlich wie beim N_2O ist auch beim O_3 ein vertikaler Spurengasgradient vorhanden, der die Bestimmungen einer chemischen Tropopausenhöhe erlaubt, wie in Abschnitt 1.1.1 beschrieben wurde.

Eine wichtige Senke von Ozon sind katalytische Reaktionen, die das ganze Jahr ablaufen. Im Winter und Frühling findet zusätzlich der katalytische Ozonabbau im polaren Wirbel statt. Dadurch entsteht, wie beim N_2O , ein horizontaler Spurengasgradient über die Wirbelgrenze. Bis auf diese Ausnahme im polaren Frühling stimmen die O_3 - (Abbildung 1.8) und N_2O -Verteilungen (Abbildung 1.6) in der unteren Stratosphäre überein. Im Gegensatz dazu sind in der mittleren Stratosphäre deutliche Unterschiede zu erkennen.

1.4.2. Spurengastransport

In dieser Arbeit beschreibt der Begriff Mischung das Mischen von zwei Luftmassen mit unterschiedlicher chemischer Zusammensetzung (Mischungsverhältnis). Insbesondere stellt Mischung hier einen irreversiblen Prozess dar, d.h. die Entropie des Luftpakets nimmt zu, zum Beispiel durch Turbulenz oder Diffusion. Das bedeutet die potentielle Wirbelstärke des Luftpakets ändert sich durch nicht-konservative Prozesse. Im Gegensatz dazu ist mit Advektion der reversible Transport von Luftmassen gemeint.

In der UTLS gibt es hauptsächlich drei Transportwege für Spurengase. Der globale Transportmechanismus für Spurengase ist die Brewer-Dobson-Zirkulation (Butchart, 2014), wobei troposphärische Luftmassen hauptsächlich in den Tropen durch Konvektion in die Stratosphäre (Holton et al., 1995) gelangen. Der zweite Weg ist der quasi-isentrope Transport von Spurengasen, d.h. entlang von Isentropen, aber durch diabatische Prozesse verändert sich die PV. Außerdem können Spurengase in der UTLS durch kleinskaliges Mischen und durch lokale und regionale Prozesse transportiert werden. Dies kann der Transport durch Schwerewellen, der Austausch im Bereich der Strahlströme, bzw. Tropo-

³parts per million volume

1. Grundlagen

pausenfallen, aber auch der Austausch durch troposphärische Einflüsse wie Konvektion, oder großräumige Förderbänder (sogenannte „warm conveyor belts“) sein, vor allem in den mittleren Breiten.

Die stratosphärische Zirkulation

Der Transport von Spurengasen in die tiefe Stratosphäre (Brewer-Dobson-Zirkulation; Butchart (2014)) findet fast ausschließlich über die tropische Tropopause (Holton et al., 1995; Plumb, 2007) und anschließendes diabatisches Aufsteigen statt. Der diabatische Antrieb wird dabei nicht durch Strahlung oder Konvektion angetrieben, sondern durch die Dynamik, d.h. durch das Brechen von planetaren Wellen in der oberen Stratosphäre. Abbildung 1.3 zeigt das Transportschema im Winter. Die Mischung, bzw. der Transport von den Tropen zu den Polen läuft annähernd entlang von Isentropen und findet auf zwei verschiedenen Ästen statt. Diese werden durch das Brechen von Wellen auf unterschiedlichen Skalen angetrieben (Plumb, 2002, 2007; Butchart, 2014). In den Extratropen existiert ein zusätzlicher Antrieb durch brechende Schwerewellen, der sogenannten extratropischen Pumpe (Holton et al., 1995). Der untere, bzw. flache Zweig liegt in der unteren Stratosphäre (380 - 500 K) und wird durch synoptische Wellen zu jeder Jahreszeit angetrieben. Durch bidirektionale Mischungsprozesse auf einer Zeitskala von Wochen hat er einen Einfluss auf die chemische Zusammensetzung der Luftmassen, erzeugt aber keinen Massentransport (Bönisch et al., 2011). Planetare Wellen treiben den oberen, bzw. tiefen Zweig der Zirkulation in der oberen Stratosphäre und Mesosphäre nur im Winter an. Diese Residualzirkulation hat eine Transportzeit von ungefähr 5 Jahren (Plumb (2002)) und erzeugt einen Netto-Massentransport. An den Polen sinkt die Luft innerhalb des polaren Wirbels diabatisch ab (Plumb, 2007) und kann wieder in die Troposphäre gelangen. Eine ausführliche Beschreibung der Dynamik der Stratosphäre steht z.B. in Holton et al. (1995). Der Transport in der Stratosphäre wird z.B. in Plumb (2002) beschrieben.

Spurengastransport durch Gebirgswellen

Ein spezieller Typ von Schwerewellen (siehe Abschnitt 1.2) sind Gebirgswellen, die beim Überströmen von Bergen, bzw. orographischen Hindernissen entstehen. Der Transport und die Mischung von Spurengasen unter dem Einfluss von Gebirgswellen ist Bestandteil einiger Studien (z.B. Langford et al., 1996; Teitelbaum et al., 1996; Schilling et al., 1999; Moustououi et al., 2010; Heller et al., 2017).

Wenn Gebirgswellen brechen können sie Turbulenz erzeugen und so den Transport und die Verteilung von Spurengasen in der Atmosphäre beeinflussen (Danielsen et al., 1991; Moustououi et al., 2010). Bei einer Gebirgswelle kommt es zu Schwankungen der Spurengasmischungsverhältnisse auf einer festen Höhe (Schilling et al., 1999; Smith et al., 2008). Dadurch können vertikale Spurengasflüsse, die aus der Vertikalkomponente des Windes und einem Spurengas bestimmt werden, erzeugt werden (Schilling et al., 1999). Die Berechnung vertikaler Spurengasflüsse wird in Abschnitt 2.1.1 beschrieben. Bei einem horizontalen Flug durch eine Gebirgswelle weißt die potentielle Temperatur und damit auch die Spurengase einen Phasenversatz von 90° zur vertikalen Windgeschwindigkeit auf. Das bedeutet ein Wellenberg, bzw. ein Wellental bei der vertikalen Windgeschwindigkeit liegt 90° vor dem Wellenberg, bzw. Wellental eines Spurengases, da die vertikale

Windgeschwindigkeit die Ursache für die Änderung des Spurengasmischungsverhältnisses ist (Pavelin et al., 2002; Lin, 2007; Schilling, 1999). Die Mischung der Spurengase kann durch Schwerewellen induzierte Turbulenz und Wellenbrechen (Lamarque et al., 1996; Pavelin et al., 2002; Whiteway et al., 2003; Koch et al., 2005; Lane und Sharman, 2006) erfolgen, da dies diabatische Prozesse sind. Dabei können sowohl längere Wellen, bis 300 km (Danielsen et al., 1991), als auch kürzere Wellen, d.h. < 30 km (Moustaoui et al., 2010) einen signifikanten Transportbeitrag leisten.

Spurengastransport an Tropopausenfalten

Die Entstehung und einige Eigenschaften von Tropopausenfalten wurden in Abschnitt 1.1.2 beschrieben. Aufgrund von turbulenten Prozessen an der deformierten Tropopause ist der Austausch von troposphärischen und stratosphärischen Luftmassen (STE) möglich, wodurch Tropopausenfalten einen Einfluss auf die Verteilung und den Transport von Spurengasen in der UTLS haben. Die Scher- und Turbulenzregionen im Randbereich einer Tropopausenfalte sind im Bereich von Spurengasgradienten mit Spurengasflüssen verbunden (Shapiro, 1980; Keyser und Shapiro, 1986). Dabei kann stratosphärische Luft tief in die Troposphäre, d.h. bis in die Grenzschicht gelangen (Shapiro, 1980; Lamarque et al., 1996; Stohl et al., 2003). So ein Transport wird auch als STT (**S**tratosphere-**T**roposphere-**T**ransport) bezeichnet. Es ist aber auch möglich, dass troposphärische Luftmassen in die untere Stratosphäre transportiert werden, abgekürzt TST (**T**roposphere-**S**tratosphere-**T**ransport), wobei das Einströmen an der Tropopausenfalte oberhalb des Strahlstroms durch Scherung, Turbulenz, oder Strahlung geschieht (Shapiro et al., 1980; Stohl et al., 2003). In den mittleren Breiten dominiert der Transport von der Stratosphäre in die Troposphäre (Sprenger et al., 2003; Škerlak et al., 2015; Reutter et al., 2015; Boothe und Homeyer, 2017). Tropopausenfalten sind damit, vor allem in den Extratropen, ein wichtiger Prozess für den vertikalen Austausch von Spurengasen zwischen Troposphäre und Stratosphäre (Reed und Danielsen, 1958; Danielsen, 1968; Shapiro, 1980).

Spurengastransport am polaren Wirbel

Die polare UTLS wird durch die Entwicklung des Polarwirbels beeinflusst. Durch diabatisches Absinken innerhalb des Wirbels (siehe Abschnitt 1.1.3) wird der Anteil von Luftmassen aus der oberen Stratosphäre erhöht. Die chemische Zusammensetzung der Luftmassen wird durch den ozonabbauenden Reaktionszyklus zusätzlich verändert (Solomon, 1999). Da die Luftmassen innerhalb des polaren Wirbels außerdem größtenteils isoliert sind, erhöht sich auch in der UTLS der Anteil der Luft mit einem höheren mittleren Alter (z.B. Engel et al., 2002; Plöger et al., 2015; Krause et al., 2018). Das mittlere Alter kann aus den Beobachtungen von langlebigen Spurengasen (wie z.B. CO_2 , Schwefelhexafluorid (SF_6), N_2O) bestimmt werden. Daher zeigen die niedrigen Mischungsverhältnisse, die in den N_2O -Verteilungen von Abbildung 1.6 am Nordpol zu erkennen sind, ebenfalls an, dass es sich um ältere Luftmassen handelt.

Durch die Isolation, das diabatische Absinken von Luft aus der oberen Stratosphäre sowie die chemische Prozessierung unterscheiden sich die Zusammensetzung und die Verteilung der Spurengase innerhalb und außerhalb des polaren Wirbels auf einer Isentrope (Plumb et al., 2000; Polvani et al., 2010; Jesswein et al., 2021). Dabei sind die Luftmassen innerhalb des jeweiligen Regimes auf den Isentropen aber gut durchmischt, d.h. sie haben nur

1. Grundlagen

einen kleinen horizontalen Gradienten. Am Übergang zwischen beiden Luftmassen führt dieser Unterschied jedoch zu starken horizontalen Gradienten bei langlebigen Spurengasen, wie z.B. N_2O (Hartmann et al., 1989; Schoeberl und Hartmann, 1991), und bei der potentiellen Wirbelstärke (Plumb und Ko, 1992; Holton et al., 1995; Waugh et al., 1997; Müller et al., 2005).

Durch verschiedene in Abschnitt 1.1.5 vorgestellte Prozesse kann die Transportbarriere überwunden werden. Besonders im Frühling, wenn sich der polare Wirbel auflöst, können die chemisch prozessierten polaren Luftmassen aus der unteren Stratosphäre in die UTLS transportiert und gemischt werden. Damit beeinflussen sie auch chemische Zusammensetzung der UTLS in den mittleren Breiten (Knudsen und Groß, 2000; Bönisch et al., 2009; Krause et al., 2018).

1.5. Ziele und Gliederung der Arbeit

Die Verteilung und die chemische Zusammensetzung der Luftmassen in der UTLS hat einen großen Einfluss auf Strahlungsantrieb der Erdatmosphäre (Riese et al., 2012). Daher ist das Verständnis der ablaufenden Transport-, Mischungs- und Umverteilungsprozesse, die zum Beispiel durch Schwerewellen oder Scherung ausgelöst werden können, besonders an, bzw. über dynamische Transportgrenzen, wie Tropopause und polarer Wirbel, von essentieller Bedeutung. Trotz einiger Studien in diesen Bereichen gibt es wenige direkte Beobachtungen, da hochauflösende Spurengasmessungen in der Region und zum Zeitpunkt des Mischungsereignisses nötig sind. Die Studien weisen mitunter auch große Unterschiede auf und sind zudem nur teilweise prozessorientiert. Besonders die quantitative Abschätzung von Mischung, beziehungsweise diabatischen Spurengasflüssen, durch beispielsweise orographische Schwerewellen an der Tropopause oder am Rand des polaren Wirbels, oder der scherungsinduzierte Austausch an Tropopausenfalten, weisen daher noch einige Unsicherheiten auf.

In dieser Arbeit wird der Transport und die Mischung von Spurengasen an Transportgrenzen in der Tropopausenregion untersucht. Dabei soll der Frage nachgegangen werden, ob es möglich ist einzelne Mischungsereignisse zu identifizieren und diese nach Möglichkeit zu quantifizieren. Hierzu werden drei Fallbeispiele von flugzeuggetragenen in-situ (d.h. der Sensor befindet sich am Messort) Spurengasmessungen in der UTLS, während den Kampagnen DEEPWAVE (**DEEP** Propagating Gravity **WAVE** Experiment over New Zealand), GW-LCYCLE II (**G**avity **W**ave - **L**ife **CYCLE** Experiment II) und SouthTRAC (**S**outhern hemisphere - **T**RAnsport **C**omposition dynamics), mit verschiedenen Zeit-Frequenz-Analysemethoden, Diagnosen von Spurengasverteilungen und durch die Nutzung numerischen Modelldaten ausgewertet.

In Abschnitt 2 werden die für die Arbeit wichtigen Analysemethoden sowie die genutzten numerischen Modelle vorgestellt.

Im ersten Auswertekapitel in Abschnitt 3 wird ein durch orographische Schwerewellen ausgelöstes Mischungsereignis an der Tropopause über den neuseeländischen Alpen untersucht. Mit Hilfe der durchgeführten Analysen soll in diesem Kapitel folgende Frage beantwortet werden: Kann gebirgswelleninduzierte Turbulenz die Zusammensetzung der UTLS nachhaltig beeinflussen?

Die durch Scherung erzeugte Mischung im Bereich einer Tropopausenfalte vor der norwegischen Küste wird in Abschnitt 4 analysiert. Folgende Frage soll im Rahmen dieses Kapitels beantwortet werden: Gibt es einen Zusammenhang zwischen Mischung, Spurengasflüssen und Instabilitäten?

In Abschnitt 5 wird Mischung an einem zerfallenden PV-Filament am Rand des antarktischen polaren Wirbels in der unteren Stratosphäre über der Antarktische Halbinsel untersucht. Anhand der in diesem Kapitel durchgeführten Untersuchungen soll die nachfolgende Fragestellung beantwortet werden: Können orographisch erzeugte Schwerewellen zum Austausch von Luftmassen aus dem polaren Wirbel und den mittleren Breiten beitragen?

Eine Zusammenfassung der Arbeit und eine Ausblick auf weitere möglich Analyseschritte und Anwendungsmöglichkeiten wird in Abschnitt 6 gezeigt.

2. Methoden

In diesem Abschnitt werden die in dieser Arbeit verwendeten Analysemethoden, bzw. deren Berechnungsweisen sowie die genutzten numerischen Modelldaten vorgestellt.

2.1. Diagnose des Transports durch Spurengasverteilungen

2.1.1. Spurengasflüsse

Um den Transport von Spurengasen zu charakterisieren, können kinematische Spurengasflüsse verwendet werden. Dies wird in den Arbeiten von Shapiro (1980); Schilling et al. (1999); Heller et al. (2017) für verschiedene Spurengase beschrieben.

Nach Shapiro (1980) kann die zeitliche Änderung eines konservativen Spurengases χ folgendermaßen beschrieben werden:

$$\frac{d\chi}{dt} = \frac{\partial\chi}{\partial t} + u \cdot \frac{\partial\chi}{\partial x} + v \cdot \frac{\partial\chi}{\partial y} + w \cdot \frac{\partial\chi}{\partial z} = 0$$

Dabei sind u , v , w die drei Windkomponenten (Zonal-, Meridional- und Vertikalwind), t die Zeit und x , y , z die drei Raumrichtungen.

Durch die Verwendung der Reynoldsmittelung (z.B. Stull, 1988; Kraus, 2004; Foken, 2016) können die Messwerte (χ , u , v , w) in einen räumlichen, bzw. zeitlichen Mittelwert $\bar{\chi}$ und eine Abweichung χ' zerlegt werden:

$$\begin{aligned}\chi(t) &= \bar{\chi} + \chi'(t) \\ \Leftrightarrow \chi'(t) &= \chi(t) - \bar{\chi}\end{aligned}\tag{2.8}$$

Zur Berechnung des Mittelwertes wird in dieser Arbeit das gleitende Mittel genutzt:

$$\bar{\chi} = \frac{1}{t_2 - t_1} \int_{t_1}^{t_2} \chi(t) dt\tag{2.9}$$

dabei wird $t_2 - t_1$ als Mittelungsintervall, oder Mittelungszeit (oder Integrationsbreite) bezeichnet. Das Mittelungsintervall bestimmt die obere Grenze der Skalen und stellt demnach einen Tiefpassfilter dar, das heißt hohe Frequenzanteile eines Signals werden herausgefiltert und niedrige Frequenzen durchgelassen.

Durch die Annahme, dass die mittlere vertikale und horizontale Advektion von $\bar{\chi}$ vernachlässigt werden können, es also keine Quellen und Senken gibt (Shapiro, 1978), kann die lokale zeitliche Änderung durch die vertikale und die horizontale Divergenz der turbulenten Flüsse berechnet werden:

$$\frac{d\bar{\chi}}{dt} = -\frac{\partial(\overline{u'\chi'})}{\partial x} - \frac{\partial(\overline{v'\chi'})}{\partial y} - \frac{\partial(\overline{w'\chi'})}{\partial z}$$

Wird weiterhin angenommen, dass der Hauptbeitrag von den vertikalen Flussdivergenzen kommt, die horizontalen Beiträge, aufgrund der schwachen Horizontalgradienten der Spurengase, demnach vergleichsweise klein sind, ergibt sich:

$$\frac{d\bar{\chi}}{dt} = -\frac{\partial(\overline{w'\chi'})}{\partial z}$$

Damit gelten nur vertikale Mischungsprozesse innerhalb von Turbulenzen als Mechanismus für die zeitliche Änderung von $\bar{\chi}$ (Shapiro, 1980), d.h. nur die Fluktuationen der vertikalen Windgeschwindigkeit tragen zur turbulenten Mischung und Spurengasflüssen bei, wenn die Spurengase einen Vertikalgradienten haben.

Die Kovarianz zwischen zwei Messgrößen, in diesem Fall der mittlere vertikale Spurengasfluss, wird durch die Integration über bestimmte räumliche, oder zeitliche Intervalle gebildet (Schilling, 1999):

$$\overline{w'\chi'} = \frac{1}{\tau_2 - \tau_1} \int_{\tau_1}^{\tau_2} w'(\tau) \chi'(\tau) d\tau \quad (2.10)$$

Der lokaler vertikaler Spurengasfluss (Shapiro et al., 1980; Heller et al., 2017) wird durch

$$w'\chi'(t) = w'(t) \chi'(t) \quad (2.11)$$

beschrieben.

Bei einer linearen Welle und ohne Phasenversatz zwischen beiden Größen, wäre das Mittel 0. Werte ungleich 0 geben zwar einen Transport an, können aber keine Aussage darüber machen, ob der Transport irreversibel ist. Dazu sind weitere Analysen notwendig.

Im Weiteren bezeichnet w die vertikale Windgeschwindigkeit (bzw. in Abschnitt (3.5.2) die potentielle Temperatur) und χ ein konservatives Spurengas wie CO, N₂O, oder O₃. Die Verwendung der potentielle Temperatur anstelle eines Spurengases ergibt den diabatischen Wärmefluss ($\frac{d\bar{\theta}}{dt} \approx -\frac{\partial(\overline{w'\theta'})}{\partial z}$).

2.1.2. Mischungsdiagnostik durch Spurengaskorrelationen

Durch den Vergleich von zwei Spurengasen ist es möglich den Effekt von Transport und Mischung auf die Entwicklung der Luftmassenzusammensetzung in der UTLS zu analysieren (Fischer et al., 2000; Hoor et al., 2002, 2004; Pan et al., 2007). Dabei muss ganz grundsätzlich zwischen den Zeitskalen der betrachteten Transportprozesse und der dynamischen Prozesse unterschieden werden. Diese reicht von der Untersuchung der stratosphärischen Zirkulation, die auf Zeitskalen von Jahren abläuft, bis zur Analyse von Mischungsprozessen, z.B. an der Tropopause, die auf Skalen von Wochen abläuft und bei kurzlebigeren Substanzen mit anderen Eigenschaften eine Rolle spielen. Die Mischungsverhältnisse der Spurengase an einem bestimmten Ort in der Atmosphäre sind im Allgemeinen von den Quellen und Senken, der chemischen Lebenszeit und den Transportzeitskalen abhängig. Die Verwendung von Spurengaskorrelationen erlaubt die Analyse von Mischung, d.h. den irreversiblen Austausch von Spurengasen, die einen Gradienten aufweisen. Dadurch lassen sich die Effekte von reversiblen Prozessen (Transport, bzw. Advektion) von Mischungsprozessen (im Sinne des Spurenstoffaustauschs) trennen. Die Spurengase können nach ihrer chemischen Lebenszeit unterschieden werden, also ob die sie eine lange (mehrere

2. Methoden

Monate bis Jahre), wie zum Beispiel N_2O oder Methan (CH_4), oder eine kurze (Tage bis einige Wochen), beispielsweise CO oder Schwefeldioxid (SO_2), chemische Lebenszeit im Vergleich zur Zeitskala des Transports haben.

Als Resultat der schnellen horizontalen Vermischung und des langsamen vertikalen Transports hat die Korrelation zweier langlebiger Spurengase einen kompakten, aber nicht notwendigerweise, linearen Zusammenhang (Plumb und Ko, 1992; Volk et al., 1997; Sankey und Shepherd, 2003; Plumb, 2007; Sala et al., 2014). Wenn die chemische Lebenszeit beider Spurengase zusätzlich größer als die vertikale Transportzeitskala ist, hat die Korrelation einen kompakten und linearen Verlauf (Plumb und Ko, 1992; Plumb, 2007). Mischung zwischen unterschiedlichen Luftmassen kann bei einem linearen Zusammenhang der Spurengase hingegen nicht erkannt werden (Plumb et al., 2000). Sobald allerdings zusätzliche Quellen, oder Senken (z.B. der polare Wirbel, oder Biomassenverbrennung), bei einem Spurengas wirkt, bzw. bei beiden Spurengasen unterschiedlich wirken und der lineare Zusammenhang zwischen ihnen gestört wird, kann die Korrelation für die Analyse von Mischung eingesetzt werden.

Für das Beispiel von Spurengasen innerhalb des Polarwirbels heißt das, dass sich die Ozonkorrelation ohne ozonzerstörende Prozesse nicht verändert (Proffitt et al., 1992; Sankey und Shepherd, 2003) und kompakt bleibt (Plumb und Ko, 1992; Müller et al., 2001). Die Kompaktheit ist dabei allerdings ein Resultat der Isolation der Luftmassen. Aufgrund der schnellen vertikalen Advektion, ist die Zeitskala des quasi-horizontalen Transports im polaren Wirbelrand nämlich nicht signifikant kleiner (d.h. schneller), als der Vertikaltransport (Waugh et al., 1997). Erst durch das einsetzen halogen-katalytischer Reaktionen findet der chemische Ozonabbau statt, der die Korrelation verändert. Dabei ist zu beachten, dass auch Mischungsprozesse über den Rand des polaren Wirbels, die auf quasi-isentropen Flächen ablaufen (Proffitt et al., 1990; Müller et al., 2005), zu einer ähnlichen Veränderung der Korrelation führen können (Plumb et al., 2000), wodurch zusätzlich die Kompaktheit gestört werden kann (Müller et al., 2001). Da die Mischungsverhältnisse durch die Isolation des Ozons im polaren Wirbel außerhalb höher sind, als innerhalb (Proffitt et al., 1992; Tao et al., 2015), erhöht die Mischung zwischen beiden Luftmassen die O_3 -Werte. Dieser Effekt vergrößert sich, je stärker der Ozonabbau im Wirbel ist (Müller et al., 2001).

Bei der Korrelation von einem langlebigen und einem kurzlebigen Spurengas stellt sich ein anderer Zusammenhang ein. Im Falle kurzlebiger Spurengase, bei denen die chemische Lebensdauer in der Größenordnung der betrachteten Prozesse liegt, ergeben sich keine gleich verlaufenden Isoplethen wie im Falle der langlebigen Spurengase. Daher lassen sich diese zwar nicht zur Untersuchung der stratosphärischen Zirkulation nutzen, jedoch zur Untersuchung von Mischungsprozessen, z.B. an der Tropopause (oder allgemein im Bereich von Spurenstoffgradienten), die auf kürzeren Zeitskalen ablaufen. Eine häufig genutzte Spurengaspaarung, die zur Analyse von Mischung zwischen Troposphäre und Stratosphäre genutzt wird, ist die Korrelation von O_3 , als langlebiges Spurengas und CO, als kurzlebige Spurengas (Zahn et al., 2000; Fischer et al., 2000; Hoor et al., 2002; Pavelin et al., 2002; Hoor et al., 2004; Pan et al., 2004). Die Profile beider Spurengase haben an der Tropopause einen vertikalen Gradienten, wobei das O_3 -Mischungsverhältnis eine Zunahme und CO-Mischungsverhältnis eine Abnahme von Troposphäre zu Stratosphäre zeigt. Ohne den irreversiblen Austausch zwischen Troposphäre und Stratosphäre ergibt sich bei der O_3 -CO-Korrelation daher eine „L“-Form (Fischer et al., 2000), wie er in Abbildung 2.1 durch die blaue und schwarze Linie gezeigt ist. Der horizontale (troposphärische) Teil des L's ist durch hohe Variabilität von CO und annähernd konstantes O_3 gekennzeichnet

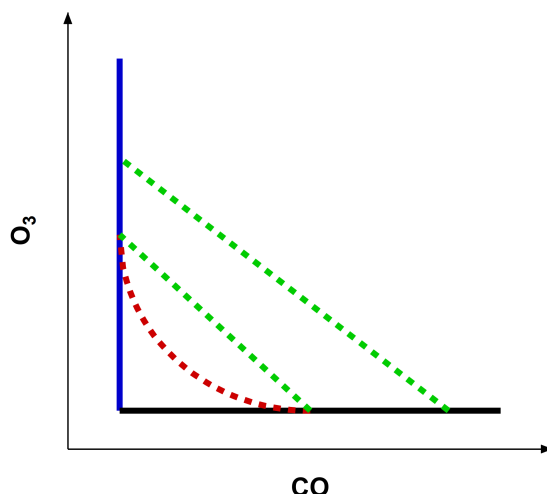


Abbildung 2.1.: Schemazeichnung der O_3 -CO -Korrelation. Die blaue und die schwarze Linie bilden die „L“-Form für den Fall ohne Mischung. Die beiden geraden grünen gestrichelten Linien repräsentieren schnelles, isentropes Mischen und damit irreversible Mischung zwischen Troposphäre und Stratosphäre. Die gekrümmte rote gestrichelte Linie zeigt ineffizientes, bzw. langsames Mischen bei dem das stratosphärische CO chemisch abgebaut wurde.

(schwarze Linie) und der vertikale (stratosphärische) Teil durch eine starke Zunahme des O_3 -Mischungsverhältnisses und eine geringe Variabilität des CO-Mischungsverhältnisses (blaue Linie).

Bei schneller Mischung (d.h. auf Zeitskalen, die kürzer sind, als der chemische Abbau) von Luftmassen mit unterschiedlicher Zusammensetzung etabliert sich in der Korrelation eine gerade Mischungslinie, die die beiden Reservoirte miteinander verbindet (Hoor et al., 2002; Pan et al., 2004; Müller et al., 2016). In Abbildung 2.1 zeigen dies die beiden grünen Linien. Mischungslinien ergeben sich aus Korrelationen zwischen Spurengasen, die komplementär in jeweils einem der jeweiligen Reservoirte, d.h. Troposphäre, bzw. Stratosphäre, definierte Hintergrundwerte haben. Bei vollständiger Vermischung sind die Mischungsverhältnisse homogenisiert, deshalb zeigen die Mischungslinien unvollständiges, bzw. aktives Mischen. Durch Abbauprozesse, oder wenn die chemische Lebenszeit kürzer ist als die Zeitskala der Mischung, sowie durch Mischen mit weiteren Luftmassen, verschwinden die ursprünglich geraden Mischungslinien nach längerer Zeit wieder und es entsteht eine gekrümmte Form (rote Linie in Abbildung 2.1). Eine Änderung in der Form der Kurve ist daher auch ein direktes Ergebnis von erhöhter Mischung relativ zur chemischen Zeitskala. D.h. bei der O_3 -CO-Korrelation ist die Krümmung weniger ausgeprägt, wenn die Mischung effizienter ist. Der Mischungsprozess selbst beeinflusst dabei beide Spurengase. Bei einer vollständigen Mischung ist auf der Korrelation nur noch ein Punkt zu sehen (Plumb und Ko, 1992; Waugh et al., 1997).

Mischungslinien sind ein direktes Zeichen für die Wirkung von Mischungsprozessen auf Spurengasverteilungen. Mit ihnen ist es möglich Austauschprozessen zwischen zwei unterschiedlichen chemischen Reservoirte, wie z.B. Troposphäre und Stratosphäre, oder innerhalb und außerhalb des Polarwirbels, bzw. irreversibles Mischen auf kurzen Zeitskalen (Tage bis wenige Wochen) zu identifizieren und zu untersuchen (Fischer et al., 2000; Zahn et al., 2000; Hoor et al., 2002; Pan et al., 2004). Treten mehrere Mischungslinien in

2. Methoden

einer Korrelation auf, können diese eindeutig einem Zeitpunkt, d.h. unterschiedlichen Mischungsereignissen und einem Ort, also verschiedenen Reservoirs zugeordnet werden. Dabei ist die Interpretation dieses Ansatzes unempfindlich dafür, wie die Mischung abgelaufen ist (Waugh et al., 1997), solange keine weiteren Luftmassen beteiligt sein. Korrelationen (z.B. O_3 -CO, O_3 - H_2O) können beispielsweise bei der Analyse von Spurengastransport und der Spurengasverteilung an Tropopausenfalten verwendet werden, um stratosphärische und troposphärische Luftmassen zu identifizieren, aber auch um Mischungsregionen an der Falte zu analysieren (Cho et al., 1999; Fischer et al., 2000; Zahn et al., 2000; Pan et al., 2007; Gettelman et al., 2011; Ungermann et al., 2013; Woiwode et al., 2018; Söder et al., 2021). Als Alternative zu O_3 kann auch das N_2O -Mischungsverhältnis in den Korrelationen eingesetzt werden, weil es in der Troposphäre einen definierten Wert aufweist. Aufgrund des schwachen Gradienten an der Tropopause wird zwar eine hohe Messgenauigkeit benötigt. Im Gegensatz zu O_3 ist N_2O aber ein konservatives Spurengas in der UTLS, wodurch Effekte auf die Korrelation durch chemische Reaktionen ausgeschlossen werden können.

Lineare Mischungslinien können außerdem Informationen über die ursprüngliche Zusammensetzung der Luftmassen liefern (Hoor et al., 2002). Dazu ist das Wissen über das Mischungsverhältnis an der Tropopause nötig. Durch die Verwendung von z.B. O_3 , oder N_2O ist es möglich den sogenannten troposphärischen Eintrittswert (bzw. Mischungsverhältnis an der Tropopause) von z.B. CO zu bestimmen (Hintsä et al., 1998; Hoor et al., 2004; Müller et al., 2016).

2.2. Zeit-Frequenz-Diagnostik

2.2.1. Die Wavelet-Analyse

Die Wavelet-Analyse ist ein mathematisches Werkzeug zur spektralen Analyse von nicht-stationären Daten, das heißt in dieser Arbeit von Zeitreihen flugzeuggetragener Messungen. Zur Lokalisierung von Leistungsschwankungen werden die Zeitreihen im Zeit-Frequenzbereich betrachtet. Dadurch ist es möglich die dominanten Moden zu identifizieren und deren zeitliche Entwicklung zu beobachten (Torrence und Compo, 1998; Mauder et al., 2007; Zhang et al., 2015). Wie auch schon in anderen Arbeiten (z.B. Strunin und Hiyama, 2004; Woods und Smith, 2010; Zhang et al., 2015; Román-Cascón et al., 2015; Heller et al., 2017; Portele et al., 2018; Serafimovich, 2006) wird die Wavelet-Analyse hier zur Analyse von Schwerewellen genutzt, d.h. um zu untersuchen mit welchen Wellenlängen und zu welchem Zeitpunkt, bzw. an welchem Ort sie auftreten.

Zur Veranschaulichung der Ergebnisse einer Wavelet-Analyse kann die Partitur eines Musikstückes verwendet werden. Diese liefert Informationen darüber wann welcher Ton, d.h. welche Frequenz, zu welchem Zeitpunkt, wie lange und mit welcher Lautstärke, also Amplitude, gespielt werden soll. Diese Information werden durch die Wavelet-Analyse aus einer Zeitreihe berechnet (Setz, 2011).

Gegenüber der Fourier-Analyse hat die Wavelet-Analyse also den Vorteil sowohl im Zeit-, als auch im Frequenzraum Informationen liefern zu können. Die Genauigkeit der Darstellung im Zeit-Frequenzraum ist dabei allerdings limitiert (Koch et al., 2005; Poularikas, 2010). So führt eine hohe Genauigkeit im Zeitbereich zu einer niedrigen Genauigkeit im Frequenzbereich und umgekehrt. Die Wavelet-Analyse stellt demnach einen Kompromiss

zwischen beiden dar.

Die kontinuierliche Wavelet-Transformation

Die kontinuierliche Wavelet-Transformation W_n einer diskreten Messzeitreihe x_n mit N Datenpunkten ist definiert als die Faltung der Zeitreihe mit einer lokalen Basisfunktion (Torrence und Compo, 1998; Jevrejeva et al., 2003; Nappo, 2012).

$$W_n(s) = \sum_{n=0}^{N-1} x_n \Psi^* \left[\frac{(n - \tau) \delta t}{s} \right] \quad (2.12)$$

Dabei ist n ein Zeitparameter (dimensionslose Distanz, lokalisierter Zeitindex, Positionsindex), s die Wavelet-Skala (Ausdehnungsparameter), Ψ eine Basisfunktion, die auch Wavelet genannt wird, $*$ steht für das komplex Konjugierte, τ ist ein lokalisierter Zeitindex (Positionsindex, Raumparameter, Translationsparameter) und δt ein einheitlicher Zeitschritt. Die Wavelet stellt dabei einen Bandpassfilter dar (Hudgins et al., 1993; Grinsted et al., 2004; Nappo, 2012), d.h. nur ein bestimmter Frequenzanteil des Signals wird durchgelassen. Für die kontinuierliche Wavelet-Transformation wird die Faltung für einen vordefinierten Frequenzbereich, sowie in festgelegten Frequenzschritten wiederholt. Dadurch ist es möglich ein Signal einem bestimmten Zeitpunkt und eine bestimmte Frequenz zuzuordnen.

Ähnlich den Fensterfunktionen bei der Fourier-Transformation, gibt es auch bei der Wavelet-Transformation viele verschiedene Basisfunktion, wie zum Beispiel die Haar-Wavelet, die Mexican-Hat-Wavelet, oder die Morlet-Wavelet. Die Wahl dieser Funktion ist vor allem davon abhängig welche Signale in der Zeitreihe analysiert werden sollen. Dazu müssen mehrere Faktoren berücksichtigt werden, wie zum Beispiel die Form, oder die Breite der Basisfunktion, da diese einen Einfluss auf die Analyse haben. Als Wavelet-Basisfunktion wird in dieser Arbeit die Morlet-Wavelet verwendet

$$\Psi_0(n) = \pi^{-1/4} \exp[i\omega_0 n] \exp\left[-\frac{n^2}{2}\right] \quad (2.13)$$

mit der dimensionslosen Frequenz $\omega_0 = 6$, wie sie in Torrence und Compo (1998); Woods und Smith (2010) beschrieben wird. Abbildung (A.1) im Anhang (A.1) zeigt den Realteil der Morlet-Wavelet. Aufgrund der guten Zeitauflösung (im Zeit-Frequenzraum) eignet sie sich gut zur Analyse von atmosphärischen Turbulenzen (Strunin und Hiyama, 2004; Mauder et al., 2007). Die Morlet-Wavelet ist eine komplexe Funktion, daher ist auch das Ergebnis der Wavelet-Transformation wiederum komplex. Aus dem Realteil und dem Imaginärteil der Transformation können damit auch die Amplitude und die Phase der Schwingungen bestimmt werden. In dieser Arbeit wird das Wavelet-Leistungsspektrum $|W_n|^2$ einer Zeitreihe verwendet.

Mit Hilfe der Wavelet-Frequenz ω_0 kann die Lokalisierung im Zeit-Frequenzbereich verändert werden. Das heißt, es kann ausgewählt werden, ob die Transformation eher den Frequenzbereich, oder den Zeitbereich auflösen soll. Je größer dabei ω_0 gewählt wird, desto besser ist die Auflösung im Frequenzbereich, d.h. desto schärfer wird eine bestimmte Frequenz getroffen. Ein Beispiel dazu findet sich im Anhang (A.1). Wegen der guten Balance zwischen Zeit- und Frequenzauflösung wird in dieser Arbeit mit einem Wert von $\omega_0 = 6$ gearbeitet.

2. Methoden

Zur einfachen Vergleichbarkeit zwischen den einzelnen Skalen einer Transformation und auch zum Vergleich mit der Wavelet-Transformation anderer Zeitreihen wird die Wavelet-Leistung normalisiert.

$$\Psi \left[\frac{(n - \tau) \delta t}{s} \right] = \left(\frac{\delta t}{s} \right)^{1/2} \Psi_0 \left[\frac{(n - \tau) \delta t}{s} \right] \quad (2.14)$$

Mit Ψ_0 als normalisierte, skalierte und translatierte Basisfunktion. Der Faktor $\left(\frac{\delta t}{s} \right)^{1/2}$ wird als Normalisierungsfaktor (Normalisierungskonstante) bezeichnet. Die hier genutzte Normalisierung mit der Varianz ist ein Maß der Leistung relativ zu weißem Rauschen (Torrence und Compo, 1998; Grinsted et al., 2004).

Durch die Verwendung von endlichen Zeitreihen entstehen bei der Transformation am Anfang und am Ende, aufgrund der nicht abgedeckten Periodenlängen Fehler. Um diesen Fehlern Rechnung zu tragen, markiert der sogenannte COI (**C**one **O**f **I**nfluence) Regionen im Wavelet-Spektrum bei dem Randeffekte eine Rolle spielen können (Torrence und Compo, 1998; Grinsted et al., 2004). Dabei beeinflusst die Wavelet-Frequenz auch den COI. Ein großes ω_0 erzeugt einen kleineren COI, d.h. der unbeeinflusste Teil des Spektrums wird kleiner (siehe Anhang (A.1)).

Um Bereiche mit statistisch signifikanter Wavelet-Leistung hervorzuheben, wird die Kontur des 95% Konfidenzniveaus (dies entspricht einer Signifikanz von 5%) gegenüber rotem Rauschen verwendet, wie in Torrence und Compo (1998) beschrieben.

Eine Ausführlichere Beschreibung der Wavelet-Analyse ist zum Beispiel in Torrence und Compo (1998); Poularikas (2010); Nappo (2012); Held (2014); Roesch und Schmidbauer (2014) zu finden.

Die Kreuz-Wavelet-Transformation

Während das Wavelet-Leistungsspektrum als lokale Varianz einer Zeitreihe interpretiert werden kann, zeigt die Kreuz-Wavelet-Leistung die lokale Kovarianz zwischen zwei Zeitreihen. Mit Hilfe der Kreuz-Wavelet-Transformation kann somit die Beziehung zwischen zwei Zeitreihen gefunden und quantifiziert werden (Aguiar-Conraria und Soares, 2014; Roesch und Schmidbauer, 2014; Stull, 1988).

Das Wavelet-Kospektrum CW^{AB} von zwei kontinuierlichen, eindimensionalen Zeitreihen A und B mit den Wavelet-Transformationen W^A und W^B ist definiert als

$$CW_n^{AB}(s) = \text{Re} \left\{ W_n^A(s) W_n^{B*}(s) \right\} \quad (2.15)$$

dabei bezeichnet der * das komplex konjugierte, n ist ein lokaler Zeitindex und s ist die Wavelet-Skala (Torrence und Compo, 1998; Liu et al., 2007). Die Wavelet-Skala gibt an, mit welchen Frequenzschritten die Analyse durchgeführt werden soll, im Leistungsspektrum repräsentiert sie somit die Frequenzachse (y-Achse). Je kleiner die Frequenzschritte gewählt werden, desto größer wird die Rechenzeit für die Transformation.

Das Kospektrum der Kreuz-Wavelet-Transformation wird für die Analyse der spektralen Eigenschaften von turbulenten Flüssen genutzt, d.h. um zu untersuchen zu welchen Zeitpunkten und bei welchen Wellenlängen, bzw. Frequenzen dominante Flüsse auftreten (Hudgins et al., 1993; Mauder et al., 2007; van den Kroonenberg und Bange, 2007; Woods

und Smith, 2010; Held, 2014; Zhang et al., 2015; Smith et al., 2016; Podglajen et al., 2017; Portele et al., 2018). Der Imaginärteil der Kreuz-Wavelet-Transformation wird als Wavelet-Quadspektrum bezeichnet, wird hier allerdings nicht weiter verwendet.

Die Wavelet-Kohärenz

Ein weiteres nützliches Werkzeug der Transformation ist die Wavelet-Kohärenz R^2 . Sie beschreibt die Kreuzkorrelation zwischen zwei Zeitreihen A und B und ist als das Quadrat des Kreuz-Wavelet-Spektrums normalisiert durch die einzelnen Leistungsspektren:

$$R_n^2(s) = \frac{|S(s^{-1}W_n^{AB}(s))|^2}{S(s^{-1}|W_n^A(s)|^2) \cdot S(s^{-1}|W_n^B(s)|^2)} \quad (2.16)$$

Dabei ist S ein Glättungsoperator in Raum und Zeit wie in Torrence und Compo (1998); Jevrejeva et al. (2003); Grinsted et al. (2004) beschrieben. Die Wavelet-Kohärenz ist ein Maß für die Intensität der Kovarianz von zwei Zeitreihen (Jevrejeva et al., 2003). Mit ihr können Bereiche identifiziert werden, in denen die Leistung niedrig ist, aber dennoch eine signifikante Kohärenz vorhanden ist (Grinsted et al., 2004). Zur Veranschaulichung befindet sich im Anhang (A.2) ein Beispiel.

Neben den in dieser Arbeit durchgeführten wissenschaftlichen Analysen von Messdaten, kann die Wavelet-Transformation auch bei der technischen Analyse von Rohdaten eingesetzt werden. Im Anhang (A.3) sind dazu 2 Beispiele aufgeführt.

Der in der Arbeit verwendete Programmcode basiert auf den Prozeduren von Torrence und Compo (1998), Liu et al. (2007) und Jevrejeva et al. (2003); Grinsted et al. (2004).

2.2.2. Die spektrale Leistungsdichte

Die spektrale Leistungsdichte, oder auch Leistungsdichtespektrum genannt, ist ein allgemeines Konzept aus der Signalverarbeitung. Sie beschreibt, wie sich die Leistung einer Zeitreihe im Frequenzraum verteilt, d.h. sie gibt die auf eine Frequenz bezogene Leistung, also die Leistungsdichte (bzw. Energiedichte) eines Zeitreihensignals in einem infinitesimalen Frequenzintervall an. Die Dimension der spektralen Leistungsdichte ist Leistung mal Zeit (bzw. Leistung pro Länge) und hat damit beispielsweise die Einheit Temperatur zum Quadrat pro Hertz. Definiert ist die einseitige spektrale Leistungsdichte P_h als die Fourier Transformation der Autokorrelation (Korrelation mit sich selbst) einer diskreten reellen Zeitreihe $h(t)$ als:

$$P_h(f) = |H(f)|^2 + |H(-f)|^2 = 2|H(f)|^2 \quad (2.17)$$

wobei $H(f)$ die Fourier Transformation von $h(t)$ ist (Press et al., 1987; Heinzl et al., 2002). Damit stellt sie das Amplitudenquadrat, d.h. die Summe der Quadrate von Realteil und Imaginärteil, der Fourier Transformation der Zeitreihe dar und wird mit der Länge dieser Zeitreihe normiert (Press et al., 1987; Kaimal und Finnigan, 1995). Das Integral über alle Frequenzen liefert die Gesamtleistung.

In dieser Arbeit erfolgt die Berechnung der spektralen Leistungsdichte nach Press et al. (1987). Bei den zur Verfügung stehenden Datensätzen mit einer zeitlichen Auflösung von

2. Methoden

1, 10 Hz und 100 Hz liegt die Nyquist Frequenz, d.h. die kleinste auflösbare Skala, bei 0,5 Hz, 5 Hz und 50 Hz, was im Flug einer Wellenlänge um 200 m, 20 m und 2 m entspricht.

Auf die Zeitreihen eines Messsignals, z.B. entlang des Flugweges, lassen sich Aussagen über die spektrale Energiedichte in einem bestimmten Flugabschnitt machen, zum Beispiel wie viel Energie in einem Wellenlängen-, bzw. Frequenzbereich vorhanden ist (Heinzel et al., 2002; Vallis, 2017).

Die Leistungsübertragung, beim Zerfall von große auf kleine Wirbel (Eddies), erfolgt in Form eines Kaskadenprozesses mit einer charakteristischen Steigung, also einer charakteristischen Beziehung zwischen spektraler Leistungsdichte und Frequenz. Je nach Skala, in der die Energieübertragung in der Atmosphäre stattfindet, unterscheiden sich diese Steigungen. Im Allgemeinen wird ein Wert, d.h. eine Steigung von $-5/3$ dem Trägheitsbereich zugeordnet. Dieser ist charakteristisch für 3-dimensionale isotrope Turbulenz, d.h. dass dynamische Prozesse auf der Mesoskala oder darunter, die den Fluss beeinflusst haben. Ein Wert von -3 repräsentiert den Auftriebsbereich. Dieser deutet auf den Einfluss von größeren Skalen und damit von geostrophische Turbulenz hin (Gage, 1979; Tung und Orlando, 2003; Skamarock et al., 2014).

Mit Hilfe der Steigung, die sich aus dem Leistungsspektrum ergibt, kann der Typ der Turbulenz für den betrachteten Abschnitt bestimmt werden (Vallis, 2017). Für die Entstehung beider ($-5/3$ und -3) exponentieller Zusammenhänge gibt es verschiedene theoretische und modellbasierte 2- und 3-dimensionale Erklärungsansätze (Tung und Orlando, 2003). In der realen Atmosphäre wird das Leistungsspektrum jedoch von Wellen mit verschiedenen Wellenlängen beeinflusst. Das resultierende Spektrum kann daher sehr komplex sein und eine Funktion der relativen Stärke der verschiedenen Wellen darstellen (Stull, 1988; Bacmeister, 1996).

Die Analyse der spektralen Leistungsdichte von flugzeuggetragenen Messungen (Windkomponenten und potentielle Temperatur) wird zwar schon in den Arbeiten von Kennedy und Shapiro (1975); Nastrom und Gage (1985) beschrieben, dennoch ist die zugrundeliegende Dynamik hinter dem atmosphärischen Energiespektrum noch nicht gut verstanden (Skamarock et al., 2014).

2.3. Numerische Modelldaten

2.3.1. ECMWF-Daten

In dieser Arbeit werden hauptsächlich Daten vom ECMWF (**E**uropean **C**entre for **M**edium-range **W**eather **F**orecast) IFS (**I**ntegrated **F**orecasting **S**ystem) verwendet, da diese eine hohe räumliche Auflösung bieten, was beispielsweise für die Analyse von Schwerewellen hilfreich ist. Das IFS ist ein globales, hydrostatisches, numerisches Wettervorhersagemodell. Es berechnet dynamische und thermodynamische Größen auf Modelllevel, sogenannten hybriden Sigma-Druckflächen. In der hier verwendeten Version sind es 137 Modelllevel, die vom Boden bis in eine Höhe von 1 Pa reichen. Am Boden sind die Level geländefolgend und ab einer Höhe von ungefähr 210 hPa entsprechen sie den Druckflächen. In der UTLS haben die Flächen einen Abstand von zirka 300 bis 400 m. Die zeitliche Auflösung der genutzten ECMWF IFS-Felder beträgt 6 Stunden. In den Abschnitten 3 und 4 werden ECMWF IFS-Analysedaten mit einem Gitterabstand von $0,125^\circ$ benutzt. In Abschnitt 5

kommen ECMWF IFS-Vorhersagedaten mit einem Gitterabstand von $0,073^\circ$ zum Einsatz. Außerdem werden noch ERA5 (ECMWF ReAnalysis v5)-Daten genutzt. Bei ERA5 handelt es sich um einen globalen Reanalysedatensatz (basierend auf IFS-Daten) von 1950 bis heute. Dieser hat eine zeitliche Auflösung von 1 h, in der Vertikalen 137 Modelllevel von der Oberfläche bis in 80 km Höhe (0,01 hPa) und eine Gittergröße von 31 km, bzw. $0,25^\circ$ (Hersbach et al., 2020). Die ERA5-Daten werden in Abschnitt 4 aufgrund ihrer höheren zeitlichen Auflösung eingesetzt, um die Entwicklung einer Tropopausenfalte zu untersuchen.

2.3.2. CLaMS-Daten

Das CLaMS (Chemical Lagrangian Model of the Stratosphere) ist ein molekulares, chemisches Transportmodell (McKenna et al., 2002b,a; Konopka et al., 2004), das vom Institut für Chemie und Klimaforschung Bereich Stratosphäre des Forschungszentrums Jülich betrieben wird. Mit CLaMS kann die Dynamik und die Chemie von Luftpaketen simuliert werden. Es eignet sich daher zur Analyse von Spurengastransport.

Die in Abschnitt 5 genutzten CLaMS-Daten haben eine zeitliche Auflösung von 10 Sekunden und wurden auf den Flugweg interpoliert. Die darin enthaltenen sogenannten passiven Tracer repräsentieren verschiedene Luftmassen, z.B. aus dem polaren Wirbel, oder den Tropen. Diese werden zu einem gewissen Zeitpunkt und an den jeweiligen Orten in der Atmosphäre initialisiert. Da sie nur transportiert (Advektion) und gemischt (Mischung) werden können, eignen sie sich, um die Herkunft und die Zusammensetzung von Luftmassen zu untersuchen (Kalicinsky et al., 2013; Günther et al., 2008).

2.3.3. Interpolation von Modelldaten entlang des Flugwegs

Zur Einordnung der gemessenen Daten in den meteorologischen Kontext hat es sich als hilfreich erwiesen, meteorologische Modelldaten zu verwenden, die möglichst exakt entlang des Flugpfades liegen. Da die räumliche und zeitliche Auflösung der Modelle begrenzt ist, besteht eine Möglichkeit darin, die entsprechenden Modellgrößen von den Modellgitterpunkten auf den Flugweg zu interpolieren. Zur Interpolation von Modelldaten können vom ECMWF verschiedene Modellfelder verwendet werden. Felder bei denen die Daten auf Modellflächen vorliegen, werden im Folgenden als EC-ml bezeichnet. Das ECMWF-Modell stellt weiterhin Daten auf Druckflächen (EC-pl) und Isentropen (EC-pt) zur Verfügung, die allerdings eine geringere vertikale Auflösung haben. Diese Daten sind von den Modellflächen auf die entsprechende Höhenkoordinate interpoliert worden.

Messflugzeuge fliegen in der Regel auf Druckflächen, d.h. auf Isobaren. Die Gitterpunkte im Modell basieren zumindest auf hybriden Sigma-Druckflächen. Besonders Spurengase verteilen sich ohne diabatische oder turbulente Prozesse entlang von Isentropen (Linien gleicher potentieller Temperatur; siehe Abschnitt 1.1.1), was vor allem für die Stratosphäre zutrifft. In der Troposphäre ist dies nur zum Teil der Fall. Bei der Interpolation auf den Flugweg können sich dadurch unterschiedlich große Differenzen zwischen den Werten auf dem Flugweg und den Werten des nächsten Gitterpunkts (in vertikaler Richtung) bei Druck und potentieller Temperatur ergeben. In diesem Abschnitt wird daher zum einen gezeigt, welchen Einfluss die Koordinaten Luftdruck und potentielle Temperatur bei der Interpolation auf die Variabilität der Modelldaten haben. Zum anderen wird untersucht,

2. Methoden

welche Feldtypen für die Interpolation geeignet sind.

Tabelle 2.1 zeigt die in dieser Untersuchung verwendeten Feldtypen und ihre Eigen-

	EC-ml	EC-pt		EC-pl
horizontaler Gitterpunktabstand	0,125°	0,125°	0,250°	0,125°
unterstes Level	Modellboden	300 K	275 K	850 hPa
Anzahl der Vertikallevel	137	7	9	13
zeitliche Auflösung	6 Stunden	6 Stunden	6 Stunden	6 Stunden

Tabelle 2.1.: Übersicht der Verwendeten ECMWF-Felder.

schaften. Die EC-pt-Daten wurden dabei mit zwei verschiedenen räumlichen Auflösungen genutzt. Die Daten mit einem Gitterpunktabstand von 0,25° wurden hauptsächlich für die Berechnung der äquivalenten Breite auf der hemisphärischen Skala verwendet. Für diesen Zweck haben die Felder mehr Level in der Vertikalen, dafür aber eine geringere horizontale Auflösung. Hier dienen sie vor allem dazu, den Einfluss der horizontalen Auflösung zu ermitteln. Die Daten mit einem Gitterpunktabstand von 0,125° wurden vor allem für detailliertere Analysen verwendet.

Die Untersuchung wird am Beispiel der potentiellen Vortizität (PV; siehe Abschnitt 1.1.1) gezeigt. Zum einen ist diese in allen Datensätzen vorhanden, bzw. lässt sich mit den enthaltenen Größen aus allen Feldern berechnen. Zum anderen ist die PV eine zentrale Größe zur Untersuchung der Tropopause und bei Mischung, bzw. Mischungsprozessen. Sie kann nicht gemessen werden, da zur Berechnung (siehe Gleichung (1.1)) Gradienten in allen 3 Raumrichtungen nötig sind. Um den Flugweg aus den 4-dimensionalen ECMWF-Feldern (t,z,y,x) zu berechnen, erfolgt die Interpolation in allen Dimensionen mit einer linearen Interpolationsmethode. Da in dieser Arbeit hauptsächlich vertikale Austauschprozesse untersucht werden, werden die Felder zunächst in der horizontalen Ebene (x,y) linear zum nächsten Gitterpunkt interpoliert. Das bedeutet, es wird ein Vertikalschnitt entlang des Flugwegs bestimmt (siehe zum Beispiel Abbildung 3.5a). Im Anschluss erfolgt die ebenfalls lineare Interpolation in der z-Ebene, d.h. mit der Höhenkoordinate Druck, oder potentielle Temperatur. Bei einer zeitlichen Auflösung von 6 Stunden und einer Flugzeit zwischen 3 und 4 Stunden werden für die zeitliche Interpolation 2, oder 3 Zeitpunkte benötigt. Die lineare, zeitliche Interpolation wird hierbei zum Schluss durchgeführt, da der Aufwand zur Interpolation eines 1-dimonsionalen Feldes deutlich geringer ist als für ein 3-dimensionales Feld.

Abbildung 2.2 zeigt den Vergleich, wobei hier nur die stratosphärischen Abschnitte des Fluges abgebildet sind. Es ist zu erkennen, dass der ungefähre Verlauf bei allen Berechnungen sehr ähnlich ist. Generell liefert die Interpolation mit dem Luftdruck bei allen Varianten einen glatteren Verlauf (rot, blau, türkis). Auffällig sind allerdings die PV-Berechnungen aus den EC-pl-Daten (türkis, lila). Diese liegen fast überall deutlich über den anderen Kurven. Bei der Interpolation mit dem Druck sind das für das gezeigte Intervall im Mittel ungefähr 1,1 pvu und bei der Interpolation mit der potentiellen Temperatur 1,7 pvu. Im Gegensatz zur Interpolation mit dem Druck erzeugt die Interpolation mit der potentiellen Temperatur deutlich kleinskaligere Fluktuationen (schwarz, grün, lila). Dabei sind die Schwankungen kleiner als die Modellauflösung (0,125°) und demnach ein Resultat der Interpolation.

Zur besseren Übersichtlichkeit wurden in Abbildung 2.2 die Linien der PV-Berechnungen

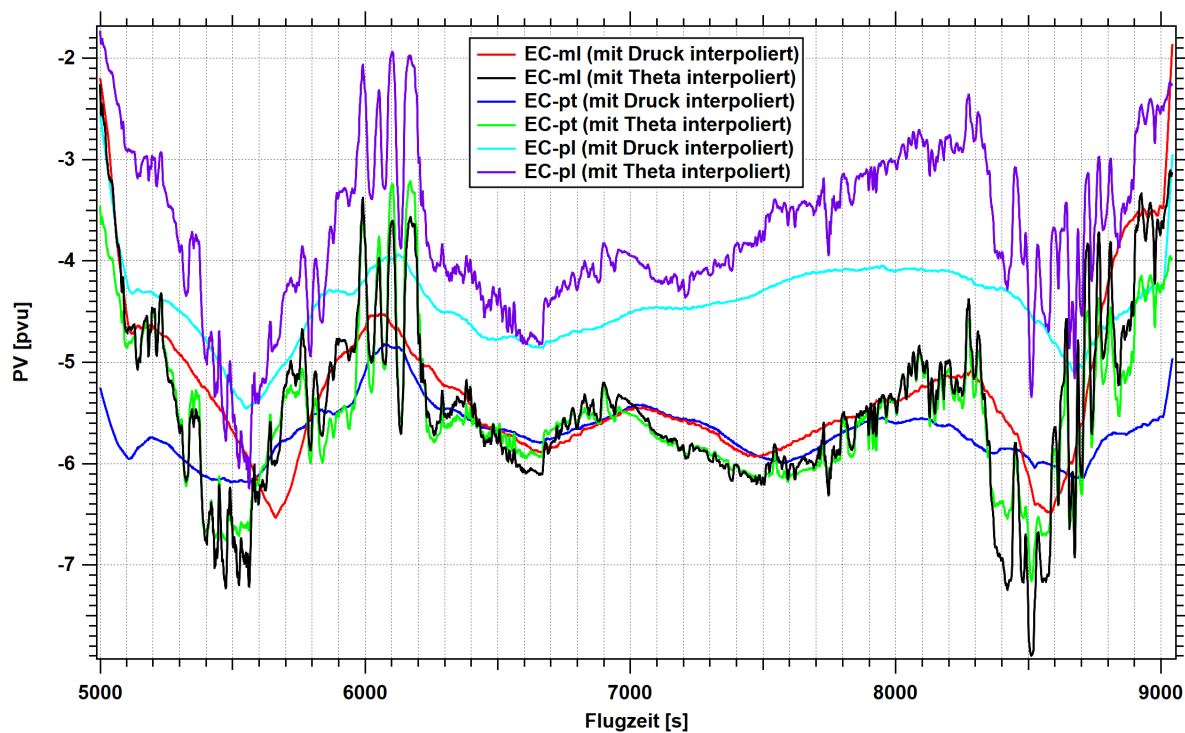


Abbildung 2.2.: Zeitreihen der potentiellen Wirbelstärke (PV) aus verschiedenen ECMWF-Datensätzen und mit verschiedenen Interpolationen.

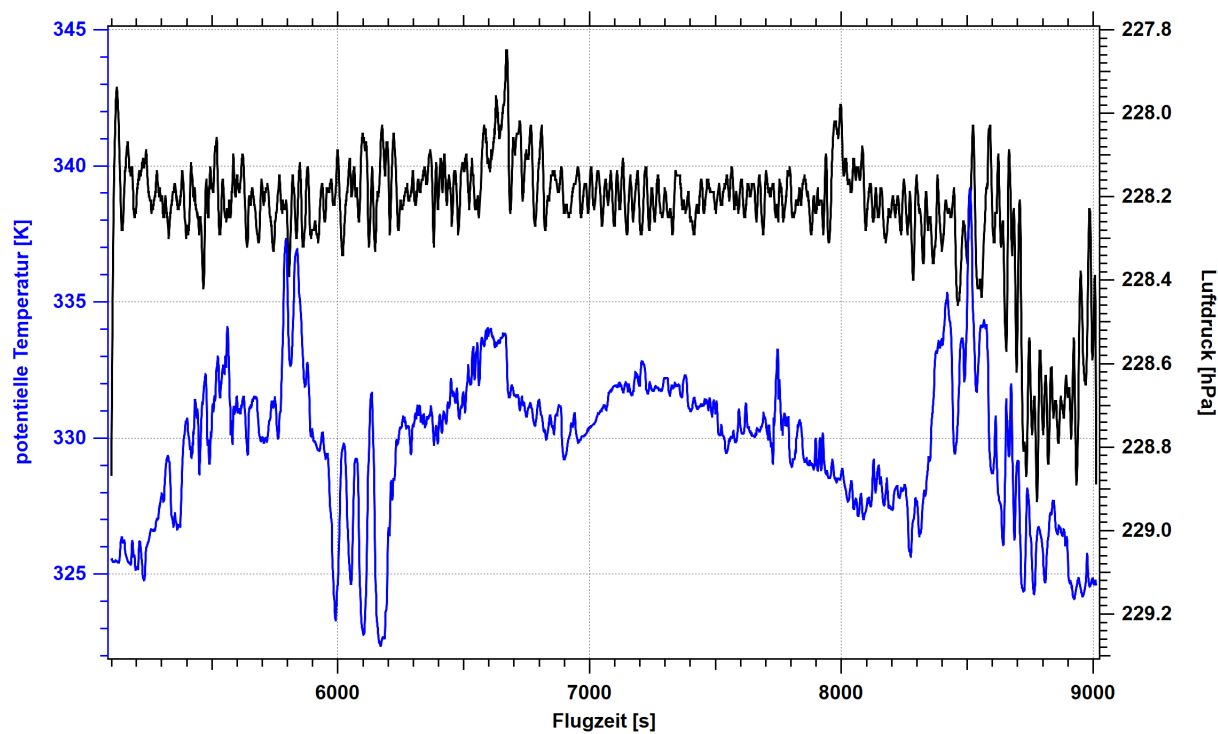


Abbildung 2.3.: Zeitreihen von potentieller Temperatur (blau) und Luftdruck (schwarz).

2. Methoden

aus den EC-pt-Daten mit einer Auflösung von $0,25^\circ$ weggelassen, da die Unterschiede zu den höher aufgelösten ($0,125^\circ$) Daten größtenteils gering sind. Bei der Interpolation mit der potentiellen Temperatur sind die Unterschiede kleiner als $0,22$ pvu und bei der Druckinterpolation kleiner als $0,28$ pvu.

Abbildung 2.3 zeigt die Zeitreihen vom gemessenen Luftdruck und potentieller Temperatur im stratosphärischen Flugabschnitt. Während sich der Luftdruck im Bereich der Wellenstruktur zwischen 5700 und 6300 Sekunden nur um $0,36$ hPa ändert, variiert die potentielle Temperatur um $14,95$ K. Dieser Unterschied zeigt sich dann auch bei der Interpolation der PV (Abbildung 2.2).

Obwohl die vertikale Auflösung der EC-pt-Daten deutlich geringer ist als die der EC-ml-Daten, liefert die Interpolation mit der potentiellen Temperatur bei beiden Feldern ein zum großen Teil sehr ähnliches Ergebnis (schwarze und grüne Linie in Abbildung 2.2). Maximal unterscheiden sich die Varianten um weniger als $1,25$ pvu. Im Gegensatz dazu ist der Unterschied mit der Druckinterpolation zwischen EC-ml und EC-pt stellenweise um einiges größer, nämlich um bis zu $3,08$ pvu. Bei anderen Größen, wie zum Beispiel der statischen Stabilität, wird ein ähnliches Ergebnis erzielt.

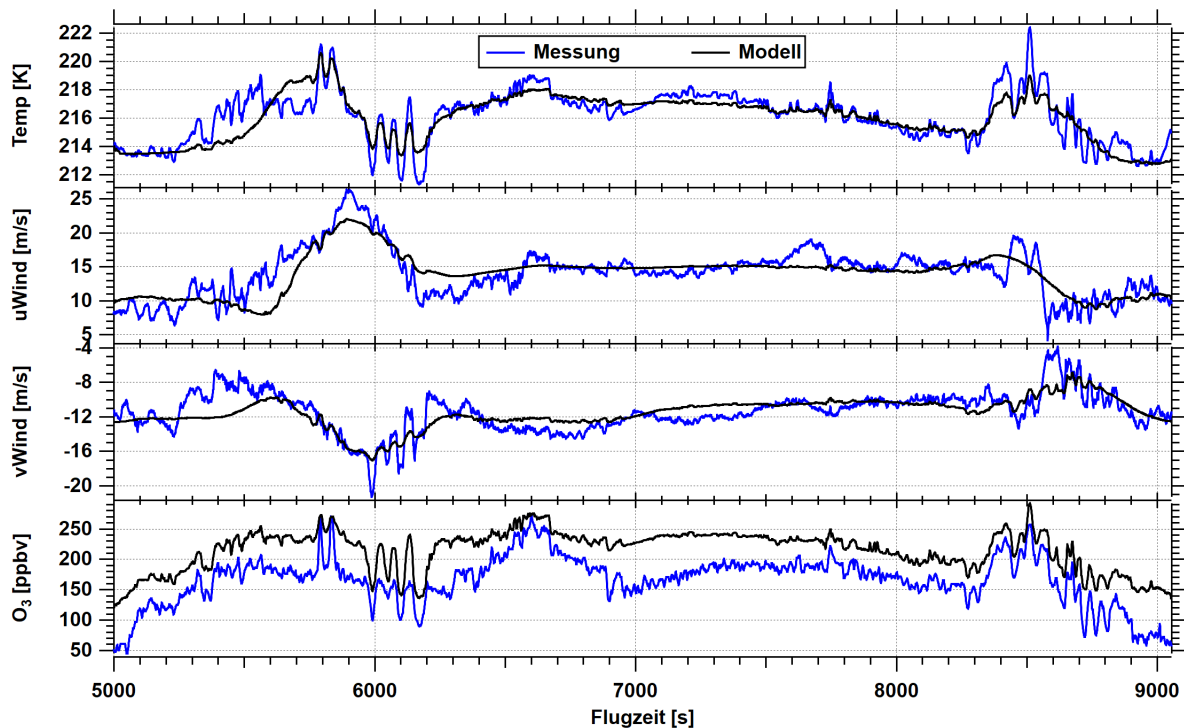


Abbildung 2.4.: Gemessene (blau) und aus den EC-ml-Dateien mit der potentiellen Temperatur interpolierte (schwarz) Zeitreihen von Temperatur, zonaler Windgeschwindigkeit, meridionaler Windgeschwindigkeit und O_3 -Mischungsverhältnis.

Der Vergleich der beiden Interpolationsmethoden mit Größen, die auch vom Flugzeug gemessen wurden, ergibt sich ein unterschiedliches Bild. Abbildung 2.4 zeigt ein Vergleich für verschiedene Größen zwischen Messung und Modell für die Interpolation mit der potentiellen Temperatur. So wird zum Beispiel die Temperatur in der Stratosphäre deutlich besser durch die Interpolation mit der potentiellen Temperatur wiedergegeben. Bei der horizontalen und vertikalen Windgeschwindigkeit wirkt sich die Interpolationsmethode dagegen nur geringfügig aus. Im Falle des O_3 -Mischungsverhältnisses wird die kleinskalige

Variabilität durch die Interpolation mit der potentiellen Temperatur wiederum um einiges besser wiedergegeben, allerdings stimmen die Absolutwerte nicht gut überein. Dies liegt allerdings am Modell selbst und nicht an der Interpolationsmethode. So wird das Ozon im Modell hauptsächlich aus Satellitenmessungen ermittelt und in das Modell assimiliert. In der UTLS haben Satellitenmessungen eine hohe Messgenauigkeit.

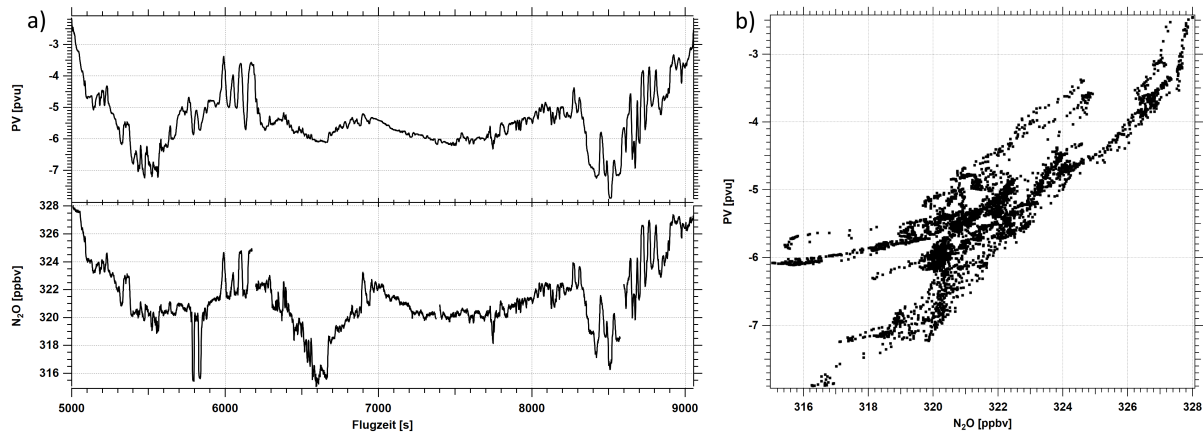


Abbildung 2.5.: a) Zeitreihen der potentiellen Wirbelstärke (oben) und des N₂O-Mischungsverhältnisses (unten). Bei den Datenlücken in der N₂O Zeitreihe wurde das Messgerät kalibriert. b) Korrelation von potentieller Wirbelstärke und N₂O-Mischungsverhältnis in der Stratosphäre.

In der Stratosphäre wird die potentielle Wirbelstärke mit steigender Höhe kleiner (auf der Südhalbkugel) und das N₂O-Mischungsverhältnis nimmt ab. Auf einer Isentropen und ohne Turbulenz oder diabatische Prozesse sind sowohl die PV, als auch das N₂O-Mischungsverhältnis konstant. Fluktuationen, die im N₂O auftreten, sollten demnach auch bei der PV zu beobachten sein. Zum Vergleich zeigt Abbildung 2.5a die Zeitreihen der berechneten potentiellen Wirbelstärke (Interpolation mit der potentiellen Temperatur aus den EC-ml-Daten) und des gemessenen N₂O-Mischungsverhältnisses. Es ist zu erkennen, dass nicht nur der allgemeine Verlauf beider Kurven sehr ähnlich ist, sondern auch kleinskalige Fluktuationen und Wellenbewegungen häufig zeitgleich in beiden Zeitreihen zu beobachten sind. Die Korrelation von PV und N₂O, die in Abbildung 2.5b dargestellt ist, bezieht sich auf dieselben Daten wie in den Zeitreihen. Aufgrund der in den Abschnitten 1.1.1 und 1.4.1 beschriebenen Eigenschaften von PV und N₂O wird ein linearer, positiv korrelierter Zusammenhang zwischen beiden Größen erwartet. Die Abbildung zeigt, dass diese Erwartung zwar für einen Großteil der Datenpunkte erfüllt ist, es jedoch offensichtlich auch Abschnitte gibt, bei denen das Verhältnis von N₂O und PV gestört ist, wobei kein kompakter Zusammenhang erwartet wird. Da sich diese Abschnitte in Geraden mit unterschiedlichen Steigungen anordnen, kann eine atmosphärisch bedingte Ursache vermutet werden (d.h. möglicherweise turbulente, oder diabatische Prozesse) und ist somit kein Ergebnis der Interpolation. In Kapitel 3 wird der hier gezeigte Flug genauer untersucht.

Die Analyse hat gezeigt, dass mit der potentiellen Temperatur interpoliert werden sollte, um eine möglichst hohe Auflösung der Variabilität der Modelldaten auf dem Flugweg zu erreichen, zumindest wenn Größen verwendet werden, die einen Zusammenhang mit Isentropen haben (z.B. PV, Spurengase). Der Vergleich mit dem N₂O-Mischungsverhältnis

2. Methoden

legt außerdem nahe, dass die so erzeugten Fluktuationen kein Artefakt der Interpolation darstellen, sondern aufgrund der atmosphärischen Bedingungen entstehen. Dies ermöglicht die Verwendung der Modelldaten und damit wichtiger und nicht messbarer Größen wie potentielle Wirbelstärke, oder statischer Stabilität auch auf einer Zeitbasis von 1 s. Außerdem hat sich gezeigt, dass die Auflösung in der horizontalen und vertikalen Richtung wichtig für passende Absolutwerte sind, bei der Variabilität aber die kleinere Rolle spielt. Aufgrund dieser Ergebnisse werden die Modelldaten, die in dieser Arbeit auf den Flugweg interpoliert werden, soweit es möglich ist, aus den EC-ml-Daten genommen und mit Hilfe der potentiellen Temperatur interpoliert.

3. Nicht-isentrope Mischung während DEEPWAVE

Basierend auf der Analyse von Spurengasverteilungen wird in diesem Kapitel versucht, ein nicht-isentrope Mischungereignis während der DEEPWAVE 2014 Kampagne zu identifizieren. Dazu werden hoch aufgelöste Daten, d.h. Daten mit einer zeitlichen Auflösung von 1 und 10 Hz, Spurengasmessungen von CO und N₂O, sowie Bordsensordaten (u.a. potentielle Temperatur, vertikale Windgeschwindigkeit) zusammen mit ECMWF IFS-Analysen (z.B. potentielle Wirbelstärke) verwendet. Diese Datensätze werden unter Verwendung von einer skalenabhängigen Steigungsanalyse, Wavelet-Transformationen, spektraler Leistungsdichten und GTG (**G**raphical **T**urbulence **G**uidance)-Analysen untersucht.

Mit Hilfe dieser Analysen sollen in diesem Kapitel folgende Fragen beantwortet werden:

- Kann gebirgswelleninduzierte Turbulenz die Zusammensetzung der UTLS nachhaltig beeinflussen?
- Können basierend auf Spurengasverteilungen nicht-isentrope Mischungsprozesse durch Schwerewellen identifiziert werden?
- Auf welchen zeitlichen und räumlichen Skalen tritt Mischung auf?
- Treten oberhalb der Gebirge Spurengasflüsse auf und wie groß sind diese?
- Gibt es Hinweise auf kleinskalige Turbulenz, die für die Mischung verantwortlich ist?

3.1. Die DEEPWAVE 2014 Kampagne und Messflug 9

Die DEEPWAVE-Kampagne fand von Mai bis Juli 2014 in Neuseeland statt. Ziel der Kampagne war die Untersuchung von Schwerewellen von der unteren Troposphäre bis in die Mesosphäre und untere Thermosphäre, sowie deren Entstehung und ihren Einfluss auf dynamische und chemische Prozesse. Dazu wurden umfangreiche Messungen mit Radiosonden und Lidar (**L**ight **d**etection **a**nd **r**anging), sowie mit den beiden Messflugzeugen NSF (**N**ational **S**cience **F**oundation) / NCAR (**N**ational **C**enter for **A**tmospheric **R**esearch) Gulfstream GV HIAPER (**H**ighperformance **I**nstrumented **A**irborne **P**latform for **E**nvironmental **R**esearch) und DLR (**D**eutsche Zentrum für **L**uft- und **R**aumfahrt) Dassault Falcon 20E durchgeführt. Kampagnenstandort für die DLR Falcon war Christchurch auf der Südinsel von Neuseeland.

In diesem Kapitel wird der 9. Messflug der DEEPWAVE-Kampagne, welcher am 12.07.2014 stattfand, untersucht und analysiert. Dieser wurde zusammen mit Flug 10 als Doppelflug mit einem zeitlichen Abstand von zirka 2 Stunden geplant. Hauptziele dieser Flüge waren die Untersuchung der chemischen und dynamischen Struktur der Atmosphäre in der Nähe

3. Nicht-isentrope Mischung während DEEPWAVE

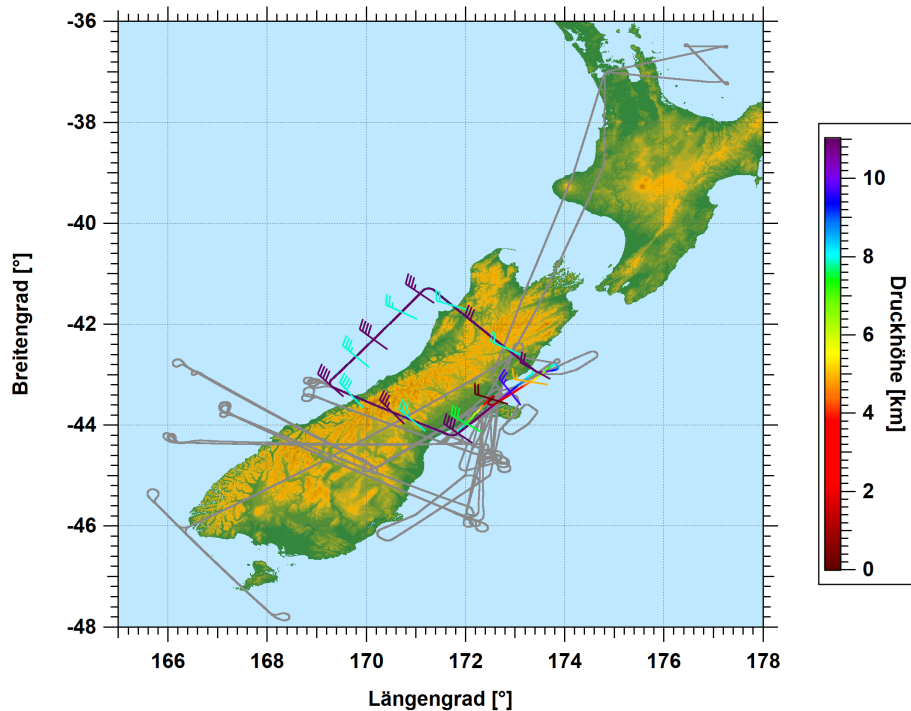


Abbildung 3.1.: Messflüge der DEEPWAVE 2014 Kampagne in grau und Flug 9 ist mit der Druckhöhe eingefärbt. Für die Darstellung der Windpfeile wurden die gemessene Windrichtung und Windgeschwindigkeit über 600 Sekunden gemittelt. Diese sind ebenfalls mit der Druckhöhe eingefärbt, um den Wind auf verschiedenen Flughöhen zu verdeutlichen.

der Tropopause während erhöhter Gebirgswellenaktivität über der Südinsel von Neuseeland.

Abbildung 3.1 zeigt die während der DEEPWAVE-Kampagne geflogenen Strecken (grau). Der 9. Messflug ist durch die Farbskala, die die Druckhöhe angibt, und die Windpfeile, die ebenfalls mit der Druckhöhe eingefärbt sind, hervorgehoben. Um verschiedene Anregungen von Schwerewellen über dem nördlichen und mittleren Teil der Südinsel von Neuseeland zu untersuchen, wurde ein viereckiges Muster auf zwei verschiedenen Flughöhen (7900 m und 10900 m) geflogen. Wie auf der Abbildung zu erkennen ist, lagen der nordöstliche und der südwestliche Flugabschnitt quer zum Gebirge und parallel zur Windrichtung und sind damit für die Untersuchung von möglichen orographisch erzeugten Schwerewellen geeignet. Während Windrichtung und -geschwindigkeit auf dem südwestlichen Flugabschnitt auf beiden Flughöhen sehr ähnlich sind, zeigen sich beim nordöstlichen Abschnitt deutlichere Unterschiede. Außerdem ist zu erkennen, dass die Windgeschwindigkeiten bei den südwestlichen Abschnitten größer sind als bei den nordöstlichen Abschnitten.

3.2. Die synoptischen Bedingungen

Um Informationen über den synoptischen Hintergrund zu erhalten und die nachfolgenden Untersuchungen zu unterstützen, werden ECMWF IFS-Analysedaten verwendet. Diese wurden in Abschnitt 2.3.3 beschrieben.

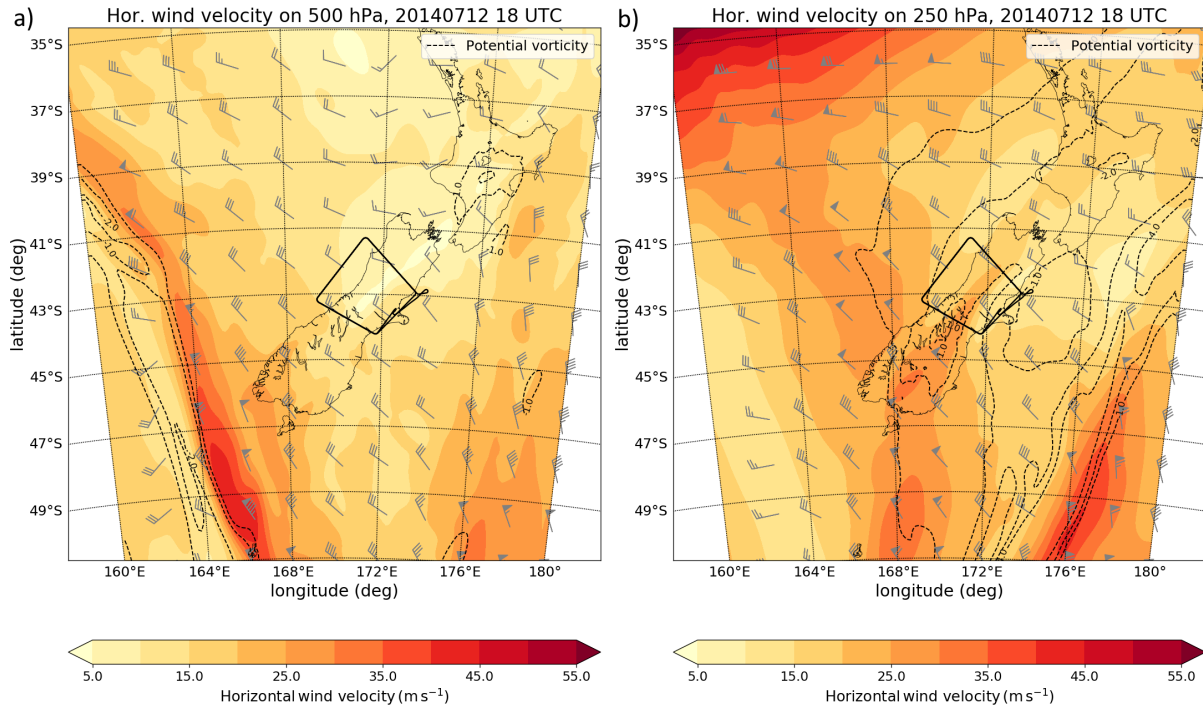


Abbildung 3.2.: Horizontalschnitt der horizontalen Windgeschwindigkeit a) auf 500 hPa und b) auf 250 hPa (rechts) um 18 UTC. Die Konturen der potentiellen Wirbelstärke (-1 , -2 , -4 pvu) werden durch die gestrichelten blauen Linien dargestellt. Die schwarze Kurve zeigt den Flugweg und die Windpfeile sind in grau dargestellt.

Die synoptische Situation während des 9. Messfluges stellte sich wie folgt dar: Südlich von Neuseeland befand sich ein Tiefdruckgebiet (mit einem Bodendruck von ~ 992 hPa), das für das Wettergeschehen im Messgebiet maßgeblich verantwortlich war. Die horizontale Windgeschwindigkeit auf 500 hPa ist in Abbildung 3.2a gezeigt. Im Südwesten lässt sich die heranziehende Kaltfront des Tiefdruckgebiets anhand des Windmaximums, des Windsprungs und der niedrigeren PV-Werte (Tropopausenfalte) identifizieren. Im Messgebiet kommt der Wind aus nordwestlichen Richtungen und liegt damit annähernd senkrecht zu den Neuseeländischen Alpen.

Auch in der Höhe kommt der Wind aus nordwestlichen Richtungen. Abbildung 3.2b zeigt den Horizontalwind auf 250 hPa. Die Windgeschwindigkeiten im Messgebiet auf dieser Höhe liegen im Modell zwischen 15 und 30 m s^{-1} und damit ungefähr 10 m s^{-1} höher als auf 500 hPa. Der Vergleich von Windrichtung und -geschwindigkeit mit den gemessenen Daten in Abbildung 3.1 zeigt eine gute Übereinstimmung. Außerdem ist zu beobachten, dass die Windgeschwindigkeit über den Neuseeländischen Alpen im Vergleich zu den Regionen im Lee und im Luv um zirka 5 m s^{-1} zunimmt. Über dem südlichen Teil der Südinsel ist außerdem ein lokaler Strahlstrom, der im Zusammenhang mit der Kaltfront steht, zu erkennen. Die erhöhte Windgeschwindigkeit im Südosten der Karte, die zusammen mit einem scharfen PV-Gradienten auftritt, steht im Zusammenhang mit einer Okklusion, welche die Inseln zirka 12 Stunden vor dem Messflug überquert hat. Im Nordosten ist außerdem der Rand des Subtropen-Strahlstroms zu sehen.

Abbildung 3.3a zeigt ein Satellitenbild von 20:32 UTC im sichtbaren Bereich. Dieses wurde ungefähr 20 Minuten nach der Landung in Christchurch aufgenommen. Deutlich zu

3. Nicht-isentrope Mischung während DEEPWAVE

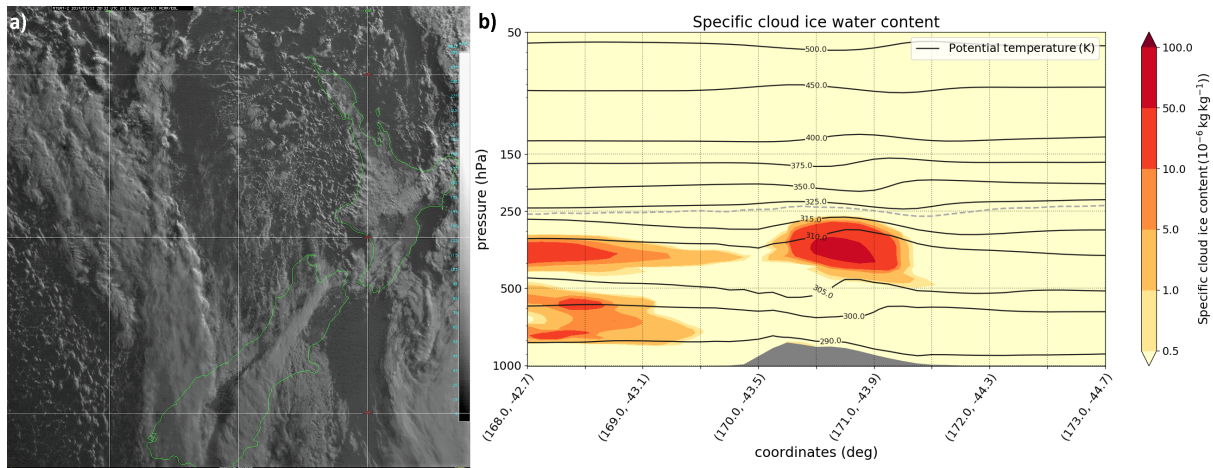


Abbildung 3.3.: a) Satellitenbild des MTSAT-2 Satelliten im sichtbaren Wellenlängenbereich von 20:32 UTC (National Environmental Satellite, Data, and Information Service (NESDIS), 2015). Die Grauskala zeigt die Oberflächenhelligkeit. b) Vertikalschnitt des Wolkeneiswassergehalts über den südwestlichen Flugabschnitt um 18 UTC. Die graue gestrichelte Linie zeigt die dynamische Tropopause und die schwarzen Linien Konturen der potentiellen Temperatur.

erkennen ist Bewölkung der heranziehenden Kaltfront im Südwesten, ebenso wie ein wolkenfreier Bereich hinter der Okklusion im Osten. Auf dem Satellitenbild ist zudem ein Wolkenband zu erkennen, das über der gesamten Südinsel liegt. Aufgrund der nordwestlichen Anströmung, der Position im Lee der neuseeländischen Alpen und der Form des Wolkenbands zeigt das Bild eine Leewellenbewölkung. Diese hat Wolkenoberflächentemperaturen zwischen 215 und 225 K (aus der Infrarotmessung des Satelliten) und ist ebenfalls im Modell anhand eines erhöhten Eiswassergehalts in Abbildung 3.3b zu erkennen. Durch die aufgehende, tiefstehende Sonne (8:32 Uhr lokale Zeit) hebt sich die Leewellenbewölkung durch den Schatten gut hervor. Die Beobachtung einer Leewellenwolke ist ein offensichtlicher Hinweis, dass die Bedingungen zur Entstehung und Ausbreitung von orographischen Schwerewellen im Messgebiet geeignet waren. Dies bestätigen auch die Analysen von Fritts et al. (2016); Gisinger et al. (2017).

Zur Analyse der Wellenausbreitung von Schwerewellen zeigt Abbildung 3.4 einen Vertikalschnitt und einen Horizontalschnitt der horizontalen Divergenz. Anhand des sich abwechselnden Musters von positiven und negativen Werten ist zu erkennen, dass sich die Schwerewellen, die durch die neuseeländischen Alpen induziert wurden, weit in der Atmosphäre (bis in die Mesosphäre) ausgebreitet haben, ohne sich dabei stark abzuschwächen. Die Phasenlinien auf 246 hPa sind hauptsächlich parallel zum Gebirge der Südinsel orientiert. Da sich die Orientierung der Phasenlinien über die gesamte Troposphäre bis auf diese Höhe (246 hPa) nicht ändert, ist dies ein Hinweis auf stationäre Gebirgswellen (Ehard et al., 2017).

In Abbildung 3.5a ist der Vertikalschnitt der potentiellen Wirbelstärke (PV) entlang des Flugwegs dargestellt. Wie in Abschnitt 2.3.3 beschrieben wurde, wurden die Modelldaten für diese Darstellung räumlich und zeitlich interpoliert. Die untere Flugfläche liegt innerhalb der Troposphäre, wobei zirka 115 hPa unterhalb der dynamischen Tropopause (-2 pvu) geflogen wurde. Die obere Flugfläche lag knapp oberhalb der dynamischen

3.2. Die synoptischen Bedingungen

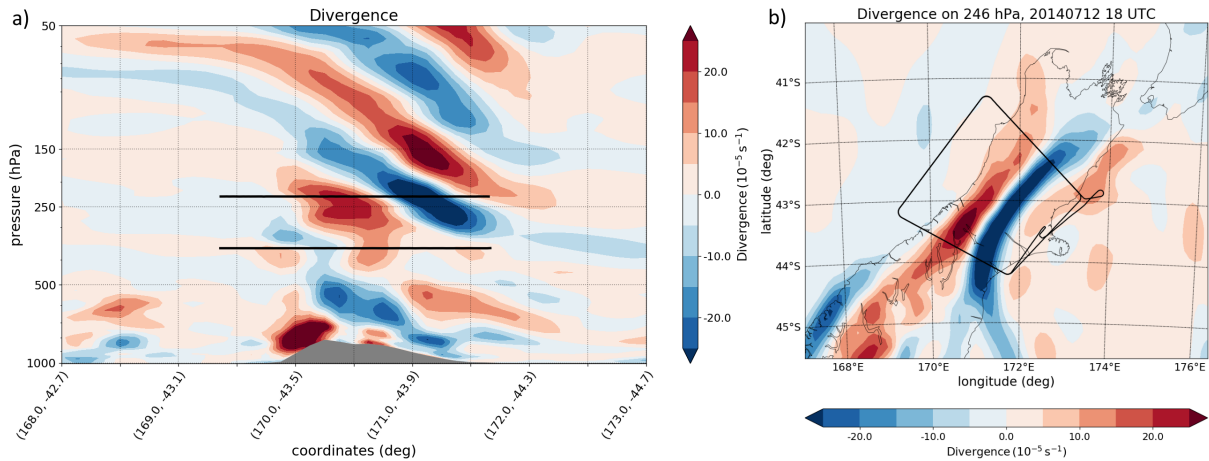


Abbildung 3.4.: a) Vertikalschnitt entlang des südwestlichen Flugabschnitts der horizontalen Divergenz der Geschwindigkeit. b) Horizontalschnitt auf 246 hPa um 18 UTC. Die dicke schwarze Linie zeigt den Flugweg von Messflug 9.

Tropopause, d.h. ungefähr 18 hPa darüber. Oberhalb des Gebirges, das durch die grauen Flächen repräsentiert wird, zeigen sowohl die potentielle Temperatur (gestrichelte Konturen), als auch die potentielle Wirbelstärke eine erhöhte Variabilität. Diese Anomalie breitet sich von der Troposphäre bis in Höhen deutlich über 100 hPa aus.

Ähnliches zeigt sich auch auf dem Horizontalschnitt der potentiellen Wirbelstärke auf

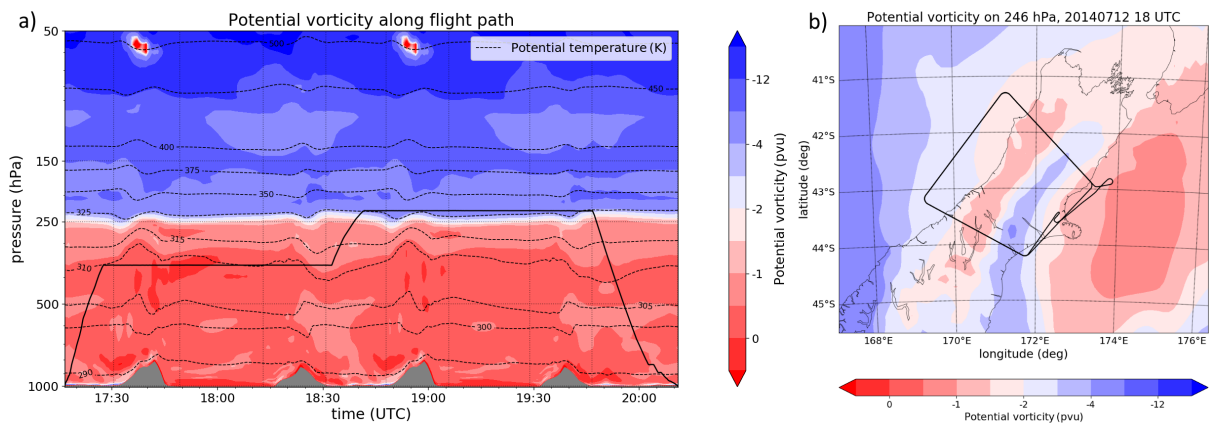


Abbildung 3.5.: a) Schnitt der potentiellen Wirbelstärke entlang des Flugwegs. b) Horizontalschnitt der potentiellen Wirbelstärke auf 246 hPa um 18 UTC. Die dicke schwarze Linie zeigt den Flugweg von Messflug 9 und die schwarzen gestrichelten Linien Konturen der potentiellen Temperatur. Die vertikalen Rasterlinien markieren Anfang und Ende der horizontalen Flugabschnitte quer zum Gebirge.

246 hPa um 18 UTC in Abbildung 3.5b. Dabei entsprechen 246 hPa ungefähr der mittleren Höhe der dynamischen Tropopause während des Flugs. Auf dieser Druckfläche sind über den Gebirgszügen der Südinsel Bereiche mit höherer PV (rote Farben) zu erkennen, die auf einen möglichen Einfluss der Gebirgskette auf die dynamische Struktur hindeuten. Beide Bilder zeigen, dass die Struktur der dynamischen Tropopause im Messgebiet über Neuseeland weitestgehend horizontal war. Das heißt es gab keine Tropausenfalten, Tro-

3. Nicht-isentrope Mischung während DEEPWAVE

popausenbrüche, Strahlströme, oder sonstige Störungen. Somit ist die über den Bergen beobachtete Variabilität die einzige, die in dieser Region signifikant ist.

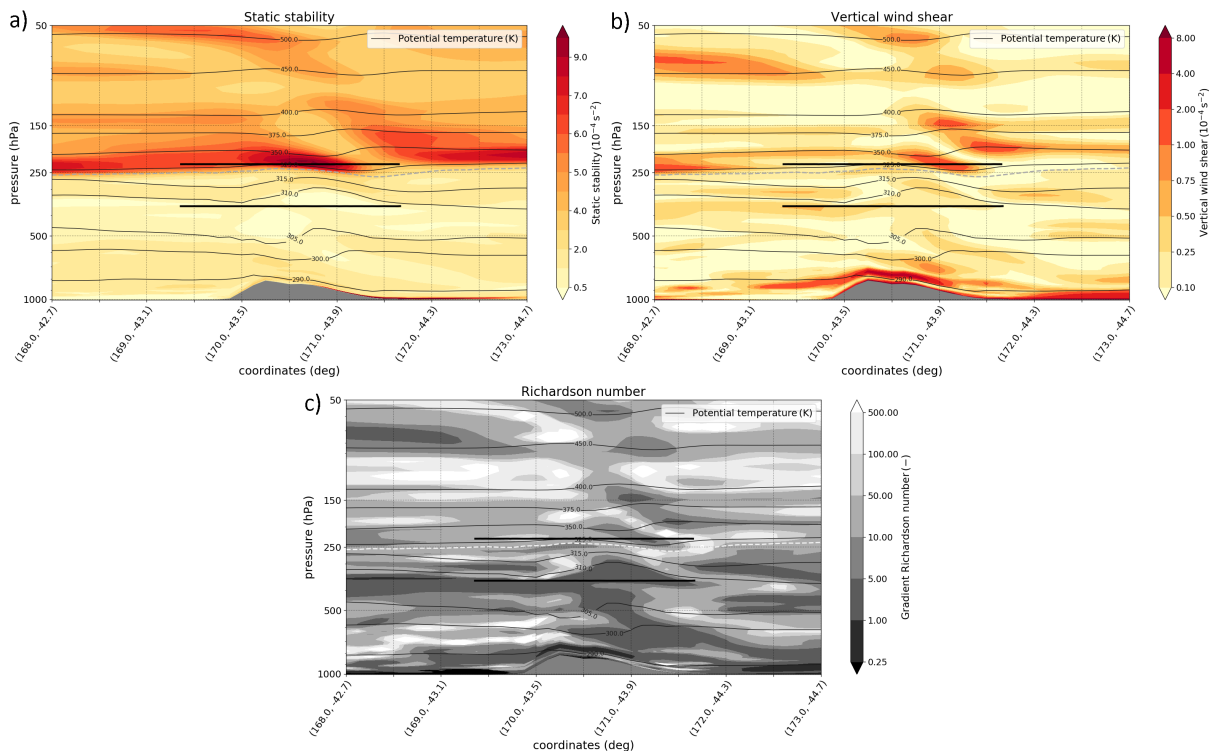


Abbildung 3.6.: Vertikalschnitte über den südwestlichen Flugabschnitt von statischer Stabilität (a), vertikaler Windscherung (b) und Richardson-Zahl (c) um 18 UTC. Die graue gestrichelte Linie zeigt die dynamische Tropopause, die dünne schwarzen Linien Konturen der potentiellen Temperatur und die dicke schwarze Linie den Flugweg auf den südwestlichen Abschnitten.

Wie in Abschnitt 3.1 erwähnt wurde, wurde für die Messung der Schwerewellen ein rechteckiges Flugmuster auf zwei verschiedenen Flughöhen geflogen. In der weiteren Analyse werden die Flugabschnitte auf dem höheren Flugniveau und die parallel zum Wind und senkrecht zum Gebirge (Südalpen) liegen, also der südwestliche und der nordöstliche Abschnitt, genauer untersucht.

Daher zeigt Abbildung 3.6 einen Schnitt entlang des südwestlichen Flugabschnitts von statischer Stabilität, vertikaler Windscherung des Horizontalwinds und Richardson-Zahl um 18 UTC (siehe Abschnitt 1.3). Es ist zu erkennen, dass auf dem höheren Flugabschnitt (über der Tropopause) zum großen Teil in Bereichen mit erhöhter statischer Stabilität geflogen wurde. Im Lee des Gebirges, d.h. im Bereich der Koordinaten $(171,0^\circ, -43,9^\circ)$ liegt jedoch gleichzeitig auch ein Bereich mit erhöhter Scherung. Dementsprechend ist hier die Richardson-Zahl niedrigerer. Somit zeigen die Vertikalschnitte, dass im Bereich der Gebirgsüberströmung Bedingungen erzeugt wurden, die die Entstehung von Turbulenz begünstigt haben könnten. So wurde in den Studien von Kunkel et al. (2014, 2019); Kaluza et al. (2018) gezeigt, dass es in Regionen mit erhöhter Windscherung zu turbulenter Mischung kommen kann, wobei der Auslöser der Scherung in diesen Analysen keine orographischen Schwerewellen, sondern barokline Wellen waren. Die Analysen von Wilms et al. (2020) haben gezeigt, dass Scherung und die Anregung von Gebirgswellen zusammen

zu Turbulenz führen kann.

3.3. In-situ Messungen und Gebirgswellen während Messflug 9

3.3.1. In-situ Instrumentierung

Die Ozonmessungen wurden vom DLR mit einem ultraviolett photometrischen Ozonanalysator TE49 (Thermo Environmental Instruments Model 49) durchgeführt. Dieser hat eine Präzision von 3%, bzw. 1 ppbv und eine Genauigkeit von 5%. Die Antwortzeit, d.h. die Sensorauflösung des Messgeräts, beträgt 15 s (Schumann et al., 2011).

Die genutzten Größen potentielle Temperatur, Windgeschwindigkeit und -richtung, sowie Druckhöhe wurden von den Bordsensoren der DLR Falcon gemessen. Die Messunsicherheit der Temperatur beträgt 0,5 K, des Drucks 50 Pa, des Zonalwinds $0,7 \text{ m s}^{-1}$, des Meridionalwinds $0,9 \text{ m s}^{-1}$ und des Vertikalwinds $0,3 \text{ m s}^{-1}$ (Krautstrunk und Giez, 2012; Mallaun et al., 2015; Bögel und Baumann, 1991; Heller et al., 2017; Heller, 2018).

UMAQS (University of Mainz Airborne QCL-based Spectrometer)

Die in dieser Arbeit durchgeführten Analyse der Spurengase N_2O und CO wurden alle mit UMAQS (University of Mainz Airborne QCL-based Spectrometer) gemessen. Aufgrund dieser zentralen Rolle, wird das Messgerät im Folgenden kurz vorgestellt.

Das Quantenkaskadenlaser Infrarotabsorptionsspektrometer UMAQS ermöglicht die simultane Messung von Kohlenstoffmonoxid und Distickstoffmonoxid (Müller, 2015). Hauptbestandteil von UMAQS ist das QCL (Quanten Cascade Laser)-Infrarotabsorptionsspektrometer mit einer Harriott Messzelle mit einer optischen Weglänge von 76 Metern. Die Messzelle wird bei einem Zelldruck von 40 Torr kontinuierlich mit Außenluft gespült und ermöglicht je nach Fluss eine Zeitauflösung zwischen 0,3 und 1 s. Der Nachweis von CO und N_2O erfolgt bei einer Wellenzahl von $2203,16 \text{ cm}^{-1}$ und $2202,75 \text{ cm}^{-1}$. Zur Korrektur des Instrumentendrifts, wird das Gerät im Flugbetrieb in regelmäßigen Abständen mit einem Sekundärstandard aus Druckluft kalibriert. Dieser wurde vor und nach der Kampagne mit einem NOAA (National Oceanic and Atmospheric Administration) Primärstandard kreuzvermessen. Während DEEPWAVE 2014 hatten die CO -, bzw. N_2O -Messungen eine Präzision von 0,7 ppbv, bzw. 0,2 ppbv und eine Genauigkeit von 1,3 ppbv, bzw. 0,4 ppbv (Müller et al., 2015). Aufgrund des gleichen Instrumentensetups wird für GW-LCYCLE II (in Abschnitt 4) mit der gleichen Präzision gerechnet.

Für die Messkampagne SouthTRAC (siehe Abschnitt 5) wurde eine zweite Messzelle mit einem zweiten Laser eingebaut. Außerdem wurde der Laser der ersten Messzelle erneuert. Dadurch kann UMAQS neben N_2O (Gesamtunsicherheit 0,6 ppbv; Jesswein et al. (2021)) und CO (1,3 ppbv) noch zusätzlich CH_4 (1,7 ppbv), CO_2 (0,2 ppbv) und Carbonylsulfid (OCS ; 0,9 ppbv) messen.

3.3.2. Zeitreihen von Flug 9

Zur Übersicht zeigt Abbildung 3.7 die Zeitreihen einiger wichtiger Messgrößen von Flug 9, die von den Bordsensoren der DLR Falcon und UMAQS gemessen wurden. Der grau

3. Nicht-isentrope Mischung während DEEPWAVE

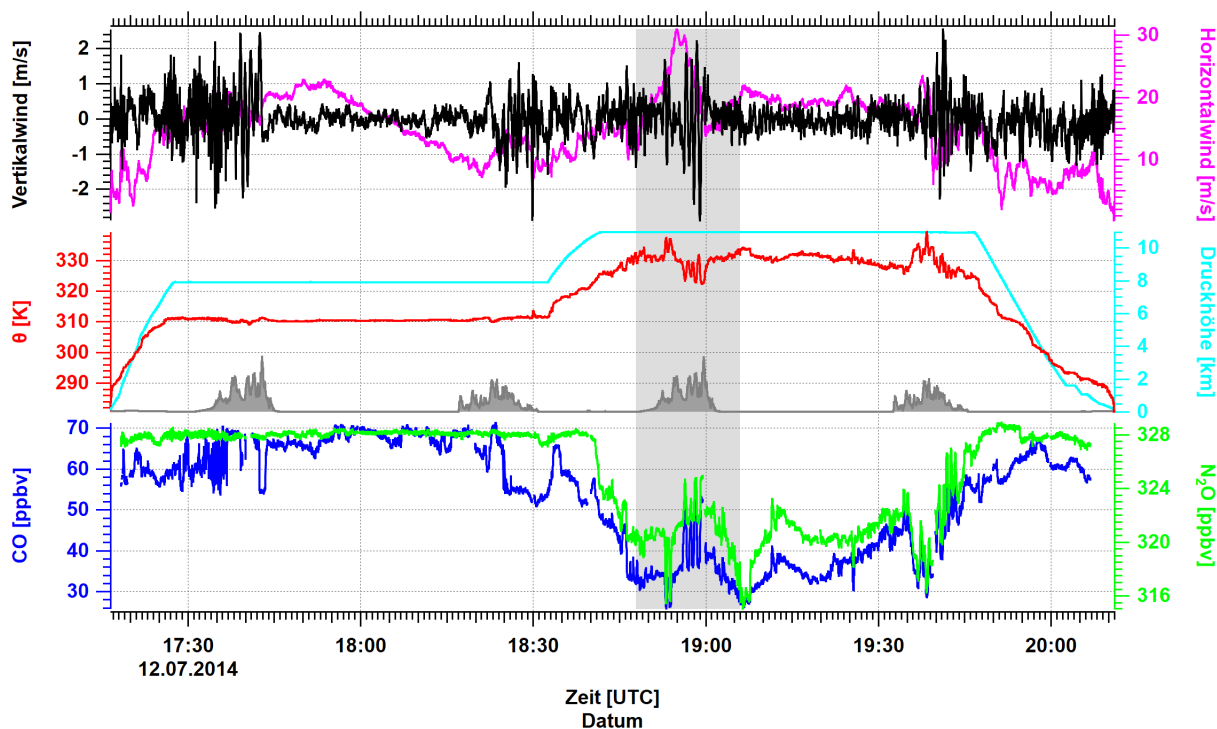


Abbildung 3.7.: Zeitreihen des 9. Messflugs. Oben: vertikale (magenta) und horizontale (schwarz) Windgeschwindigkeit. Mitte: potentielle Temperatur (rot), Topographie (grau; aus SRTM15+-Daten interpoliert (Tozer et al., 2019); in km) und Druckhöhe (türkis). Unten: CO- (blau) und N₂O-Mischungsverhältnisse (grün). Der grau schattierte Bereich markiert den südwestlichen Flugabschnitt.

schattierte Bereich markiert den südwestlichen Flugabschnitt. Dieser liegt parallel zur Strömung und quer zum Gebirge (Abbildung 3.1), nahe an der Tropopause und ist für die weiteren Analysen von besonderem Interesse.

Im oberen Teil der Abbildung 3.7 sind die vertikale (schwarz) und die horizontale (magenta) Windgeschwindigkeit dargestellt. Anhand der geringen Vertikalwindgeschwindigkeiten und der geringen Variabilität zwischen 17:46 und 18:17 UTC sowie zwischen 19:03 und 19:33 UTC lässt sich gut ablesen, dass diese Flugabschnitte im Luv des Gebirges und damit bei ungestörten Bedingungen geflogen wurden. Im Lee und über den Bergen ist die Variabilität deutlich größer. Dabei fluktuiert die vertikale Windgeschwindigkeit über den Bergen mit Werten um 5 m s^{-1} am stärksten. Die gemessenen Horizontalwindgeschwindigkeiten von 6 bis 31 m s^{-1} stimmen gut mit den Modellgeschwindigkeiten (15 bis 30 m s^{-1}) in Abbildung 3.2 überein. Auch die im Modell beobachteten höheren Windgeschwindigkeiten auf dem südwestlichen Flugabschnitt werden durch die in-situ Windmessungen bestätigt.

Im mittleren Teil der Abbildung sind auf der oberen Flugfläche jeweils über dem Gebirge Wellenstrukturen bei der potentiellen Temperatur (rot) zu erkennen. Diese schwanken um bis zu 9 K und treten, vor allem auf dem höheren Flugniveau, zeitgleich mit den hohen vertikalen Windgeschwindigkeiten auf. Auf dem südwestlichen Abschnitt (18:48 - 19:06 UTC) sind die Wellen ebenfalls stärker ausgeprägt als auf dem nordöstlichen Abschnitt (19:29 - 19:47 UTC). Dies stimmt mit den Beobachtungen aus dem Modell in Abbildung 3.5 überein, bei denen die Amplitude der wellenartigen Störung auf dem südwestlichen

Flugabschnitt größer war als auf dem nordöstlichen Abschnitt. Dies könnte an unterschiedlichen Anströmbedingungen (Windrichtung und Windgeschwindigkeit) liegen, oder daran, dass die Berge auf dem nördlichen Abschnitt zirka 900 m kleiner sind. Die Beobachtungsdaten stimmen somit gut mit der meteorologischen Analyse aus Abschnitt 3.2 überein. Der Vergleich der Messdaten mit der horizontalen Divergenz in Abbildung 3.4 zeigt außerdem, dass im Modell zwar eine Schwerewelle vorhanden ist, die Feinstruktur jedoch nicht aufgelöst werden kann.

Der untere Teil der Abbildung zeigt die von UMAQS gemessenen Spurengase CO (blau) und N₂O (grün). Auch hier sind die Wellen über den Bergen gut zu erkennen, wobei das N₂O-Mischungsverhältnis um zirka 4 ppbv und das CO-Mischungsverhältnis um ungefähr 20 ppbv schwankt. Anhand der deutlichen Abnahme im N₂O-Mischungsverhältnis (gegen 18:40 UTC) wird außerdem deutlich, welche Teile des Flugs in der Stratosphäre und welche in der Troposphäre, also bei annähernd konstantem N₂O-Mischungsverhältnis, geflogen wurden. Die chemische Tropopause (Abschnitt 1.1.1) von N₂O lässt sich aufgrund dieser Daten auf ungefähr 326,9 ppbv abschätzen.

3.4. Identifizierung von Mischung

Um zu untersuchen, ob es im Bereich der erhöhten Wellenaktivität zu Mischung gekommen ist, wird zunächst die N₂O-CO-Korrelation untersucht (siehe auch Abschnitt 2.1.2).

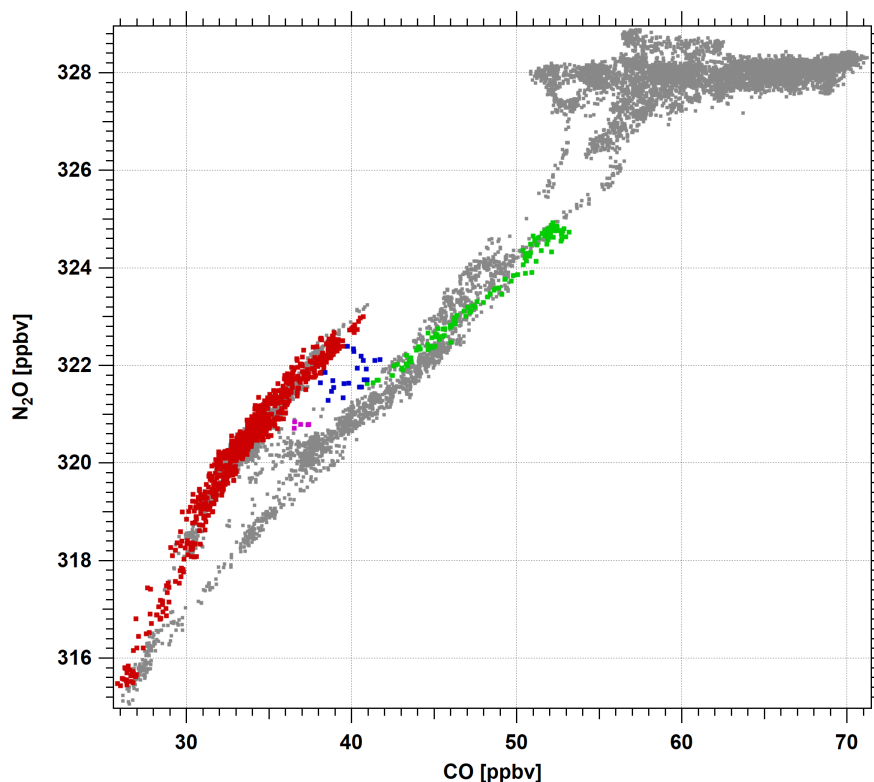


Abbildung 3.8.: N₂O-CO-Korrelation von Flug 9. Chemisch unterschiedliche stratosphärische Bereiche des südwestlichen Abschnitts sind rot und grün dargestellt. Blaue und magenta farbige Punkte markieren Datenpunkte, die zwischen den Bereichen liegen.

Abbildung 3.8 zeigt die gemessene N₂O-CO-Korrelation von Flug 9. Die Troposphäre

3. Nicht-isentrope Mischung während DEEPWAVE

lässt sich nach der in Müller (2015) beschriebenen Methode für diesen Flug für N_2O -Mischungsverhältnisse größer 326,9 ppbv identifizieren. In der Stratosphäre zeigen sich zwei separate Äste der Korrelation, die auf unterschiedliche Luftmassenregime hindeuten. Die beiden Äste repräsentieren somit verschiedene Luftmassen mit unterschiedlicher chemischer Zusammensetzung. Für den südwestlichen Flugabschnitt (grau schattierter Bereich in Abbildung 3.7) wurden die Datenpunkte farblich hervorgehoben. Der restliche Flug ist grau. Die Datenpunkte des südwestlichen Flugabschnitts auf dem Ast mit den höheren CO -Mischungsverhältnissen sind grün und die auf dem Ast mit den niedrigeren CO -Werten sind rot. Auffällig sind insbesondere die Messpunkte, die zwischen den beiden kompakten Ästen liegen. Sie verbinden die beiden unterschiedlichen Regime und könnten durch Mischung zwischen den beiden Luftmassen hervorgerufen worden sein. In der Abbildung wurden sie für den südwestlichen Flugabschnitt mit blau, bzw. magenta eingefärbt und werden zur Vereinfachung im Folgenden als „Mischungspunkte“ bezeichnet.

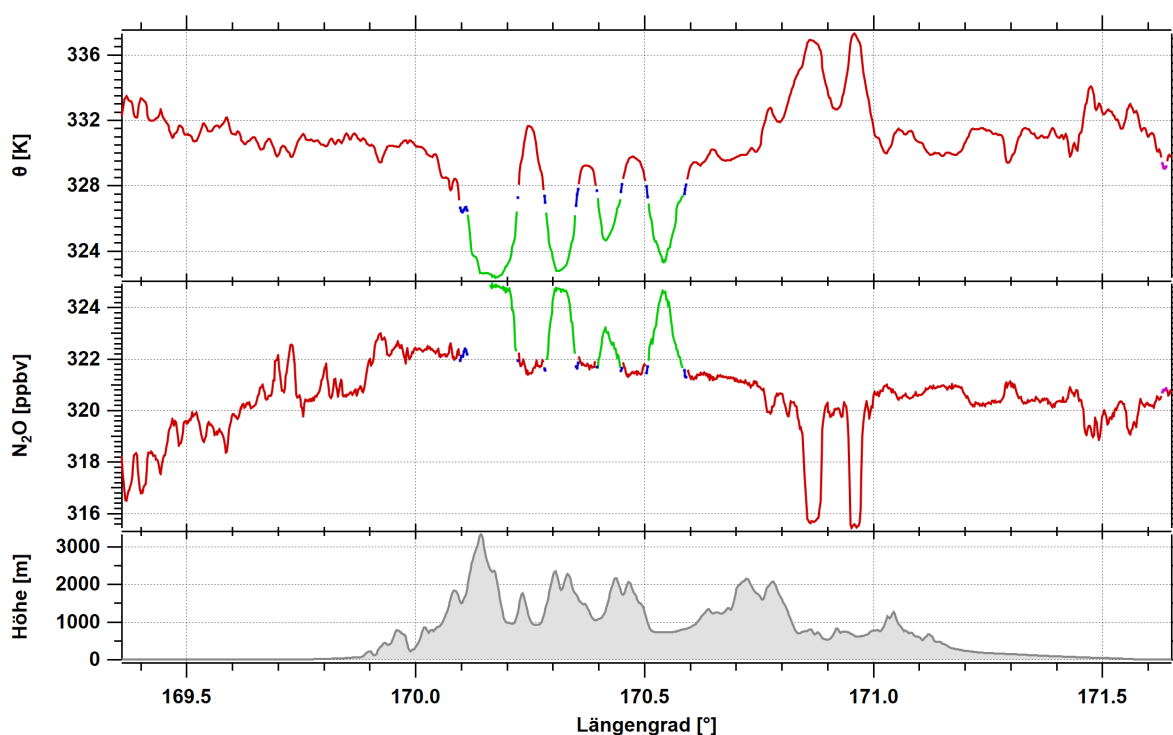


Abbildung 3.9.: Potentielle Temperatur (oben), N_2O -Mischungsverhältnis (Mitte) und Topographie (unten) des südwestlichen Flugabschnitts aufgetragen gegen den Längengrad mit der gleichen Farbkodierung wie in Abbildung 3.8.

Um die N_2O - CO -Korrelation in einen geophysikalischen und meteorologischen Kontext zu bringen und die Lage der unterschiedlichen Luftmassen aus der Korrelation in Abbildung 3.8 zu verdeutlichen, zeigt Abbildung 3.9 die Zeitreihen der potentiellen Temperatur und des N_2O -Mischungsverhältnisses aufgetragen gegen den Längengrad für den südwestlichen Abschnitt. Die Farbkodierung ist hierbei die gleiche wie in Abbildung 3.8. Es ist zu erkennen, dass die beiden Äste der Korrelation zwei verschiedene isentrope Schichten mit unterschiedlicher chemischer Zusammensetzung zugeordnet werden können. Die blauen Datenpunkte zwischen den Ästen in Abbildung 3.8, die ein Hinweis auf Mischung sind, liegen bei beiden Kurven genau zwischen diesen beiden Schichten. Die im Bereich zwischen 170° und $170,6^\circ$ auftretenden Wellen liegen außerdem in der Region, in der die

größten Fluktuationen bei der vertikalen Windgeschwindigkeit zu beobachten sind (siehe Abbildung 3.7).

Die sogenannten Mischungspunkte liegen also in einem Bereich ähnlicher potentieller Temperatur, bzw. auf einer isentropen Schicht (zwischen 326,3 und 328,1 K). Beim N_2O liegt das Mischungsverhältnis der Punkte zwischen 321,2 und 322,4 ppbv und jeweils am Ansatzpunkt der Flanken.

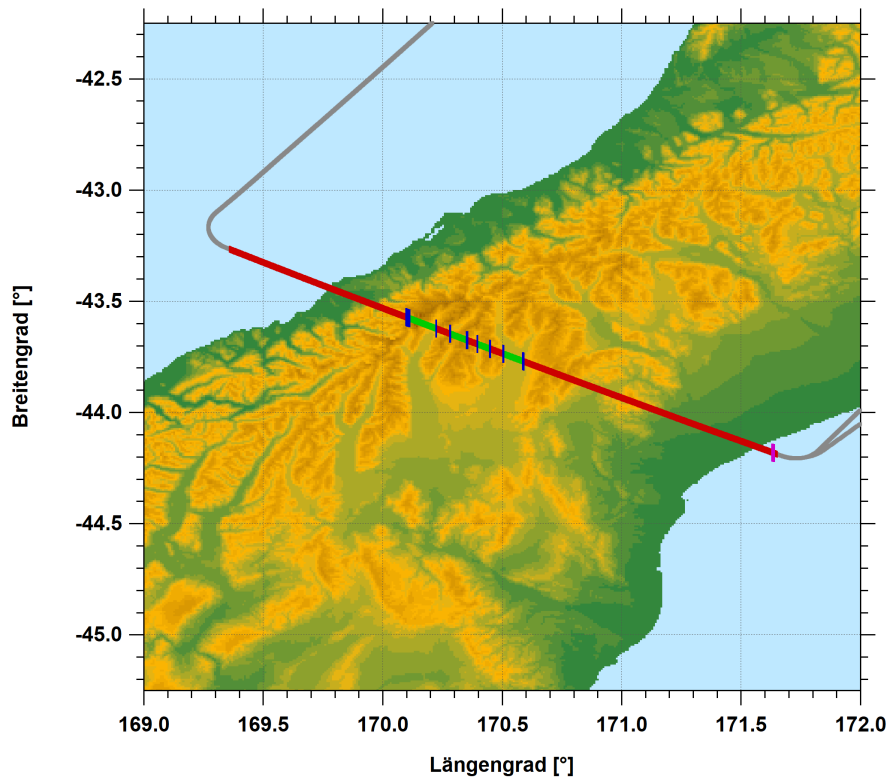


Abbildung 3.10.: Flugpfad des südwestlichen Abschnitts mit der gleichen Farbkodierung wie in Abbildung 3.8.

Abbildung 3.10 verdeutlicht noch einmal, dass der gezeigte Flugabschnitt oberhalb des Gebirges und auch innerhalb der in Abschnitt 3.1 gezeigten Gebirgswellen liegt.

Die Ergebnisse aus diesem Abschnitt legen die Schlussfolgerung nahe, dass die beobachteten Gebirgswellen über den neuseeländischen Alpen zu lokaler turbulenter Mischung und irreversiblen Spurengasaustausch an der Tropopause geführt haben. Im Folgenden Abschnitt wird diese Hypothese genauer untersucht.

3.5. Verteilung und Mischung der Spurengase

Im vorigen Abschnitt wurde gezeigt, dass es im Bereich der Schwerewellen zu irreversibler Mischung gekommen ist. Daher wird in diesem Abschnitt nun untersucht, ob lokal im Bereich der Mischung sowie im Lee eine Änderung des Spurengasgradienten auf kleinen und damit turbulenten Skalen zu beobachten ist.

Durch seine Veränderung an der Tropopause ist insbesondere der vertikale Gradient des

3. Nicht-isentrope Mischung während DEEPWAVE

konservativen Spurengases N_2O gut dazu geeignet, die in Abschnitt 3.4 aufgestellte Hypothese zu testen. Da N_2O in der UTLS nicht durch chemische Prozesse beeinflusst wird, wird das Mischungsverhältnis an der Tropopause nur durch die Dynamik kontrolliert.

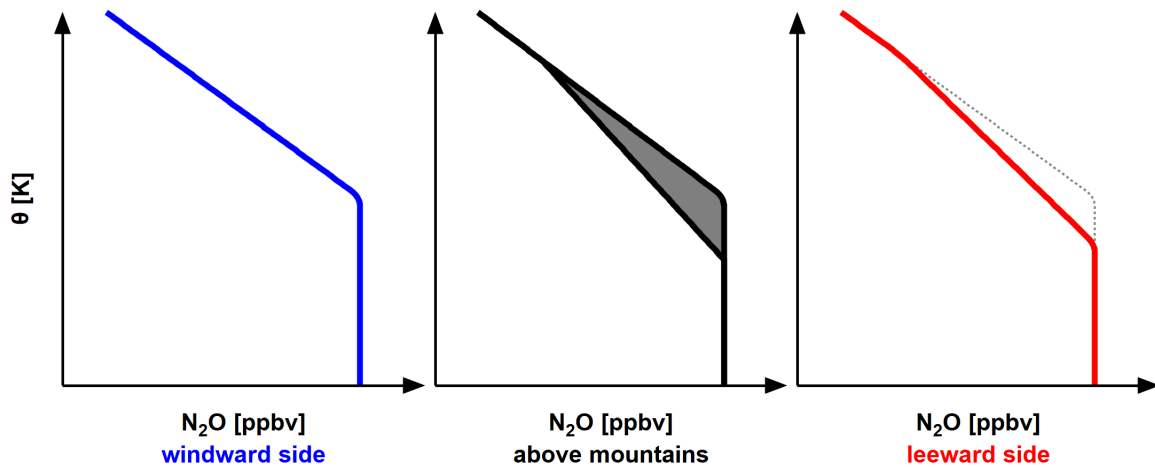


Abbildung 3.11.: Hypothetische Entwicklung des N_2O -Profils an der Tropopause unter dem Einfluss von Gebirgswellen, mit der potentiellen Temperatur θ als Höhenkoordinate. Im Luv des Gebirges (links), über dem Gebirge (Mitte) und im Lee des Gebirges (rechts).

Abbildung 3.11 zeigt schematisch, welchen Einfluss nicht-isentrope Mischen an der Tropopause auf die Veränderung des N_2O -Profils hat, wenn turbulentes Mischen, zum Beispiel durch orographische Schwerewellen, über dem Gebirge auftritt. Der linke Teil der Abbildung (blau) zeigt das N_2O -Profil im Einströmbereich. Über einem Gebirge (schwarz) können Gebirgswellen auftreten. Im Falle von reversibler adiabatischer Auslenkung im Bereich der Wellen ändert sich das Verhältnis von potentieller Temperatur und N_2O -Mischungsverhältnis nicht. Tritt jedoch Turbulenz auf, kann nicht-isentrope Mischung induziert werden. Wenn N_2O und potentielle Temperatur an der Tropopause unterschiedliche Vertikalgradienten haben, kann Mischung dazu führen, dass die Gradienten modifiziert werden. Im N_2O -Profil zeigt sich dies daran, dass sich über dem Gebirge der Gradient (bzw. die $\theta/\text{N}_2\text{O}$ -Steigung) gegenüber dem Anströmbereich ändert und eine höhere Variabilität erwartet werden kann. In der Abbildung ist dies durch die graue Fläche angedeutet. Die Steigungen der Größen relativ zueinander können somit in Luv und Lee unterschiedlich sein. Bei nicht-isentroper Mischung ergibt sich im Lee (rot) das neue, modifizierte N_2O -Profil (zur Verdeutlichung zeigt die graue gepunktete Linie das Profil im Luv). Da sich an der Tropopause stratosphärische und troposphärische Luftmassen mischen können, wird aufgrund der Hypothese bei Flug 9 windwärts ein flacheres N_2O -Profil, d.h. ein kleineres $\theta'/\text{N}_2\text{O}'$ -Verhältnis erwartet (der Gradient wird abgebaut) als auf der Leeseite des Gebirgsrückens.

Abbildung 3.12 zeigt das gemessene N_2O -Profil des gesamten Messfluges. Der südwestliche Flugabschnitt ist farblich hervorgehoben. Dabei wurde der Abschnitt in verschiedene Längengradbereiche unterteilt. Der Bereich im Luv (blau) für Längengrade $< 170^\circ$, der Bereich über dem Gebirge (schwarz) für Längengrade zwischen 170° und 171° und der Bereich im Lee (rot) für Längengrade $> 171^\circ$ (siehe Abbildung 3.9). Anhand dieser Einteilungen lassen sich Unterschiede (Steigung, Kompaktheit) zwischen den Teilbereichen erkennen. So ist die $\text{N}_2\text{O}/\theta$ -Steigung im Luv des Gebirges am kleinsten/flachsten ist. Im

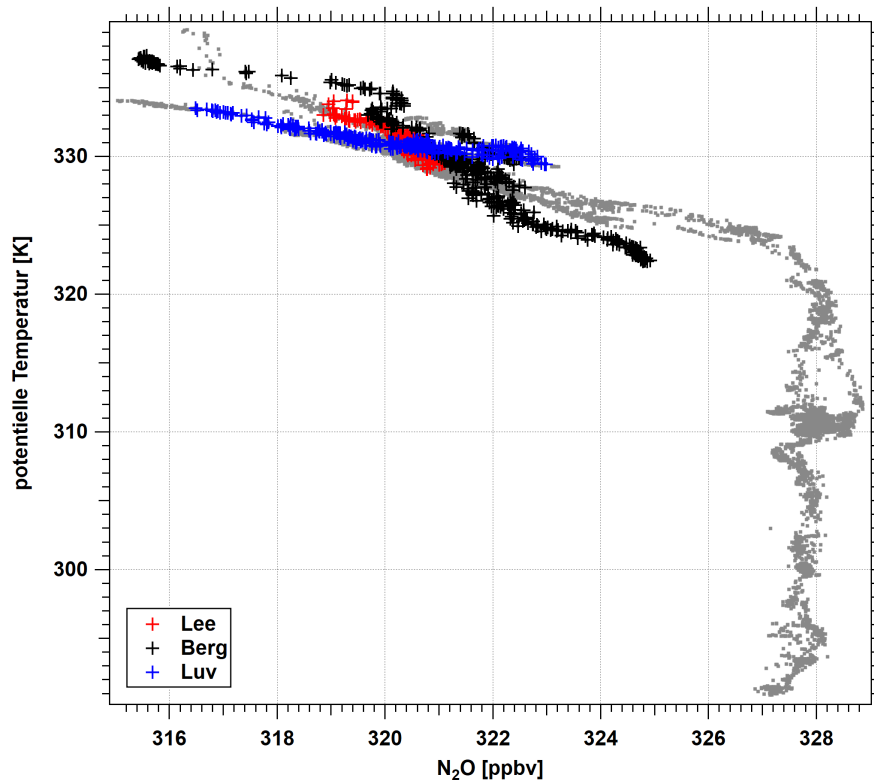


Abbildung 3.12.: Gemessenes N₂O-Profil. Datenpunkte des südwestlichen Abschnitts im Luv (blau), im Lee (rot) und über dem Gebirge (schwarz).

Lee des Gebirges ist die Steigung am größten/steilsten und über dem Gebirgrücken sind unterschiedliche Steigungen zu beobachten.

Auch wenn das N₂O-Profil in Abbildung 3.12 nur einen qualitativen Hinweis liefert, harmoniert dieser gut mit der Hypothese der schwerewelleninduzierten turbulenten Mischung. Im Folgenden (Abschnitt 3.5.2) wird die Entwicklung des θ'/N_2O' -Verhältnisses bei verschiedenen Skalen näher untersucht.

3.5.1. Analyse der Modell Ozonprofile

Während des südwestlichen Abschnitts des Messflugs wurde horizontal zirka 3 bis 17 K über der dynamischen Tropopause geflogen (siehe Abbildung 3.5a), wodurch die Messdaten nur einen kleinen Ausschnitt des Vertikalprofils zeigen. Um die Veränderung des gesamten Profils zu beobachten, muss daher auf Modelldaten zurückgegriffen werden. Allerdings beinhalten die ECMWF-Felder keine N₂O-Daten. Alternativ wird Ozon verwendet, da das Verhalten beider Spurengase in der UTLS mit umgekehrten Vorzeichen sehr ähnlich ist (siehe Abbildung 3.20).

Abbildung 3.13 zeigt alle 60 Sekunden ein Ozonprofil entlang des Flugwegs relativ zur dynamischen Tropopause aus dem EC-ml-Feld. Die Farbkodierung ist die gleiche wie in Abbildung 3.12. An der Tropopause sind die Profile im Luv (blau) am kompaktesten. Über dem Gebirge (schwarz) und im Lee (rot) ist die Variabilität, besonders zwischen -4 und $+2$ K, am größten und die Profile sind steiler als im Luv. Trotz der limitierten zeitlichen und räumlichen Auflösung des ECMWF-Modells stimmen diese Eigenschaften gut mit dem vorgestellten Schema (Abbildung 3.11) überein.

3. Nicht-isentrope Mischung während DEEPWAVE

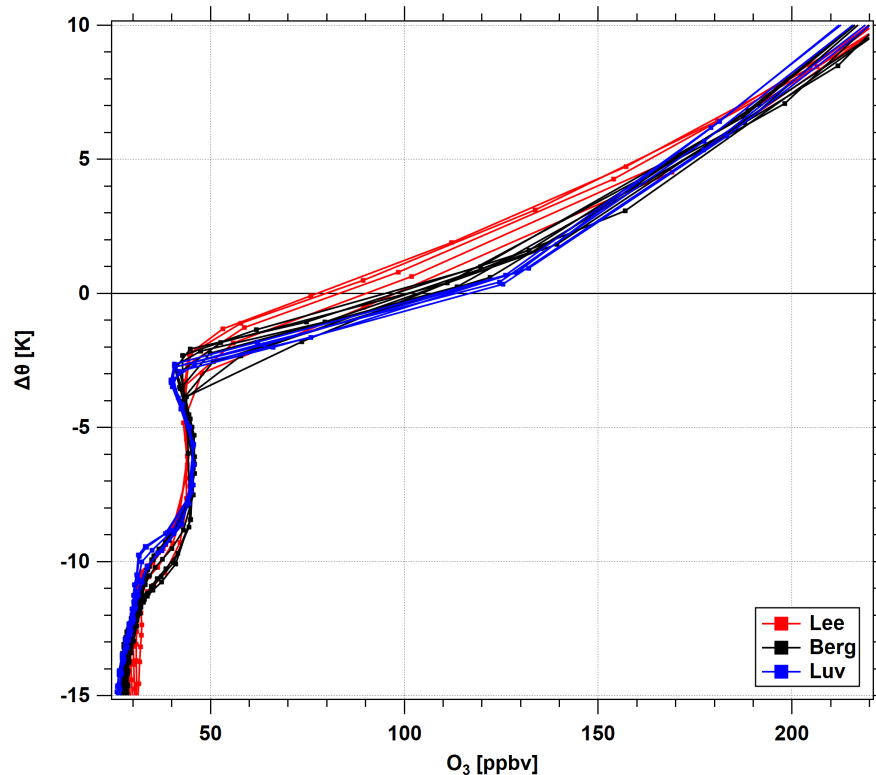


Abbildung 3.13.: Vertikale Ozonprofile relativ zur dynamischen Tropopause aus den ECMWF-Daten von 18 UTC entlang des Flugwegs (alle 60 s). Profile, bzw. Datenpunkte des südwestlichen Abschnitts im Luv (blau), im Lee (rot) und über dem Gebirge (schwarz).

3.5.2. Skalenanalyse des N₂O-Profiles

Um den potentiellen Einfluss von verschiedenen Skalen von Wellen, also deren Perioden (bzw. Frequenzen, Wellenlängen) zu ermitteln, d.h. von reversiblen bis zu kleinskaligen, nicht-linearen Effekten, wird in diesem Abschnitt eine skalenabhängige Korrelationsanalyse durchgeführt.

Für die Untersuchung werden die in Abschnitt 2.1.1 vorgestellten Berechnungen, d.h. die Gleichungen (2.8) und (2.9) verwendet. Dabei wird erwartet, dass das Verhältnis der Abweichungen von N₂O' relativ zu θ' bei linearen Wellen für verschiedene Mittelungszeiten unverändert bleibt. Sobald kleinskalige nicht-konservative Prozesse eine Rolle spielen, sollte sich die Steigung zwischen beiden Größen wie oben beschrieben ändern. Um den Effekt von unterschiedlichen Mittelungszeiten und damit den Einfluss von verschiedenen Wellenlängen auf die Verteilung der Daten zu demonstrieren, sind in Abbildung 3.14 zwei Beispiele dargestellt. Die verwendeten Mittelungszeiten (gleitendes Mittel) liegen bei 35 Sekunden (3.14a) und bei 200 Sekunden (3.14b). Da das genutzte gleitende Mittel einem Tiefpassfilter entspricht, zeigt Abbildung 3.14a den Einfluss von Skalen kleiner einer Wellenlänge von 7,6 km und Abbildung 3.14b von Wellenlängen kleiner 43,5 km. Es ist zu erkennen, dass die Steigungen bei allen drei Abschnitten auf beiden Bildern, also bei unterschiedlichen Mittelungszeiten, verschieden sind. Dabei ändern sich die Steigungen leeseitig und luvseitig im Vergleich zwischen beiden Abbildungen nur gering. Deutlich wird aber, dass die luvseitige (blau) Steigung in beiden Beispielen geringer, also flacher ist, als auf leewärtigen Seite (rot) und sich außerdem bei beiden Beispielen kaum verändert. Über

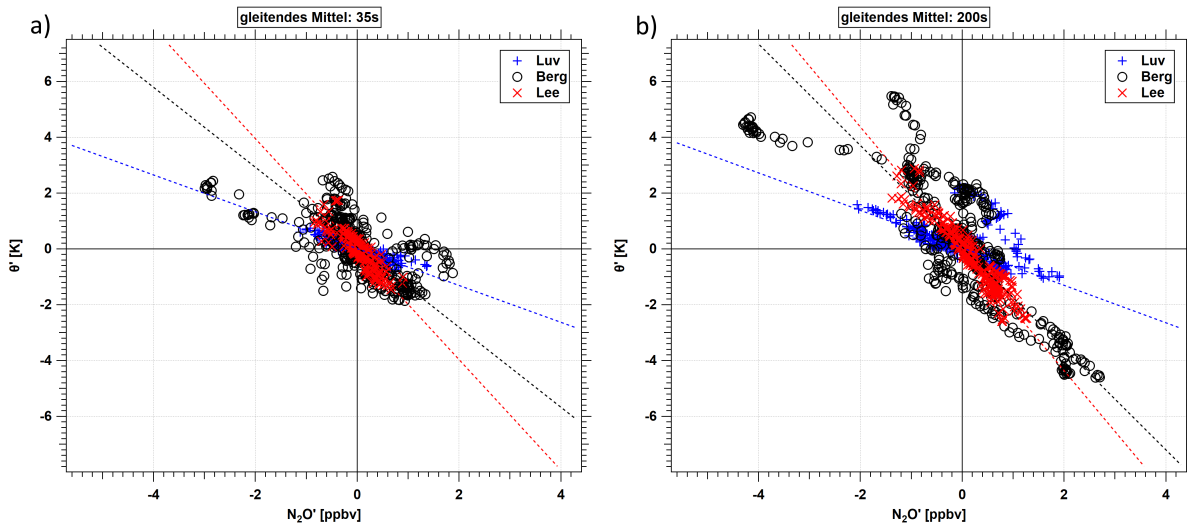


Abbildung 3.14.: Korrelation von θ' - N_2O' . Mit einem gleitenden Mittel von a) 35 Sekunden und b) 200 Sekunden für die drei Bereiche Luv (blau), über dem Gebirge (schwarz) und Lee (rot). Die gestrichelten Linien geben jeweils die Steigung an.

dem Gebirge (schwarz) ist der Zusammenhang zwischen beiden Größen gestört und zeigt eine hohe Variabilität. Für größere Wellenlängen (größere Mittelungszeiten; Abbildung 3.14b) ist die Steigung über dem Gebirge deutlich näher an der leeseitigen Steigung als bei kleineren Wellenlängen (Abbildung 3.14a).

Der zur Berechnung der Steigung verwendete Fit berücksichtigt Fehler in x- (N_2O) und y-Richtung (potentielle Temperatur) und basiert auf Press et al. (1987). Bei N_2O wurde ein Fehler von 0,39 ppbv und bei der potentiellen Temperatur ein Fehler von 0,53 K verwendet. Die Fehler (Gesamtunsicherheit) beider Größen wurden aus der Genauigkeit des jeweiligen Messgeräts und der Präzision, d.h. in diesem Fall die doppelte Standardabweichung von einem möglichst konstanten Zeitintervall, bestimmt.

Die Entwicklung der Steigung zwischen θ' und N_2O' in den drei Abschnitten ist für verschiedene Mittelungsperioden von 2 bis 512 Sekunden, in Schritten von einer Sekunde, in Abbildung 3.15 dargestellt. Die blaue Kurve zeigt die luvseitige Region. Mit einem Wert von ungefähr $-0,6 \text{ K ppbv}^{-1}$ ist die Steigung über alle Mittelungsperioden annähernd konstant. Zudem ist hier der Fehler der Steigung (schattierter Bereich) am kleinsten, d.h. die Datenpunkte liegen nahe an der Fitgeraden. Auf großen Skalen zeigt sich ein deutlicher Unterschied zu den Steigungen auf der Leeseite und über dem Gebirge. Die rote und die schwarze Kurve zeigen für diese Bereiche, dass sich die Steigung θ'/N_2O' ändert. Über dem Gebirge beginnt die Steigungsänderung bei Mittelungsperioden um 100 Sekunden (von 512 s kommend), was einer Wellenlänge von zirka 21,6 km entspricht (bei einer mittleren Fluggeschwindigkeit von $216,4 \text{ m s}^{-1}$) und nähert sich bei zirka 15 s (3,3 km) den ungestörten Steigungswerten im Luv an. Die Änderungen auf der leewärtigen Seite starten bei kleineren Mittelungszeiten von 40 s (8,7 km). In diesem Bereich zeigt sich, dass der großskalige Gradient modifiziert wurde, wahrscheinlich durch Turbulenz über dem Gebirge. Die Zunahme des Steigungsfehlers für Perioden kleiner 10 s, die in allen 3 Bereichen zu beobachten ist, deutet auf den steigenden Einfluss von Rauschen bei beiden Messgrößen und somit in der Korrelation hin. Leeseitig und über dem Gebirge kommen die Steigungslinien bei größeren Perioden zu dem neuen, modifizierten Gradienten zusammen. Dabei

3. Nicht-isentrope Mischung während DEEPWAVE

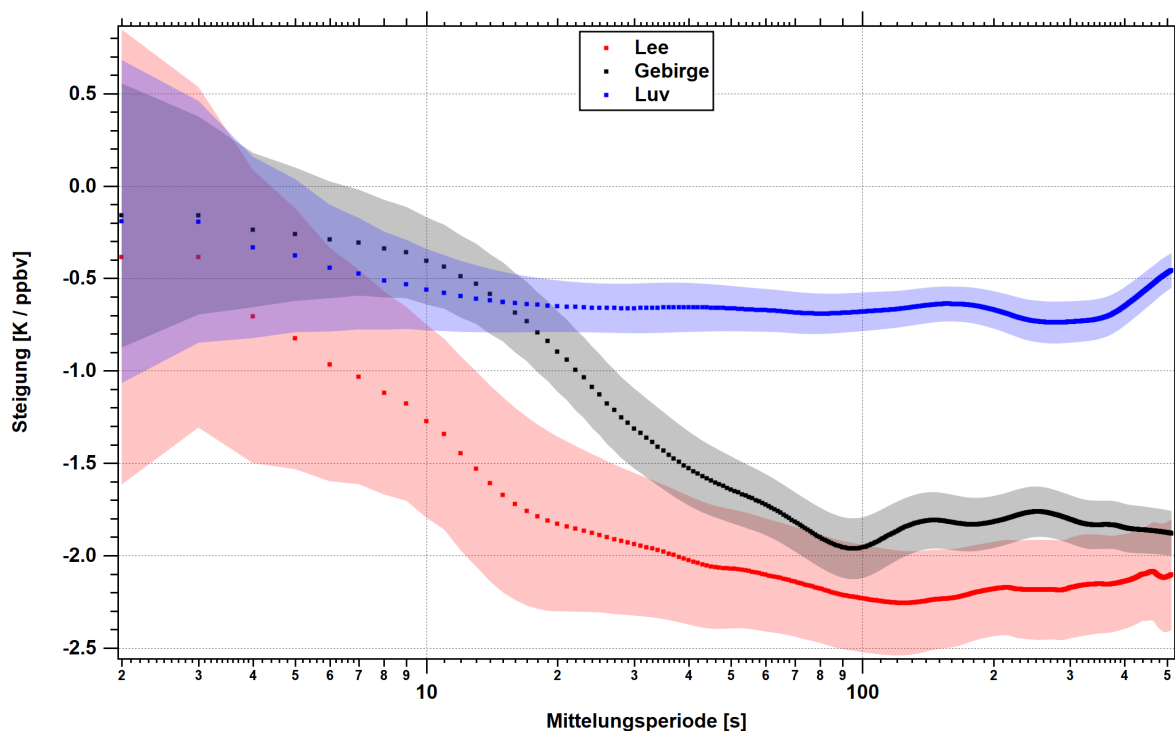


Abbildung 3.15.: Steigungen von θ'/N_2O' im Luv (blau), Lee (rot) und über dem Gebirge (schwarz) aufgetragen gegen die Mittelungsperiode.

hat die Steigung einen Wert um -2 K ppbv^{-1} .

Eine äquivalente Analyse mit den gemessenen Ozondaten liefert ein vergleichbares Ergebnis und wird im Anhang B gezeigt.

Die Schlussfolgerung der Skalenanalyse lautet, dass während des untersuchten Abschnitts des Messfluges großskalige Gebirgswellen die θ'/N_2O' -Steigung und damit die Relation zwischen beiden Größen auf kleinen Skalen modifiziert haben und dadurch nicht-isentropes Mischen induziert wurde. Die Änderung der Relation ist auch im Lee des Gebirges vorhanden und damit ein Hinweis auf einen bleibenden Einfluss.

3.5.3. Skalenanalyse mit der Wavelet-Kohärenz

Um zu untersuchen, welches die wichtigsten zeitlichen und räumlichen Skalen sind, bei denen Mischen von N_2O und potentieller Temperatur stattfindet, wird in diesem Abschnitt die Wavelet-Kohärenz (siehe Abschnitt 2.2.1) zwischen beiden Größen betrachtet (Gleichung (2.16)).

Die Wavelet-Kohärenz ist ein Maß für die Stärke der Kovarianz zwischen zwei Zeitreihen (Jevrejeva et al., 2003; Grinsted et al., 2004). Zur Erläuterung der Funktionsweise der Wavelet-Kohärenz sind im Anhang A.2 einige einfache Beispiele abgebildet.

Auf der luvwärtigen Seite, d.h. für Längengrade kleiner 170° ist in Abbildung 3.16 hauptsächlich eine hohe Kohärenz zu erkennen, d.h. die Werte liegen nahe bei 1. Dies passt zu der Beobachtung, dass N_2O und potentielle Temperatur über mehrere Zeitskalen zwischen 8 und 80 s kovariieren, dies entspricht Wellenlängen zwischen 1,7 und 17,3 km. In diesem Flugabschnitt ist die Phasenbeziehung mit Werten um 180° , d.h. die Phasenpfeile

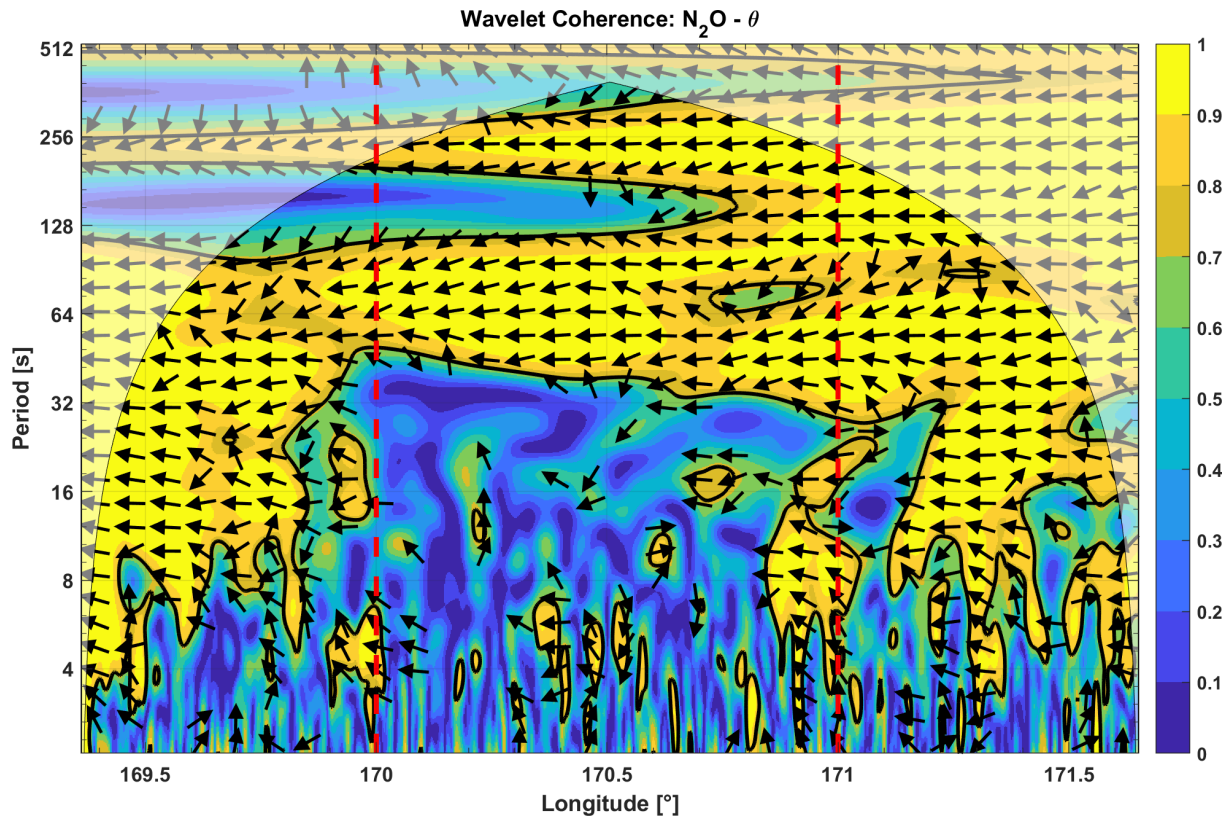


Abbildung 3.16.: Wavelet-Kohärenz von N_2O und potentieller Temperatur auf dem südwestlichen Flugabschnitt. Die dicken schwarzen Konturen zeigen die 5% Signifikanz. Die Pfeile beschreiben die Phasenbeziehung zwischen N_2O und potentieller Temperatur. \leftarrow : gegenphasig, \rightarrow : in Phase, \uparrow : N_2O führt 90° vor θ , \downarrow : θ führt 90° vor N_2O . Der COI markiert die Regionen des Wavelet-Spektrums, bei dem Randeffekte einen Einfluss haben können (dünne schwarze Linie, schattierter Bereich). Rote vertikale gestrichelte Linien markieren die Regionen im Luv ($<170^\circ$), im Lee ($>171^\circ$) und über dem Gebirge.

zeigen nach links, annähernd konstant. Ein solches Verhalten ist zu beobachten, wenn die Zeitreihen von N_2O und der potentiellen Temperatur gegenphasig verlaufen (Vergleich mit Abbildung 3.9), wie es bei einer reversiblen Auslenkung von Isentropen und Isoplethen zu erwarten ist. Die hohe Kohärenz und die konstante Phasenbeziehung passen gut zu dem Ergebnis aus Abbildung 3.15, bei dem sich Steigung im Luv (blaue Kurve) kaum verändert.

Über dem Gebirge, das heißt zwischen 170° und 171° und für Skalen kleiner 40 s ($< 8,7\text{ km}$) ist die Kohärenz mit Werten kleiner $0,7$ deutlich geringer. Dies wird begleitet von einer Änderung der Phasenbeziehung zwischen N_2O und potentieller Temperatur. Beides ist ein Hinweis auf eine Abnahme der Kovarianz. Auf der leewärtigen Seite (Längengrad $> 170^\circ$), speziell bei kleineren Perioden, zeigen sich höhere Kohärenzwerte. Allerdings sind diese variabler als im Luv. Zudem sind im Vergleich zu dem Flugabschnitt über dem Gebirge scharfe Phasenübergänge zu sehen. Dies passt ebenfalls zu den Ergebnissen aus Abbildung 3.15.

Bei luvseitigen Bedingungen mit einer hohen Kohärenz kovariieren N_2O und potentielle Temperatur. Die Phasenbeziehung zwischen ihnen ist unverändert, ebenso wie die berechnete Steigung. Oberhalb des Gebirges bricht diese Beziehung aufgrund von nicht-

3. Nicht-isentrope Mischung während DEEPWAVE

isentroper Mischung besonders auf kleinen Skalen zusammen, ausgelöst durch Turbulenz. Als Folge der Mischung über dem Gebirgskamm wurde auf der Leeseite ein neues Steigungsverhältnis mit einer festgelegten Phasenbeziehung, aber einer anderen Steigung etabliert.

Bei Mittelungsperioden mit niedriger Kohärenz und einem Zusammenbrechen der Phasenbeziehung zwischen N_2O und potentieller Temperatur kann daher geschlussfolgert werden, dass die beobachtete Steigungsänderung zwischen beiden Größen ein Resultat von schwerwelleninduzierter Mischung ist.

3.5.4. Spektrale Eigenschaften im Bereich der Gebirgswellen

Zur Ermittlung, in welchem Bereich, das heißt an welchem Ort und auf welcher Skala, Wellen und Turbulenzen aufgetreten sind, wird zunächst eine einfache kontinuierlich Wavelet-Transformation der Zeitreihen durchgeführt und damit die Wavelet-Leistung berechnet (siehe Abschnitt 2.2.1). Im Gegensatz zu anderen Methoden hat die Wavelet-Analyse den Vorteil, Prozesse in Raum und Zeit auflösen zu können.

Abbildung 3.17 zeigt die Wavelet-Transformationen von N_2O , vertikaler Windgeschwindigkeit und potentieller Temperatur. Dabei ergibt sich bei allen 3 Transformationen ein ähnliches Bild. Die größte Wavelet-Leistung tritt jeweils über dem Gebirge, d.h. zwischen 170° und 171° , und bei Perioden zwischen 32 und 128 Sekunden (Wellenlänge zwischen 6,9 und 27,7 km) auf. Dabei sind jeweils zwei Maxima erkennbar. Zu mehreren Zeitpunkten, bzw. an mehreren Stellen innerhalb dieses Intervalls, ist zudem zumindest eine leicht erhöhte Leistung auch bei kleinen Perioden zu erkennen, was ein Hinweis auf Turbulenz sein kann.

Um $171,5^\circ$ ist bei kleinen Skalen, besonders bei der vertikalen Windgeschwindigkeit, eine hohe Wavelet-Leistung zu erkennen. Dabei handelt es sich wahrscheinlich um Gebirgswellenturbulenz die im Lee der Berge auftritt.

3.5.5. Vertikale Spurengasflüsse

In diesem Abschnitt werden vertikale Spurengasflüsse mit der Kreuz-Wavelet-Transformation und der Kovarianz-Methode berechnet und miteinander verglichen. Die Methoden dazu wurden in Abschnitt 2.1 vorgestellt.

Um den quantitativen Spurengasfluss abschätzen zu können, wird zunächst das Kospektrum der Kreuz-Wavelet-Transformation berechnet, das in Abschnitt 2.2.1 beschrieben wurde (Gleichung (2.15)). Die Transformation der vertikalen Windgeschwindigkeit mit einer weiteren Größe zeigt dabei die spektrale Verteilung der vertikalen Flüsse (Mauder et al., 2007).

In Abbildung 3.18 ist das Ergebnis dieser Berechnung für den betrachteten Flugabschnitt dargestellt. Da sich das Kospektrum aus der Kombination zweier Wavelet-Transformationen, in diesem Fall N_2O und Vertikalwind, ergibt, ist eine gewisse Ähnlichkeit zu Abbildung 3.17 zu erwarten. Aus diesem Grund sind auch im Kospektrum zwei kompakte Bereiche mit großen Flüssen innerhalb des 5% Signifikanzlevels zu erkennen. Beide liegen wiederum oberhalb des Gebirges (zum Vergleich siehe Abbildung 3.9). Der eine Bereich liegt zwischen 170° und $170,6^\circ$ und bei Perioden zwischen 30 und 80 Sekunden, dies entspricht

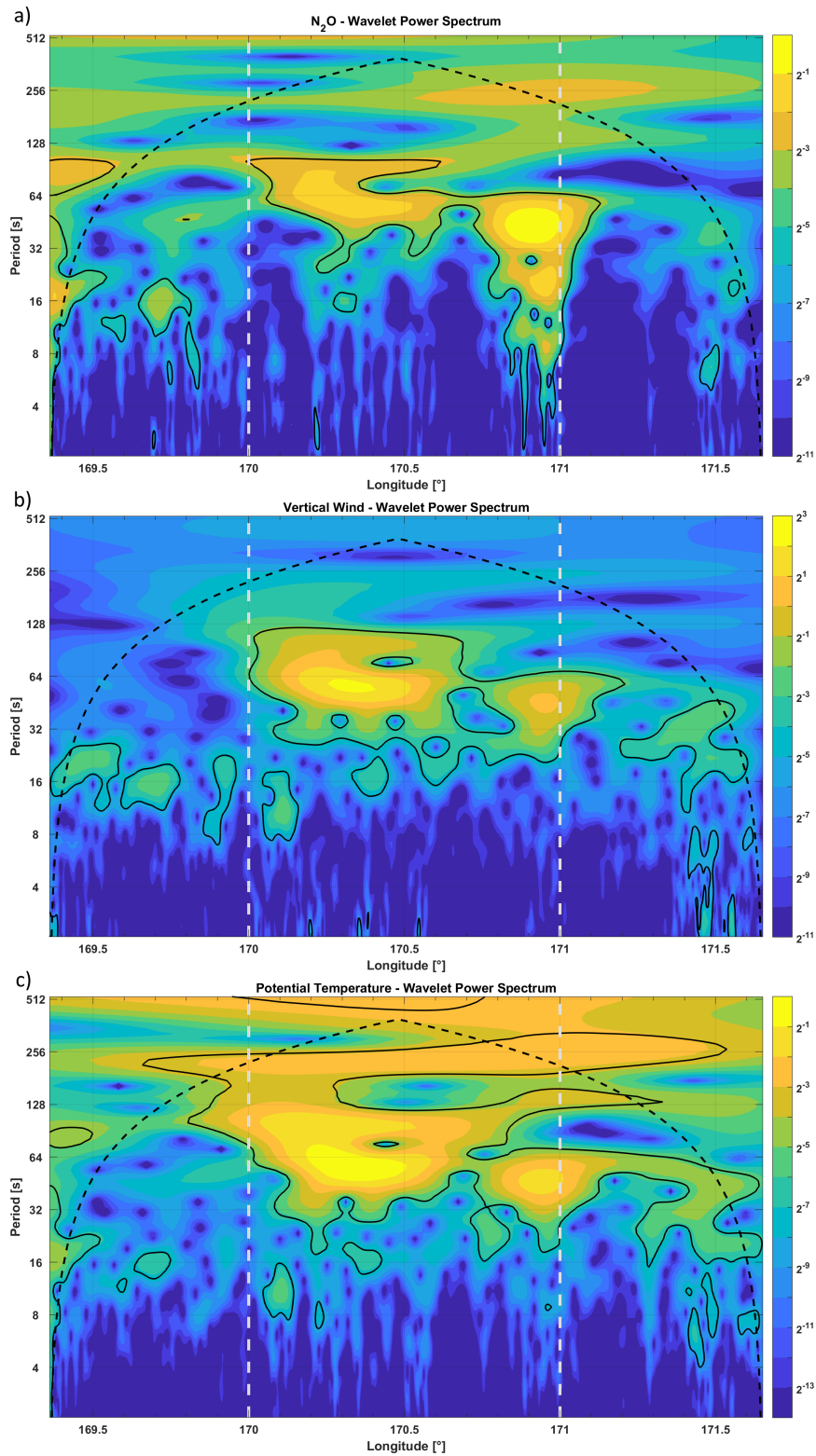


Abbildung 3.17.: Wavelet-Transformationen von N₂O (oben), vertikaler Windgeschwindigkeit (Mitte) und potentieller Temperatur (unten). Die Farbskala zeigt die normalisierte Wavelet-Leistung, die durchgezogenen schwarzen Konturen die 5% Signifikanz und die gestrichelte schwarze Linie den COI. Graue vertikale gestrichelte Linien markieren die Regionen im Luv (<170°), im Lee (>171°) und über dem Gebirge.

3. Nicht-isentrope Mischung während DEEPWAVE

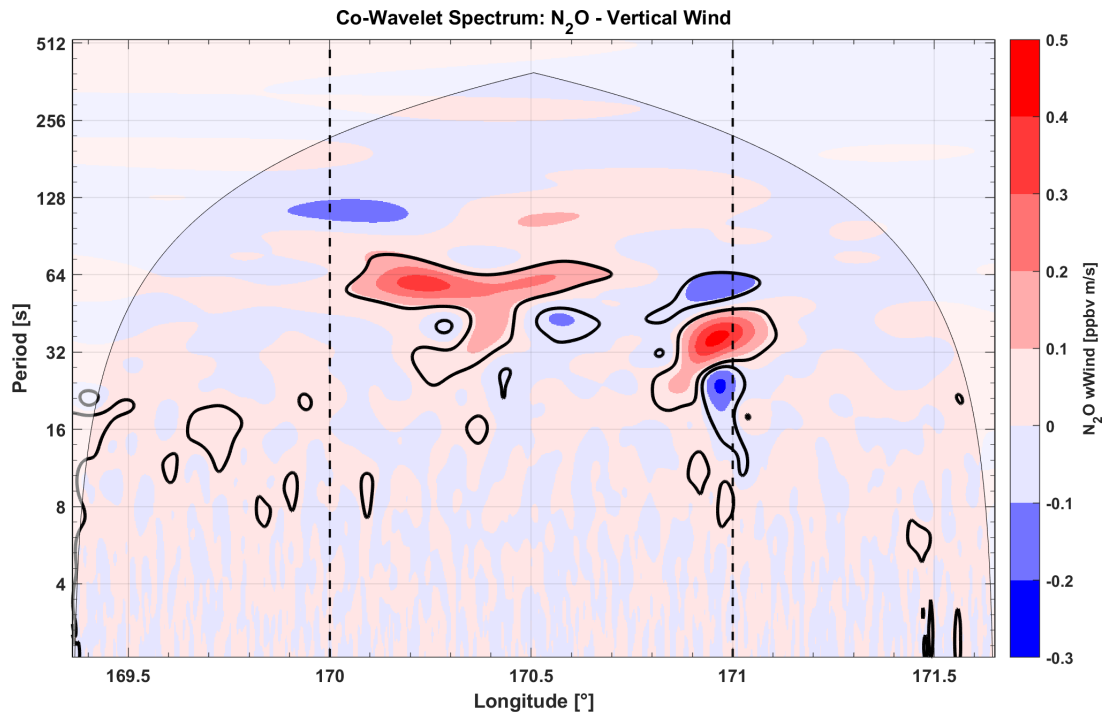


Abbildung 3.18.: Kospektrum der Kreuz-Wavelet-Analyse von N_2O und Vertikalwind. Die dicken schwarzen Linien zeigen die 5% Signifikanz und die dünne schwarze Linie den COI. Schwarze vertikale gestrichelte Linien markieren die Regionen im Luv ($<170^\circ$), im Lee ($>171^\circ$) und über dem Gebirge.

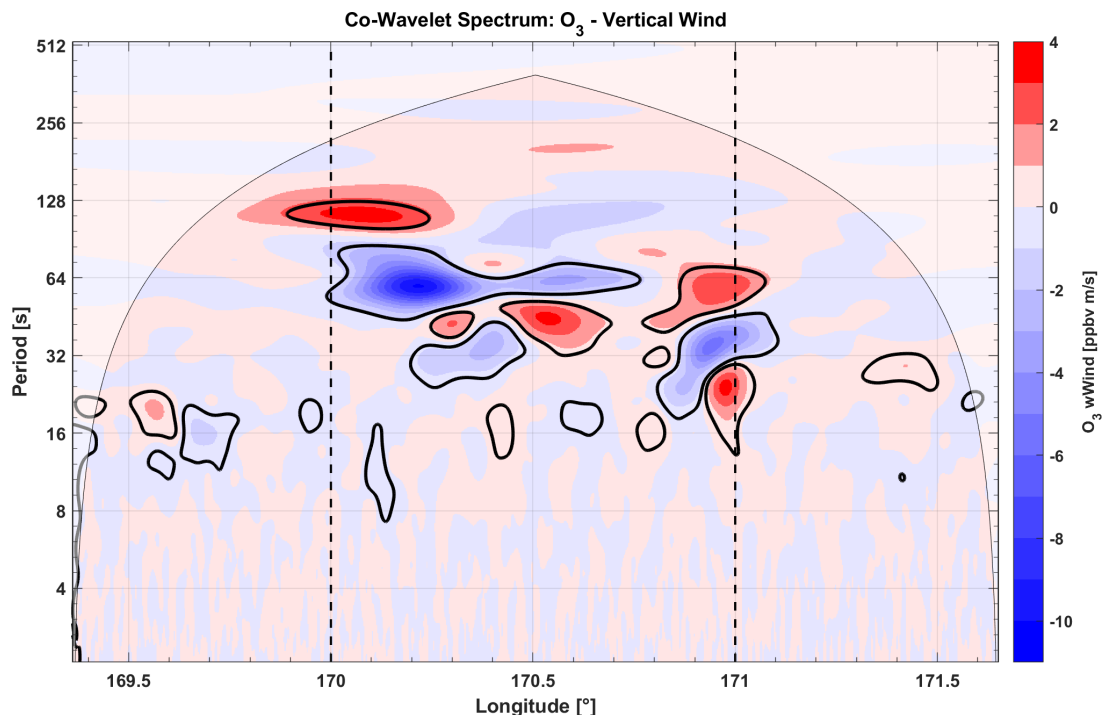


Abbildung 3.19.: Kospektrum der Kreuz-Wavelet-Analyse von O_3 und vertikaler Windgeschwindigkeit. Die dicken schwarzen Linien zeigen die 5% Signifikanz und die dünne schwarze Linie den COI. Schwarze vertikale gestrichelte Linien markieren die Regionen im Luv ($<170^\circ$), im Lee ($>171^\circ$) und über dem Gebirge.

einer Wellenlänge von 6,4 bis 17,4 km. Die Spurengasflüsse in dieser Region sind hauptsächlich positive und erreichen Werte von bis zu $0,5 \text{ ppbv} \cdot \text{m s}^{-1}$. Der andere Bereich liegt zwischen $170,8^\circ$ und 171° und bei etwas kleineren Skalen von 10 bis 50 Sekunden. Das entspricht Wellenlängen von 2,1 bis 10,9 km. Hier sind sowohl positive als auch negative Spurengasflüsse zu erkennen, die im Wertebereich zwischen $-0,22$ und $+0,56 \text{ ppbv} \cdot \text{m s}^{-1}$ liegen. Die Flüsse in beiden Regionen liegen in Flugabschnitten, in denen oberhalb des Gebirges Wellen auftreten (siehe Abbildungen 3.7 und 3.9).

Abbildung 3.19 zeigt die gleiche Analyse mit Ozon. Aufgrund der linearen, negativen Korrelation von N_2O und O_3 (Abbildung 3.20) ist das Verhalten, bzw. der Verlauf beider Spurengase sehr ähnlich und es ergibt sich ein größtenteils übereinstimmendes Muster (Position und Periode) in der Analyse, allerdings mit umgekehrten Vorzeichen. Demnach ergibt sich bei positiven N_2O -Flüssen ein abwärts gerichteter O_3 -Fluss und umgekehrt. Die erkennbaren Unterschiede bei kleinen Perioden ($< 15 \text{ s}$), lassen sich durch die geringere zeitliche Sensorauflösung des O_3 -Messgeräts erklären (siehe Abschnitt 3.3.1). Die Ozonflüsse erreichen dabei Werte von $-10,1$ bis $+3,6 \text{ ppbv} \cdot \text{m s}^{-1}$.

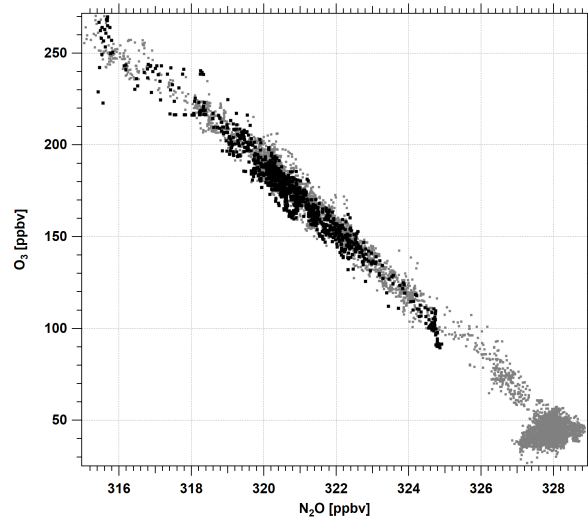


Abbildung 3.20.: Korrelation von O_3 und N_2O für den gesamten Flug (grau) und für den südwestlichen Abschnitt (schwarz).

Um die mit der Wavelet-Analyse berechneten Spurengasflüsse zu überprüfen und mit anderen Studien vergleichbar zu machen, erfolgt die Berechnung nun nach der Kovarianz-Methode (Shapiro, 1980; Schilling et al., 1999; Heller et al., 2017) unter Verwendung der Gleichungen (2.8), (2.9), und (2.10).

Abbildung 3.21 zeigt die lokalen Spurengasfluss von N_2O , das heißt das Produkt der Abweichungen/Variabilität von $\text{N}_2\text{O}'$ und w' (Gleichung (2.11)). Auf der y-Achse der Abbildung steht das gleitende Mittel, welches der maximalen Periode der analysierten Wellen entspricht, das verwendet wurde um die Abweichungen aus den Mittelwerten zu berechnen (Gleichungen (2.9) und (2.8)). Somit liefert ein Horizontalschnitt bei einem bestimmten gleitenden Mittel die in vielen Analysen verwendete eindimensionale Darstellung eines lokalen Flusses.

Wie im vorherigen Abschnitt (Abbildung 3.18) gibt es wieder zwei Bereiche mit starken lokalen Spurengasflüssen. Der eine Bereich liegt zwischen $170,1$ und $170,6^\circ$ und erreicht den höchsten Fluss bei einer Periode von zirka 85 Sekunden (18,4 km). Der zweite Bereich liegt zwischen $170,8$ und $171,1^\circ$ und hat sein Maximum bei einer Periode von 45 Sekunden (9,7 km). Die Flüsse liegen im Wertebereich zwischen $-5,1$ und $+5,6 \text{ ppbv} \cdot \text{m s}^{-1}$. Bei dem hier berechneten Fluss handelt es sich um einen kinematischen Fluss, der keinen diabatischen, d.h. irreversiblen Austausch bedeuten muss.

Um die mittleren Flüsse über einen größeren Zeitraum, bzw. über eine längere Strecke zu erhalten, verwendet zum Beispiel Schilling (1999) ein weiteres gleitendes Mittel (Gleichung (2.10)). Dadurch werden die gemittelten lokalen Flüsse unabhängig von ih-

3. Nicht-isentrope Mischung während DEEPWAVE

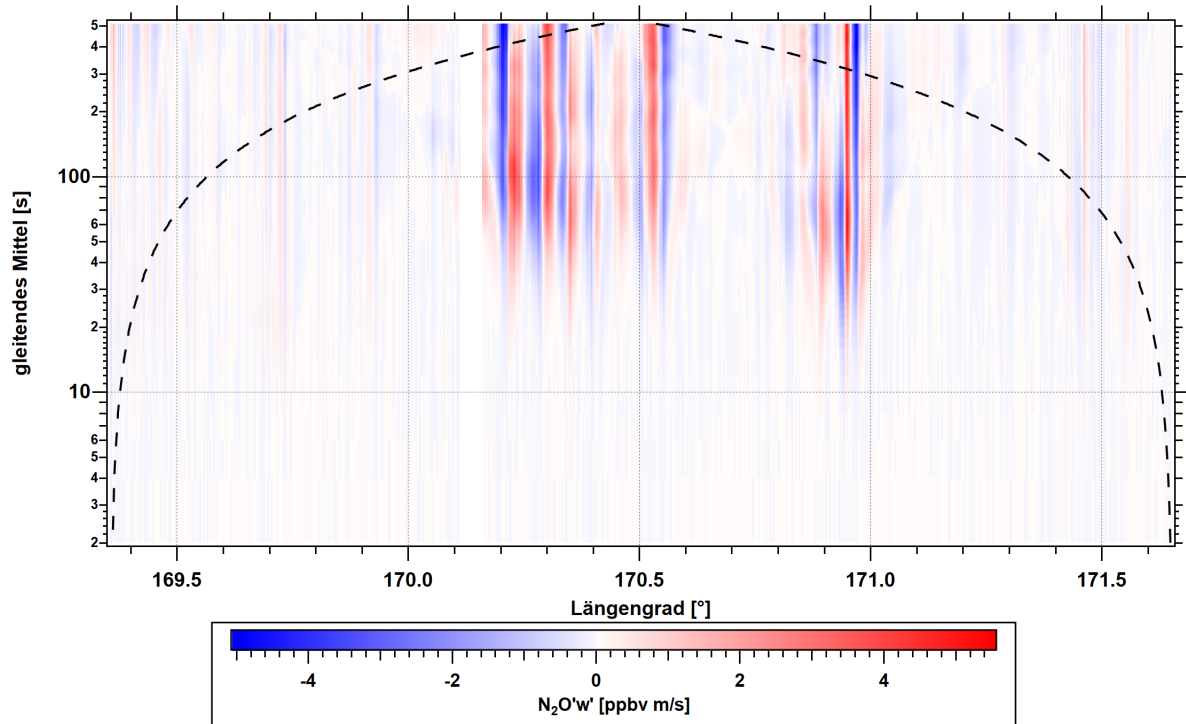


Abbildung 3.21.: Lokale Spurengasflüsse von N₂O und vertikaler Windgeschwindigkeit. Die gestrichelte Linie zeigt den COI.

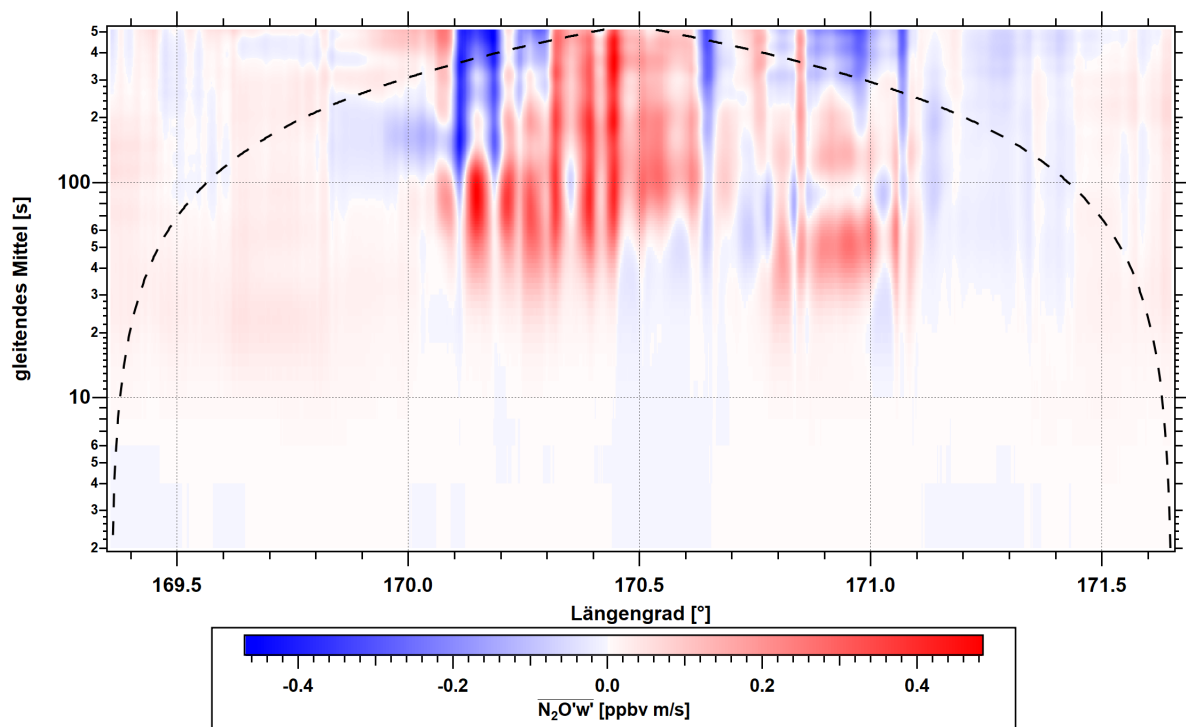


Abbildung 3.22.: Über 100 Sekunden gemittelte Spurengasflüsse von N₂O und vertikaler Windgeschwindigkeit. Die gestrichelte Linie zeigt den COI.

rer Wellenphase (Schilling, 1999). Um die Analysen in dieser Arbeit mit den Analysen in Schilling (1999) vergleichbar zu machen, wurde in Abbildung 3.22 über alle Perioden ein konstantes Mittel von 100 Sekunden angewendet, dies entspricht einem räumlichen Mittel über 21,6 km und wurde beliebig gewählt. Der N_2O -Spurengasfluss liegt bei diesem Mittel zwischen $-0,47$ und $+0,49 \text{ ppbv} \cdot \text{m s}^{-1}$ und hat damit die gleiche Größenordnung wie bei der Wavelet-Analyse (Abbildung 3.18). Während die Darstellung im Frequenzbereich durch das zusätzliche Mitteln deutlicher geworden ist, zeigt sich im Vergleich zur Wavelet-Analyse allerdings, dass die Darstellung auf der Längengradachse (Zeitbereich) bei einem gleitenden Mittel von 100 Sekunden unschärfer wird.

Um dieses Problem zu lösen und zur besseren Vergleichbarkeit mit dem Kospektrum der

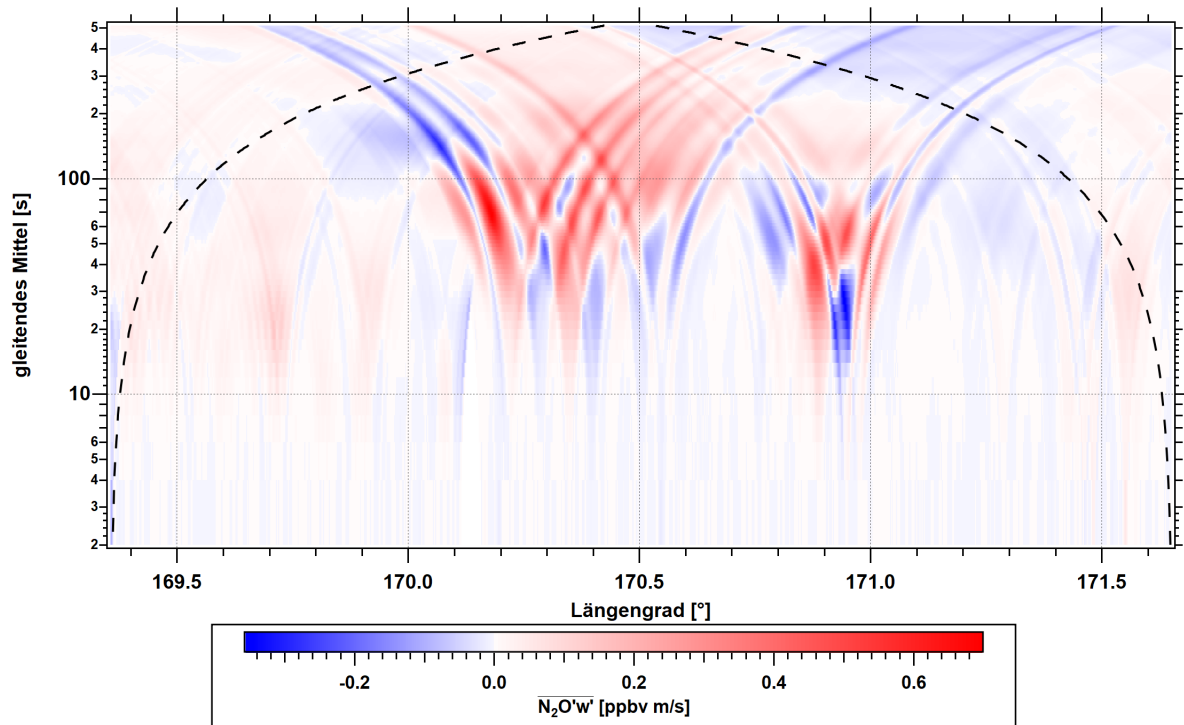


Abbildung 3.23.: Spurengasflüsse von N_2O und vertikaler Windgeschwindigkeit mit variablem Mittel. Die gestrichelte Linie zeigt den COI.

Kreuz-Wavelet-Analyse (Abbildung 3.18), wurde in Abbildung 3.23 ein variables Mittel verwendet. Das heißt, dass der lokale Fluss bei 2 Sekunden zusätzlich mit einem gleitenden Mittel von 2 Sekunden geglättet wurde, der Fluss bei 3 Sekunden zusätzlich mit einem Mittel von 3 Sekunden und so weiter. Durch dieses Vorgehen ergeben sich kinematische N_2O -Flüsse zwischen $-0,36$ und $+0,70 \text{ ppbv} \cdot \text{m s}^{-1}$. Mit dieser Berechnungsvariante stimmen sowohl die Form, also die Bereiche, in denen Flüsse auftreten, als auch die Stärke der Flüsse gut mit den Ergebnissen aus der Wavelet-Analyse überein. Die auffälligen Bögen bei dieser Variante sind ein Artefakt des variablen zusätzlichen gleitenden Mittels und der logarithmischen Darstellung.

Beim Ozon ergeben sich Flüsse zwischen $-15,7$ und $+6,8 \text{ ppbv} \cdot \text{m s}^{-1}$. Diese liegen wie beim N_2O im ähnlichen Bereich wie bei der Wavelet-Analyse, sind allerdings etwas kleiner.

Es gibt leider nicht viele Flussmessungen von Spurengasen im Bereich von orographischen Schwerewellen (Schilling et al., 1999; Heller et al., 2017). Diese unterscheiden sich erwartungsgemäß, da sie sehr stark von den jeweiligen lokalen Gegebenheiten, d.h. Amplitude

3. Nicht-isentrope Mischung während DEEPWAVE

und Wellenlänge der Schwerewellen sowie den Gradienten der Spurenstoffe abhängen. So wurden beispielsweise bei der POLSTAR (**POLAR STAR**atospheric aerosol experiment)-Kampagne über Nordskandinavien (Schilling, 1999) Gebirgswellen untersucht. Die maximalen N_2O -Flüsse erreichten dort Werte von $1,2 \text{ ppbv} \cdot \text{m s}^{-1}$ und sind damit ungefähr doppelt so groß wie die N_2O -Flüsse während des 9. Messflugs der DEEPWAVE-Kampagne. Für verschiedene Mittelungszeiten gibt Schilling außerdem maximale CO-Flüsse zwischen $2,4$ und $11,6 \text{ ppbv} \cdot \text{m s}^{-1}$ an. Mit Werten bis maximal $2,9 \text{ ppbv} \cdot \text{m s}^{-1}$ liegen die CO-Flüsse bei dem hier untersuchten Flug im unteren Bereich dieser Angabe. Allerdings waren während POLSTAR die Vertikalwinde stärker und auch die Spurengasamplituden im Bereich der Wellen größer als während des DEEPWAVE-Flugs, wodurch sich die kleineren Spurengasflüsse erklären lassen.

Ein Vergleich der in dieser Arbeit berechneten vertikalen Flüsse für die verfügbaren Spurengase ist in Abschnitt 5.7 gezeigt.

3.6. Turbulenzanalyse

In den vorigen Abschnitten haben die Untersuchungen Hinweise darauf geliefert, dass es während des 9. Messfluges, besonders im Bereich der Wellen über dem Gebirge, Abschnitte gegeben hat, in denen Turbulenz aufgetreten sein könnte. Außerdem wurde in Abschnitt 3.2, bzw. in Abbildung 3.6 gezeigt, dass es entlang des südwestlichen Flugabschnitts Bereiche mit erhöhter Windscherung und niedrigerer Richardson-Zahl gegeben hat. Im Folgenden werden Daten nach weiteren Hinweisen für das Auftreten von Turbulenz untersucht.

3.6.1. Die spektrale Leistungsdichte im Bereich der Wellen

Zunächst werden verschiedene Zeitreihen mit Hilfe der spektralen Leistungsdichte (siehe Abschnitt 2.2.2) nach einem möglichen Auftreten von Turbulenz untersucht. Um kleine Skalen auflösen zu können, werden hierfür Zeitreihen mit einer Messfrequenz von 10 Hz verwendet. Bei einer mittleren Fluggeschwindigkeit von $216,4 \text{ m s}^{-1}$ (südwestlicher Flugabschnitt) ist es somit möglich, eine minimale Wellenlänge von $43,3 \text{ m}$ darzustellen.

Abbildung 3.24 zeigt die spektrale Leistungsdichte der vertikalen Windgeschwindigkeit für den Abschnitt oberhalb des Gebirges. Zur besseren Übersichtlichkeit ist das Fourier-Spektrum (graue Linie) mit einem gleitenden Mittel von 5 Sekunden geglättet worden (schwarze Linie). Für Frequenzen größer $0,02 \text{ Hz}$ ($< 10,8 \text{ km}$) hat die Steigung einen Wert von ungefähr $-2,7$. Bei kleineren Frequenzen ist sie damit näher an dem Wert von -3 und deutet auf den Einfluss von größeren Skalen hin. Bei größeren Frequenzen ($> 1,8 \text{ Hz}$, bzw. $< 120 \text{ m}$) liegt die Steigung allerdings näher am Wert von $-5/3$ (blaue Linie).

Eine Auffälligkeit zeigt sich bei Frequenzen zwischen $0,3$ und $0,8 \text{ Hz}$. Das entspricht in diesem Flugabschnitt einer Wellenlänge von 271 bis 721 m . In diesem Frequenzintervall nimmt die Leistungsdichte um mehr als eine Größenordnung zu. In der Wavelet-Analyse der vertikalen Windgeschwindigkeit (Abbildung 3.17) zeigt sich dies zwischen 170° und 171° anhand lokal erhöhter und zum Teil signifikanter Leistung bei Perioden kleiner 4 s ($> 0,25 \text{ Hz}$). Allerdings zeigt die Abbildung die Analyse der 1 Hz -Daten, wodurch nur ein Teil des Frequenzspektrums aufgelöst werden kann. Möglicherweise handelt sich um

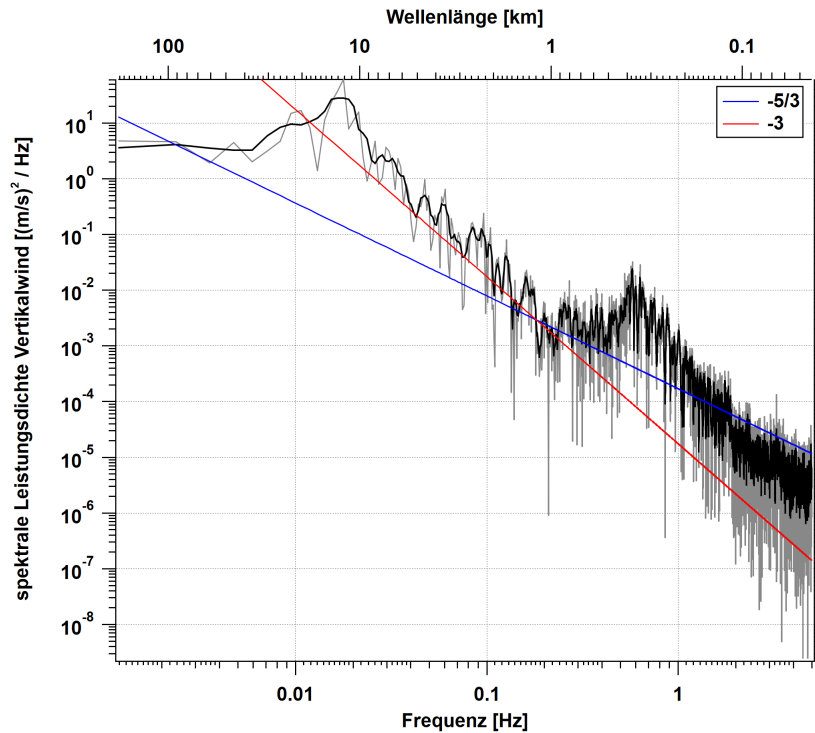


Abbildung 3.24.: Spektrale Leistungsdichte der vertikalen Windgeschwindigkeit. Die schwarze Linie ist ein 5 s Mittel des Fourier-Spektrums (grau). Die blaue Linie zeigt eine Steigung von $-5/3$ und rote eine Steigung von -3 .

eine Quelle von kleinskaliger Turbulenz, die unter den gegebenen atmosphärischen Bedingungen durch das darunterliegende Gebirge verursacht wird. Da das Signal zwar mit unterschiedlicher Stärke und Form, aber immer in einem ähnlichen Frequenzbereich auch bei anderen Flugabschnitten zu beobachten ist, könnte es sich auch um ein Problem bei der Messung oder der Berechnung der vertikalen Windgeschwindigkeit handeln. Obwohl das Signal bei der Analyse der horizontalen Windgeschwindigkeit nicht auftritt (siehe Abbildung D.1 im Anhang), kann eine Schwingung des Nasenmastes, oder der Falcon selbst nicht ausgeschlossen werden. In Schumann (2019) wurden über alle Flüge der DE-EPWAVE-Kampagne gemittelte Spektren gebildet. Dabei ist ein Peak bei Wellenlängen zwischen 5,6 und 6,7 km zu beobachten. Es wird vermutet, dass dieser durch die Trimmung des Autopiloten entsteht und demnach keine natürliche Ursache hat. Da die Wellenlänge in Schumann (2019) mehr als eine Größenordnung länger ist, als in Abbildung 3.24 kann die Ursache des Peaks nicht abschließend geklärt werden.

Die spektrale Leistungsdichte der potentiellen Temperatur für diesen Abschnitt ist in Abbildung 3.25 dargestellt. Es ist zu erkennen, dass die Steigung bei großen Frequenzen ($> 0,6$ Hz, bzw. < 361 m) näher am Wert von $-5/3$ liegt und bei kleinen Frequenzen eher bei einem Wert von -3 . Der Übergangsbereich zwischen beiden Regimen liegt in dem Frequenzintervall, in dem die spektrale Leistungsdichte der vertikalen Windgeschwindigkeit die Überhöhung zeigt.

Abbildung 3.26 zeigt die spektrale Leistungsdichte von N_2O . Die mittlere Steigung für diesen Abschnitt beträgt ungefähr $-1,7$. Diese Zahl ist nahe an dem Wert von $-5/3$ ($-1,6\bar{6}$) und damit ein Hinweis darauf, dass kleinskalige Turbulenz aufgetreten sein könnte. Im Frequenzbereich mit der Leistungsspitze bei der vertikalen Windgeschwindigkeit

3. Nicht-isentrope Mischung während DEEPWAVE

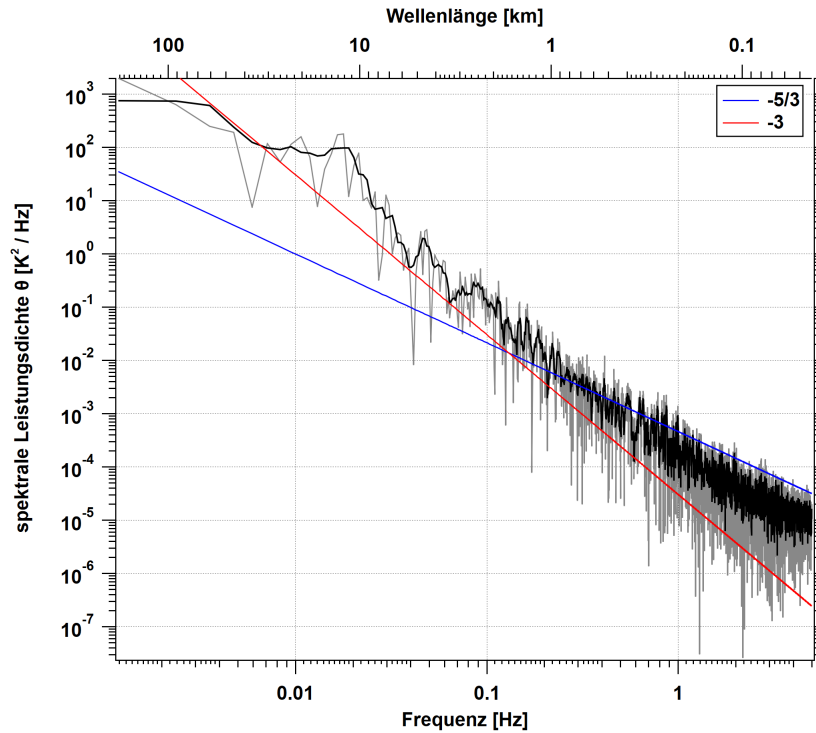


Abbildung 3.25.: Spektrale Leistungsdichte der potentiellen Temperatur. Die schwarze Linie ist ein 5 s Mittel des Fourier-Spektrums (grau). Die blaue Linie zeigt eine Steigung von $-5/3$ und rote eine Steigung von -3 .

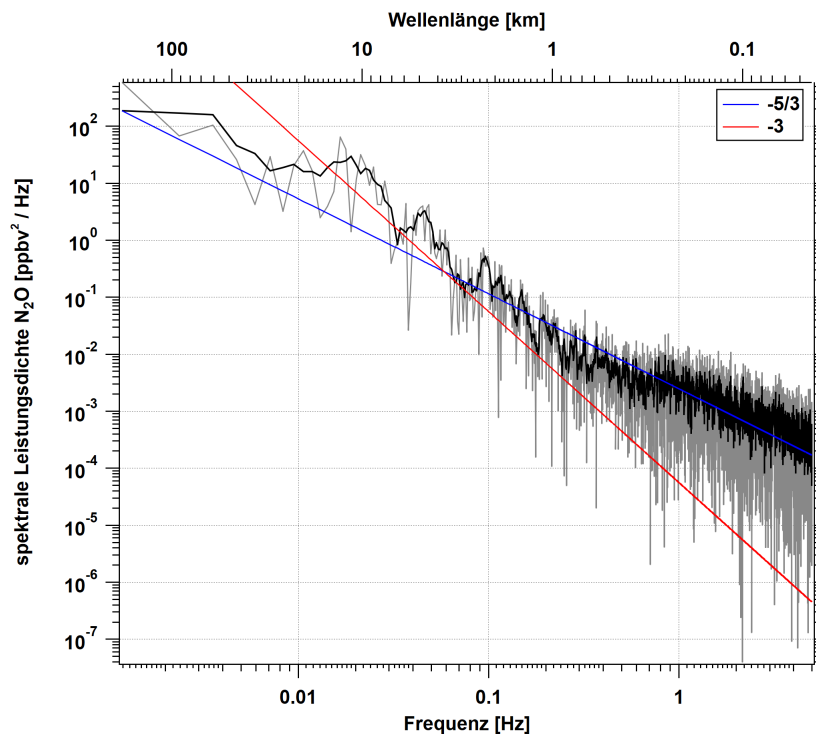


Abbildung 3.26.: Spektrale Leistungsdichte des N_2O -Mischungsverhältnisses. Die schwarze Linie ist ein 5 s Mittel des Fourier-Spektrums (grau). Die blaue Linie zeigt eine Steigung von $-5/3$ und rote eine Steigung von -3 .

ist beim Verlauf der N_2O Leistungsdichte eine Art „Stufe“ zu beobachten. Bei kleineren Skalen ($> 0,8$ Hz, < 271 m) scheint die Leistung auf einem etwas höheren Niveau zu liegen.

Die spektrale Leistungsdichte von CO, dem anderen von UMAQS gemessenen Spurengas, liefert für den selben Flugabschnitt eine ähnliche Steigung von zirka $-1,5$ und zeigt auch in der Form der Kurve einige Übereinstimmungen mit der Analyse von N_2O .

Die Steigung der potentiellen Temperatur, aber auch anderer kinematischer, bzw. thermodynamischer Größen, unterscheiden sich auf großen Skalen von denen der Spurengase (Abbildung 3.26), d.h. die Steigung ist größer. Dieser Unterschied wurde auch bei Bacmeister (1996) beobachtet. In deren Studie wird vermutet, dass das Mischungsverhältnis möglicherweise einen starken vertikalen Gradienten hat, der durch Turbulenz erzeugt wurde. Zumindest lokal ist z.B. auch in Abbildung 3.12 ein größerer Gradient zu beobachten. Allerdings haben die Ergebnisse in Abschnitt 3.5 gezeigt, dass die hier beobachteten orographischen Schwerewellen den vertikalen Spurengasgradienten verkleinern, wodurch diese Vermutung in dem hier analysierten Fall bei unvollständiger Mischung wahrscheinlich nicht mehr zutrifft.

Ein Vergleich der vom Flugzeug gemessenen meteorologischen Größen (potentielle Temperatur und Wind) mit den Analysen von Zhang et al. (2015) zeigt ein unterschiedliches Verhalten auf kleinen und großen Skalen. So ist eine Steigung von $-5/3$ bei Zhang et al. (2015) häufiger bei Wellenlängen zwischen 8 und 256 km vorzufinden, während sie bei den hier gemachten Analyse vor allem bei Wellenlängen < 1 km zu beobachten ist. Dabei ist jedoch zu berücksichtigen, dass zur Analyse Datensätze mit einer unterschiedlichen zeitlichen Auflösung (1 Hz bei Zhang et al. (2015)) genutzt wurden und so die Steigung der Leistungsdichten auf kleinen Skalen anders interpretiert werden könnte. Das Abflachen der Steigung bei einer Wellenlänge von ungefähr 10 km in der Analyse der vertikalen Windgeschwindigkeit ist dagegen auch in Abbildung 3.24 erkennbar. Bei der Analyse der vertikalen Windgeschwindigkeit sind in Zhang et al. (2015) Leistungsspitzen ähnlich der in Abbildung 3.24 zu sehen, allerdings bei Wellenlängen > 2 km. Manche dieser Erhöhungen treten beim Übergang der Steigung (von $-5/3$ auf -3 und umgekehrt) auf, wie hier z.B. in Abbildung 3.25, worauf die Autoren allerdings nicht weiter eingehen.

Verschiedene Studien (Gage und Nastrom, 1986; Tung und Orlando, 2003; Vallis, 2017) legen nahe, dass eine Änderung der Steigung im Leistungsspektrum an Quellen (oder Senken) von Energie stattfindet. Möglicherweise könnte das Auftreten einer Leistungsspitze in einem Frequenzbereich, in dem sich die Steigung ändert, wie es in Abbildung 3.24 zu erkennen ist, ein Hinweis darauf sein, dass diese Spitze eine Energiequelle darstellt. Eine Leistungsspitze in einem Bereich, in dem die Steigung konstant ist, wäre demnach keine Energiequelle.

3.6.2. GTG-Analyse

ECMWF-Analysedaten bestätigen die mögliche Entstehung von Turbulenz im Messgebiet über der Südinsel von Neuseeland (Abbildung 3.6). Zur weiteren Untersuchung wird im Folgenden die GTG-Analyse verwendet. GTG ist ein Systemprodukt zur Analyse und Vorhersage von Turbulenz für die Fliegerei. Der Algorithmus für die Berechnungen wird in Sharman et al. (2006); Sharman und Pearson (2017) beschrieben. Damit ist es möglich, für jeden Datenpunkt eine Turbulenzdiagnostik, also den Ort und die Stärke von Turbu-

3. Nicht-isentrope Mischung während DEEPWAVE

lenzen aus einem numerischen Wettervorhersagemodells, in diesem Fall aus den ECMWF IFS-Vorhersagedaten, zu berechnen.

Abbildung 3.27 zeigt die in-situ Messungen von potentieller Temperatur (schwarze Linie)

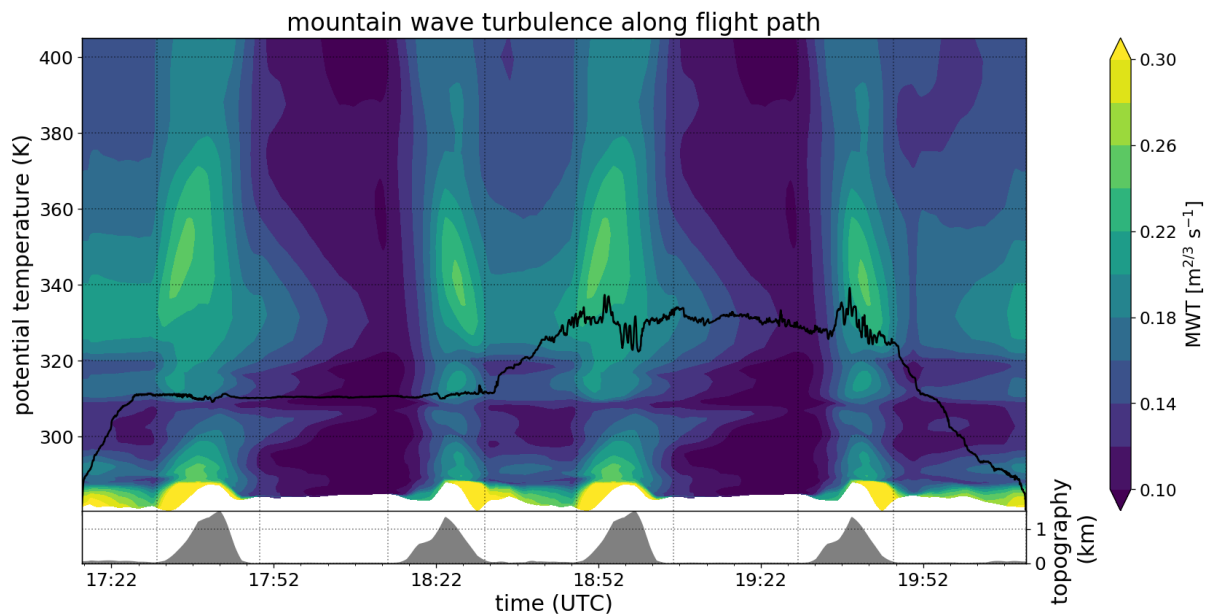


Abbildung 3.27.: Gebirgswellenturbulenz entlang des Flugwegs (oben). Die schwarze Linie zeigt den Flugweg. Unten: Topographie unterhalb des Flugwegs. Die vertikalen Rasterlinien markieren Anfang und Ende der horizontalen Flugabschnitte quer zum Gebirge.

und das Auftreten von Gebirgswellenturbulenz aus der GTG-Analyse (Bramberger et al., 2020) entlang des Flugweges. In der UTLS sind die größten Werte oberhalb von 320 K und damit in der Stratosphäre über den Gebirgrücken mit Werten bis zu $0,25 m^{2/3} s^{-1}$ zu erkennen. Es ist zu beobachten, dass die Berge auf dem südwestlichen Flugschnitt, d.h. oberhalb des 1. (17:30 UTC - 17:45 UTC) und 3. (18:50 UTC - 19:05 UTC) Bergs in der Topographie, stärkere Turbulenz erzeugen als Berge auf dem nordöstlichen Flugabschnitt. Dies deckt sich auch mit den Beobachtungen der vertikalen Windgeschwindigkeit (Abbildung 3.7). Entlang des Flugwegs erreicht die Gebirgswellenturbulenz Werte von maximal $0,23 m^{2/3} s^{-1}$ und damit den Bereich von moderater Turbulenz (Sharman et al., 2014; Bramberger et al., 2020). Die GTG-Analyse bestätigt damit das mögliche Vorkommen von Turbulenz entlang der Messungen und insbesondere in dem Bereich, in dem Mischung beobachtet wurde. Des Weiteren zeigt die Analyse auch, dass die beobachtete Turbulenz vom ECMWF IFS übereinstimmend, d.h. am richtigen Ort und zur richtigen Zeit, berechnet wurde.

3.7. Zusammenfassung

In diesem Kapitel wurden mit Hilfe hochauflösender (d.h. Daten mit einer zeitlichen Auflösung 1 und 10 Hz) Messungen von Spurengasen (insbesondere N_2O) und meteorologischen Größen, wie potentielle Temperatur und vertikale Windgeschwindigkeit, starke Hinweise darauf gefunden, dass es in einer Region mit erhöhter Schwerewellenaktivität über den

Südalpen von Neuseeland während des 9. Messflugs der DEEPWAVE 2014 Kampagne zu nicht-isentroper Mischung gekommen ist.

In den Zeitreihen der Spurengase (N_2O , O_3 und CO), sowie der potentiellen Temperatur und der vertikalen Windgeschwindigkeit zeigte sich oberhalb der neuseeländischen Alpen erhöhte Variabilität, die eine Indikation für orographische Wellen ist. ECMWF IFS-Analysedaten und Satellitenbilder deuten einen möglichen Effekt von orographisch erzeugten Schwerewellen an. Die Analysen von Kruse und Smith (2015); Fritts et al. (2016); Gisinger et al. (2017) bestätigen dies und zeigen außerdem, dass es im Bereich der Gebirgswellenaktivität einen vertikalen Energiefluss von ungefähr $1,5 \text{ W m}^{-2}$ gegeben hat.

Mit Hilfe der Spurengaskorrelation von N_2O und CO konnten zwei unterschiedliche stratosphärische Schichten mit unterschiedlicher Zusammensetzung identifiziert werden. Die Korrelation zeigt außerdem, dass es zu Mischung zwischen diesen beiden Schichten gekommen ist. Die geographische Position dieser sogenannten Mischungspunkte liegt oberhalb des Gebirges und damit in einer Region mit hoher Gebirgswellenaktivität.

Die Untersuchung des N_2O -Mischungsverhältnisses als Funktion der potentiellen Temperatur hat gezeigt, dass im Luv, über und im Lee des Gebirges unterschiedliche Steigungen auftreten. Durch diese Unterschiede ist das N_2O -Mischungsverhältnis auf einer Isentrope ebenfalls unterschiedlich, d.h. im Luv und im Lee liegen unterschiedliche isentrope N_2O -Gradienten vor, wodurch Mischung zwischen verschiedenen Luftmassen möglich ist. Über dem Gebirge kann es an der Tropopause somit zu turbulenter Mischung von troposphärischer und stratosphärischer Luft kommen, ohne dass weitere diabatische, z.B. strahlungsgetriebene Prozesse nötig sind. Eine Skalenanalyse hat gezeigt, dass die Unterschiede in den drei Bereichen wahrscheinlich durch nicht-isentropes Mischen auf kleinen Skalen, verursacht durch die Gebirgswellenaktivität, erzeugt wurden. In diesem Bereich, d.h. über dem Gebirge und bei kleinen Skalen, kovariieren das N_2O -Mischungsverhältnis und die potentielle Temperatur nicht miteinander und besitzen zudem keine feste Phasenbeziehung mehr, was durch die Wavelet-Kohärenz gezeigt werden konnte und ein Anzeichen für Turbulenz ist.

Zur Abschätzung von Vertikalflüssen wurden die Kreuz-Wavelet-Analyse und die Kovarianz-Methode verwendet. Beide Methoden liegen die größten Werte der berechneten lokalen Spurengasflüsse im Bereich der Gebirgswellen. Die Flüsse treten bei Wellenlängen zwischen 2 und 28 km auf und erreichen Werte von maximal $0,7 \text{ ppbv} \cdot \text{m s}^{-1}$ bei N_2O , $2,9 \text{ ppbv} \cdot \text{m s}^{-1}$ bei CO und $15,7 \text{ ppbv} \cdot \text{m s}^{-1}$ bei O_3 . In den Studien von Schilling et al. (1999) und Heller et al. (2017) sind die berechneten Flüsse aufgrund der größeren Amplituden bei den Spurengasen und der vertikalen Windgeschwindigkeit innerhalb der Gebirgswellen sogar noch größer. In dieser Arbeit können die Flüsse allerdings dem Bereich der N_2O - CO -Korrelation zugeordnet werden, in dem die Mischungspunkte liegen. Daraus lässt sich schließen, dass die Gebirgswellen in diesem Fall zu irreversibler Mischung in der Tropopausenregion geführt haben.

Mit Hilfe der Wavelet-Transformation und der spektralen Leistungsdichte konnten weitere Hinweise auf kleinskalige Turbulenz gefunden werden. Durch die Verwendung von Daten mit einer zeitlichen Auflösung von 10 Hertz war es möglich, Wellenlängen von ungefähr 43 Metern darzustellen. Des Weiteren bestätigen die GTG-Daten das Auftreten von moderater Gebirgswellenturbulenz im Messgebiet. Damit sind wahrscheinlich nicht-isentrope Effekte für den Mischungsprozess verantwortlich.

In diesem Abschnitt konnte ein konsistenter Nachweis von Mischung in einem Bereich, in

3. Nicht-isentrope Mischung während DEEPWAVE

dem durch Schwerewellen induzierte Turbulenz aufgetreten ist, gezeigt werden. Die mit der Turbulenz verbundenen irreversiblen, nicht-isentropen Flüsse über die Tropopause beeinflussen die Zusammensetzung der Atmosphäre auch im Lee des Gebirges und damit nach dem Abfließen des verursachenden Prozesses. Dieser Mischungsprozess verändert die Zusammensetzung in der UTLS somit nachhaltig.

4. Mischung und lokale Spurengasflüsse an einer Tropopausenfalte

In diesem Kapitel wird ein Flug der GW-LCYCLE II Messkampagne auf Mischungsprozesse an einer Tropopausenfalte untersucht. Für die Analysen werden hochauflösende Spurengasmessungen (CO und N₂O) und Messdaten meteorologischer Größen, wie z.B. vertikale Windgeschwindigkeit und potentielle Temperatur, mit einer zeitlichen Auflösung von 1 Hz verwendet. Unterstützt und ergänzt werden die Messdaten durch ECMWF IFS- und ERA5-Modelldaten. Als Analysewerkzeuge kommen Spurengaskorrelationen, vertikale Spurengasflüsse, spektrale Leistungsdichten und Wavelet-Analysen zur Anwendung. Mittels dieser Analysen wird in diesem Kapitel versucht folgende Fragen zu beantworten:

- Gibt es einen Zusammenhang zwischen Mischung, Spurengasflüssen und Instabilitäten?
- Können die Übergänge zwischen Troposphäre und Stratosphäre in der Tropopausenfalte anhand der Messgrößen identifiziert werden?
- Gibt Hinweise es Instabilitäten oder Turbulenz an der Tropopausenfalte, bzw. entlang des Flugwegs?
- Können möglicherweise irreversible Mischungsereignisse gefunden werden?

4.1. Die Messkampagne GW-LCYCLE II

4.1.1. Die wissenschaftlichen Ziele der Kampagne

Die Kampagne GW-LCYCLE II fand im Januar und Februar 2016 zusammen mit den Kampagnen POLSTRACC (**POL**ar **STR**atosphere in a **C**hanging **C**limate) und SALSA (**S**easonality of **A**ir mass transport and origin in the **L**owermost **S**tratosphere using the **H**ALO Aircraft) im nördlichen Skandinavien statt (zusammengefasst kurz PGS). Die Messflugzeuge HALO (**H**igh **A**ltitude and **L**ong range research aircraft), eine Gulfstream G550 und Falcon, eine Dassault Falcon 20-E5 des DLR waren dabei in Kiruna, Schweden stationiert. Die Kampagne diente der Untersuchung von Schwerewellen in der Atmosphäre. Basierend auf Modellrechnungen, sowie boden- und flugzeuggestützten Messungen wurden dynamische Prozesse im polaren Winter untersucht.

Zur Übersicht sind in Abbildung 4.1 alle 8 Lokalflüge der GW-LCYCLE II Kampagne in Abhängigkeit der Druckhöhe dargestellt.

4. Mischung und lokale Spurengasflüsse an einer Tropopausenfalte

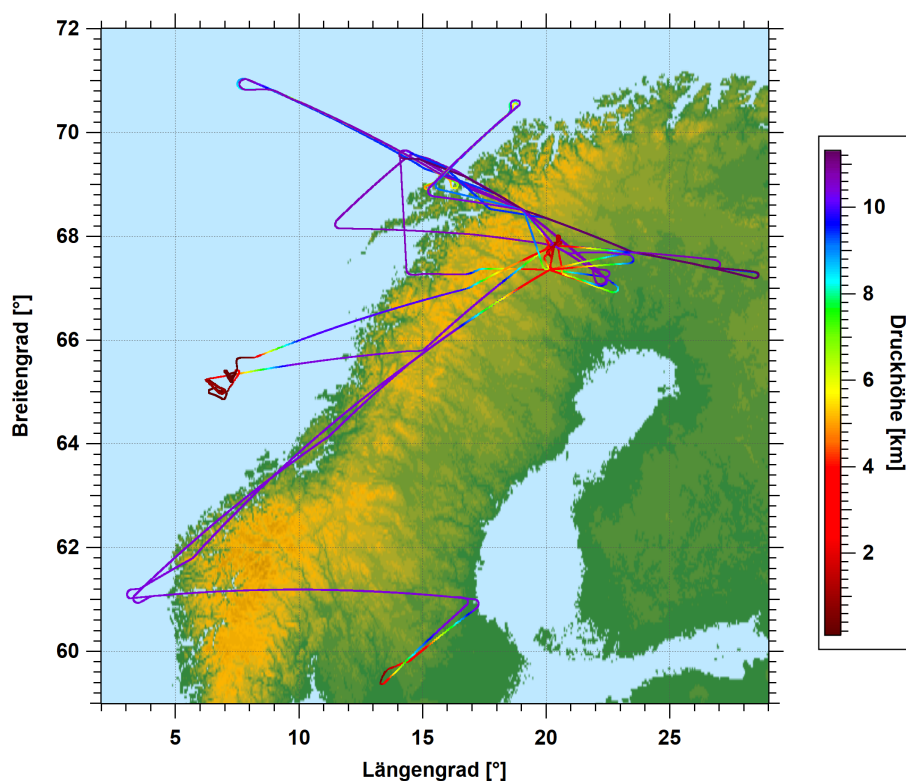


Abbildung 4.1.: Flugstrecken der Lokallflüge während der GW-LCYCLE II-Kampagne eingefärbt mit der Druckhöhe.

4.1.2. Instrumentierung und Daten

Für die Analysen werden in diesem Kapitel flugzeuggetragene Spurengasmessungen von N_2O , CO und O_3 genutzt. Dabei wurden N_2O und CO von UMAQS mit einer Genauigkeit von 0,39 ppbv, bzw. 1,3 ppbv (Müller et al., 2015) gemessen (siehe Abschnitt 3.3.1). Die O_3 -Messungen erfolgen vom DLR mit einem ultraviolett photometrischer Ozonanalysator TE49 mit einer Präzision von 3% und einer Genauigkeit von 5% (Schumann et al., 2011). Die Antwortzeit, d.h. Sensorauflösung des Messgeräts beträgt 15 s. Außerdem werden Messungen der Basissensoren der DLR Falcon (Krautstrunk und Giez, 2012; Mallaun et al., 2015; Bögel und Baumann, 1991; Heller, 2018) verwendet. Diese messen Position, Geschwindigkeit und Lage des Flugzeuges, sowie Temperatur, Feuchte, Druck und Wind. Für die in Abschnitt 4.1.3 durchgeführte Bearbeitung der Ozondaten werden zudem Messungen von HALO eingesetzt. Dies sind Daten der Bordsensoren, die von BAHAMAS (**B**asic **H**alo **M**easurement **A**nd **S**ensor system) vom DLR gemessen wurden (Krautstrunk und Giez, 2012), sowie N_2O -Messungen von der Johannes Gutenberg-Universität Mainz mit dem Infrarotabsorptionslaserspektrometer TRIHOP (**T**Racer **I**n-situ quantum cascade laser absorption spectrometer / **H**ydrogen and **O**rganic **P**eroxide monitor), das eine Präzision von 1,84 ppbv (Krause et al., 2018) hat und O_3 -Messungen vom KIT (**K**arlsruhe **I**nstitute of **T**echnology) mit dem Chemielumineszenzdetektor FAIRO (**F**ast **A**IRborne **O**zone instrument) mit einer Präzision von $\approx 0,3$ ppbv (bei 10 Hz) und einer Ungenauigkeit von ungefähr 1,5% (Zahn et al., 2012).

Von der Modellseite kommen die in Abschnitt 2.3.3 beschriebenen Datensätze vom ECMWF IFS sowie von ERA5 zum Einsatz (Abschnitt 2.3.1).

4.1.3. Bearbeitung der gemessenen Ozondaten

Aufgrund von Problemen bei den Messungen, bzw. mit dem Messgerät, können die vom Ozonmessgerät (TE49) gemessenen Daten nicht ohne weitere Bearbeitung für die Analysen verwendet werden. Im Vergleich mit den HALO-Messungen der POLSTRACC-Kampagne wird deutlich, wo die Probleme liegen. Dieser Vergleich ist in Abbildung 4.2 dargestellt. Die grauen Datenpunkte zeigen die Daten von POLSTRACC und die farbigen Punkte die von GW-LCYCLE II.

In der unteren Stratosphäre gibt es kanonische, d.h. allgemein gültige Korrelationen zwischen langlebigen Spurengasen, die unabhängig vom Ort der Messung sind (Plumb und Ko, 1992; Plumb, 2007). Speziell N_2O und O_3 zeigen kompakte Korrelationen, die wohldefinierte Steigungen in der UTLS aufweisen (Murphy und Fahey, 1994; Proffitt et al., 2003; Hegglin und Shepherd, 2007) und in Abschnitt 2.1.2 beschrieben wurden. Dabei liegt die Bandbreite der gemessenen $\text{O}_3/\text{N}_2\text{O}$ -Steigungen in der Literatur zwischen -18 und -30 (z.B. Müller et al. (2001)). Auch die fast gleichzeitig stattfindenden POLSTRACC-Messungen sind mit einem Wert von $-17,0$ sehr nahe an diesem Größenbereich. Die Daten bei GW-LCYCLE II liegen mit einer Steigung von $-10,8$ jedoch deutlich unterhalb dieser Werte, wie in Abbildung 4.2a zu sehen ist. Dabei zeigt die O_3 - N_2O -Korrelation nicht nur eine flachere Steigung, sondern auch einen Versatz, d.h. GW-LCYCLE II-Daten sind systematisch niedriger als die POLSTRACC-Daten. Ein sehr ähnliches Bild ergibt sich auch bei der O_3 -CO-Korrelation (Abbildung 4.2b) und dem O_3 -Profil mit der potentiellen Temperatur als y-Achse (Abbildung 4.2c). Die Zeitreihen zeigen, dass die Variabilität der Ozondaten konsistent mit der Variabilität der N_2O - und CO-Daten ist. Dies bedeutet, dass die Ozonmischungsverhältnisse um einen unbekanntem Faktor zu niedrig sind, ihre Variabilität jedoch die atmosphärischen Prozesse widerspiegelt. Zu erkennen ist dies zum Beispiel daran, dass die O_3 - N_2O -Korrelation kompakt ist. Das Ziel ist es daher die Ozondaten mit Hilfe der gleichzeitig gemessenen POLSTRACC-Daten zu skalieren.

Im folgendem wird nun gezeigt, wie die gemessenen Ozonmischungsverhältnisse für die weitere Verwendung bearbeitet wurden. Dabei liegen allerdings nur die Daten für die Flüge 4 und 8 vor.

Für den hier verwendeten Bearbeitungsansatz wird zunächst aus der O_3 - N_2O -Korrelation der POLSTRACC-Kampagne ein Profil bestimmt, das im Folgenden als Hintergrundprofil bezeichnet wird. Dazu werden nur die Daten aus der 1. Phase der Kampagne verwendet (mittelgraue Punkte in Abbildung 4.2), da diese im gleichen Zeitraum wie die GW-LCYCLE II-Flüge stattgefunden haben (12.01.2016 bis 02.02.2016). Die Gulfstream G550 - HALO kann mit einer maximalen Flughöhe von 15,5 Kilometern fast 3 km höher fliegen als die Falcon mit 12,8 km (Krautstrunk und Giez, 2012). Damit konnte HALO in atmosphärischen Regionen fliegen, die stärker vom polaren Wirbel beeinflusst wurden. Der zu dieser Jahreszeit beginnende Ozonabbau innerhalb des Wirbels verändert den Zusammenhang von N_2O und O_3 . Für die Berechnung des Hintergrundprofils wurden daher nur Daten aus Höhenbereichen verwendet in denen auch die Falcon geflogen ist. Als Grenzen wurden hierzu das Maximum und das Minimum der potentiellen Temperatur von GW-LCYCLE II gewählt.

Bei den N_2O -Daten von POLSTRACC, die mit TRIHOP gemessen wurden, ist die sehr hohe Variabilität in der Troposphäre auffällig (siehe Abbildung 4.2a). Deutlich wird dies besonders im Vergleich zu den UMAQS-Messungen. Der Mittelwert des N_2O -Mischungsverhältnisses liegt zum Beispiel für potentielle Temperaturen < 290 K, d.h. in der Tropo-

4. Mischung und lokale Spurengasflüsse an einer Tropopausenfalte

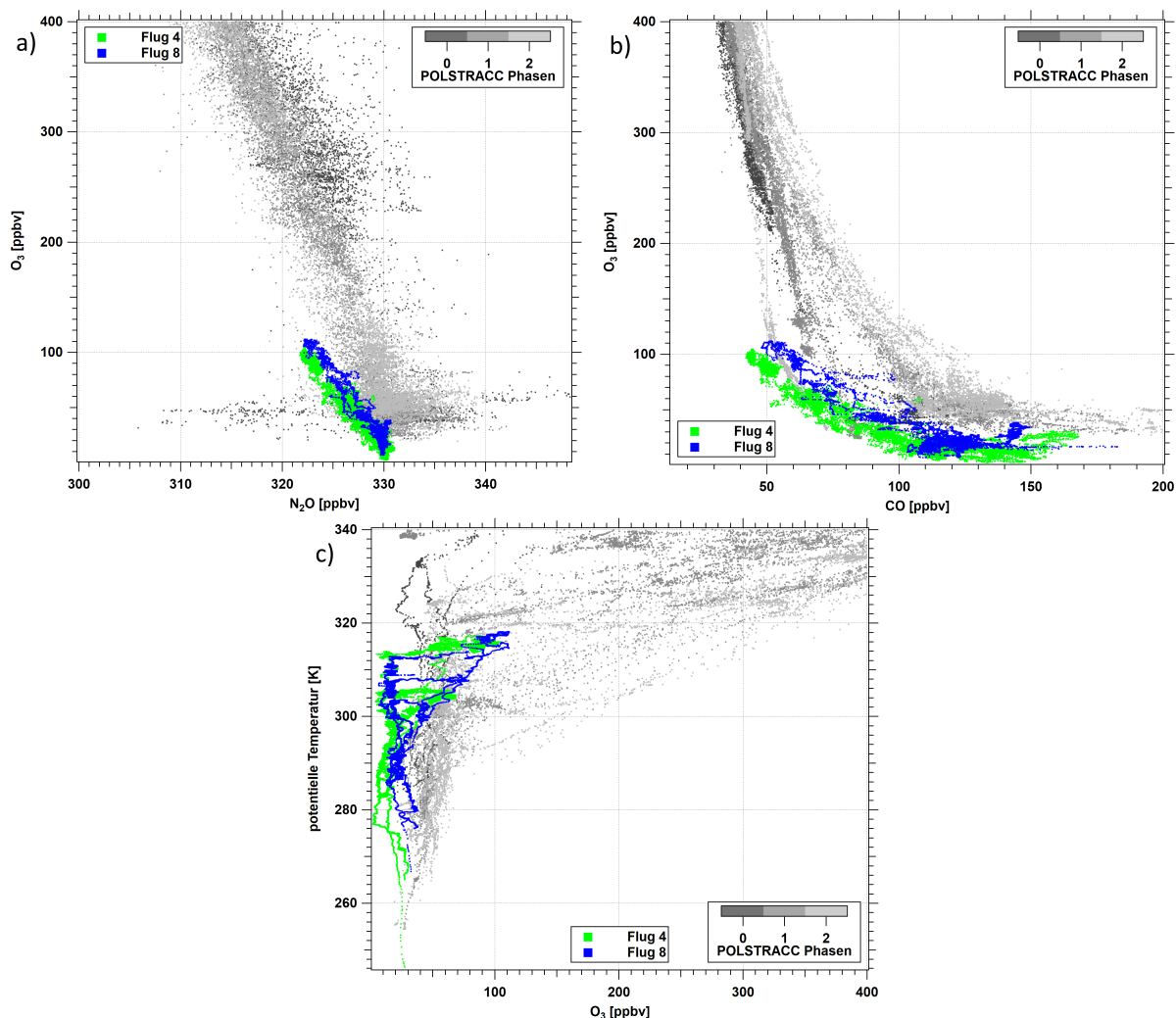


Abbildung 4.2.: Verschiedene O_3 -Korrelationen mit den unbearbeiteten Daten. Die Grautöne zeigen die verschiedenen Phasen der POLSTRACC-Kampagne. Bunte Farben stellen die einzelnen Flüge der GW-LCYCLE II-Kampagne dar.

sphäre, bei TRIHOP bei $331,91 \pm 2,63$ ppbv und bei UMAQS bei $329,98 \pm 0,27$ ppbv. Ein Teil Variabilität kann durch die ungefähr 4,6 Mal größere Messunsicherheit von TRIHOP erklärt werden. Da N_2O in Troposphäre homogen verteilt ist und die Quellen am Boden liegen, sind Messungen mit Werten teils über 348 ppbv atmosphärenphysikalisch eher unwahrscheinlich, zumal solch hohe Messungen bei UMAQS nicht auftreten. Da ein messtechnisches Problem (bei TRIHOP) nicht ausgeschlossen werden kann, werden hohe N_2O -Mischungsverhältnisse bei der Bestimmung des Hintergrundprofils ebenfalls nicht berücksichtigt. Als Grenzwert wurden hier 331,46 ppbv verwendet. Dieser Wert ergibt sich aus dem Maximum der N_2O -Messungen mit UMAQS während GW-LCYCLE II (331,07 ppbv), plus Messunsicherheit (0,39 ppbv).

Im nächsten Schritt der Datenbearbeitung werden die Messwerte des Hintergrundprofils (POLSTRACC-Daten) der O_3 - N_2O -Korrelation gefittet. Aufgrund der leichten Krümmung der Korrelation, die in Abbildung 4.2a deutlich zu erkennen ist, wurde hier kein linearer Fit, sondern ein Polynomfit 5. Ordnung verwendet. Die in der Korrelation vorhan-

dene Krümmung, ist ein Hinweis darauf, dass die gemessenen Luftmassen durch Luft aus dem polaren Wirbel beeinflusst wurden. Diese prozessierte Luft modifiziert den erwarteten linearen Zusammenhang und erzeugt die Krümmung. Bei der Kampagne GW-LCYCLE I (**G**avity **W**ave - **L**ife **CYCLE** Experiment I), die im Dezember 2013 am selben Ort stattgefunden hat und bei der keine Probleme bei der Messung der Ozondaten aufgetreten sind, zeigt die O_3 - N_2O -Korrelation zudem ein ähnliches Verhalten. Für den Polynomfit werden die Fehler in x- und y-Richtung (Press et al., 1987) berücksichtigt. Für das O_3 -Messgerät FAIRO wird mit einem Fehler von 2% gerechnet. Bei TRIHOP, mit dem N_2O gemessen wurde, wird ein Fehler von 1,84 ppbv angenommen. Als nächstes werden auch die Messdaten von GW-LCYCLE II mit einem Polynomfit 5.

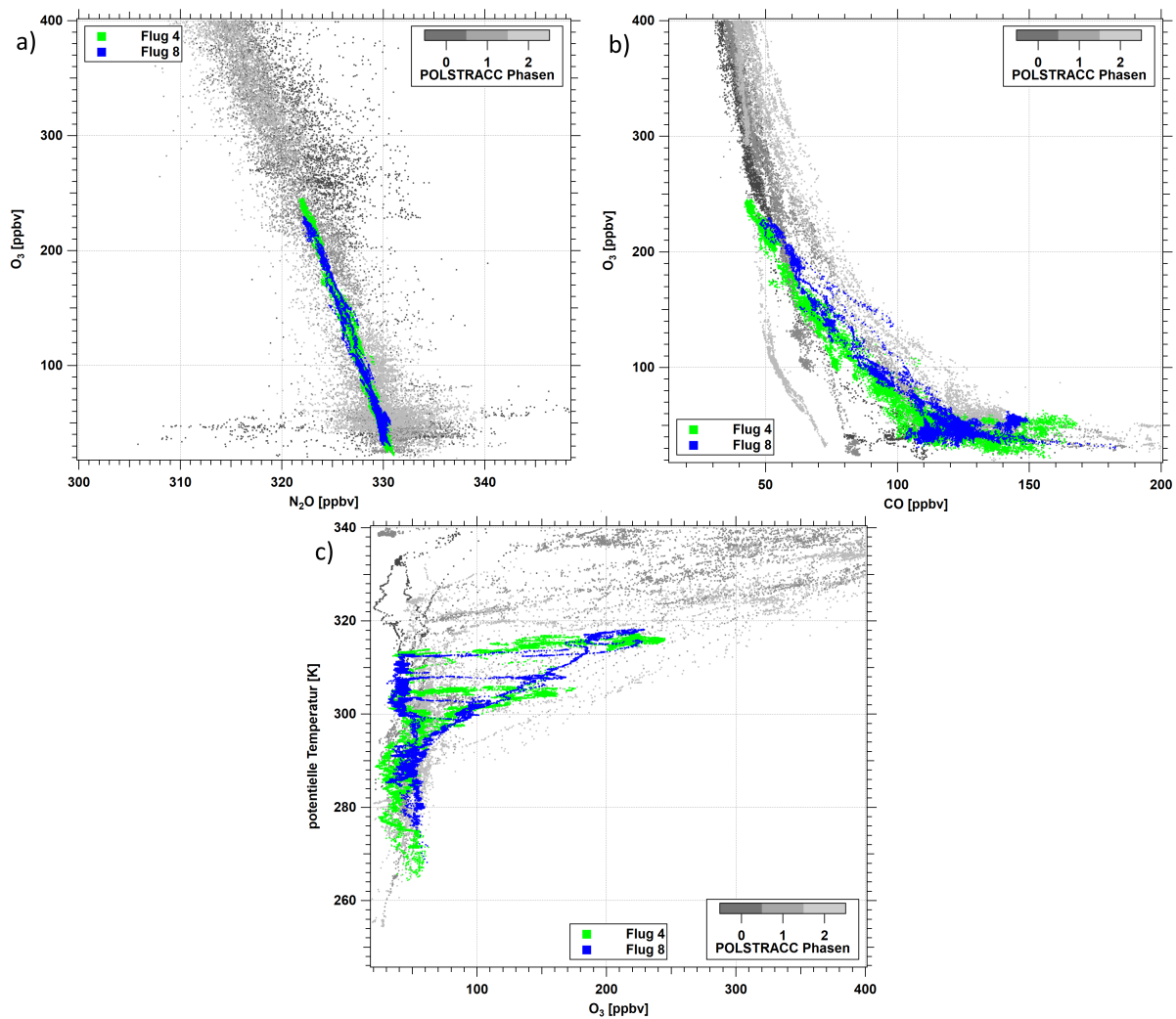


Abbildung 4.3.: O_3 -Korrelationen mit den bearbeiteten Daten. Die Grautöne zeigen die verschiedenen Phasen der POLSTRACC-Kampagne. Bunte Farben stellen die einzelnen Flüge der GW-LCYCLE II Kampagne dar.

Ordnung gefittet. Für das O_3 -Messgerät TE49 wird ein Fehler von 2% und für das N_2O -Messgerät UMAQS ein Fehler von 0,39 ppbv verwendet. Dann werden die Fitparameter der Messung von den Fitparametern des Hintergrunds abgezogen, es wird also die Differenz zwischen beiden gebildet. Diese Differenz wird anschließend auf die vorhandenen

4. Mischung und lokale Spurengasflüsse an einer Tropopausenfalte

O₃-Daten dazu addiert. Bildlich gesprochen werden die gemessenen O₃-Daten auf den Hintergrund gezogen. Das Ergebnis dieses Vorgehens ist in den Plots der Abbildung 4.3 dargestellt. Es ist zu erkennen, dass die Datenpunkt nicht nur bei der O₃-N₂O-Korrelation (4.3a), sondern auch bei der O₃-CO-Korrelation (4.3b) und auf dem O₃-Profil (4.3c) im Bereich der Hintergrundwerte der POLSTRACC-Kampagne liegen.

Überprüfung der Methodik

Um zu testen wie gut die beschriebene Methode grundsätzlich funktioniert und möglicherweise eine grobe Fehlerabschätzung geben zu können, werden die Daten der Messkampagne GW-LCYCLE I verwendet. Dazu werden die gemessenen O₃-Daten künstlich so modifiziert, dass ein ähnliches Muster wie in Abbildung 4.2a entsteht. Um dies zu erreichen werden die originalen Daten mit dem Faktor 0,6 gestaucht und zusätzlich ein Wert von 20 ppbv abgezogen (Versatz).

Anschließend werden die modifizierten Daten nach dem oben beschriebenen Verfahren bearbeitet, bzw. in diesem Fall eher rekonstruiert. Als Hintergrund werden hierbei die unveränderten, originalen O₃- und N₂O-Daten von GW-LCYCLE I verwendet.

Abbildung 4.4 zeigt das Vorgehen anhand der O₃-N₂O-Korrelation noch einmal graphisch.

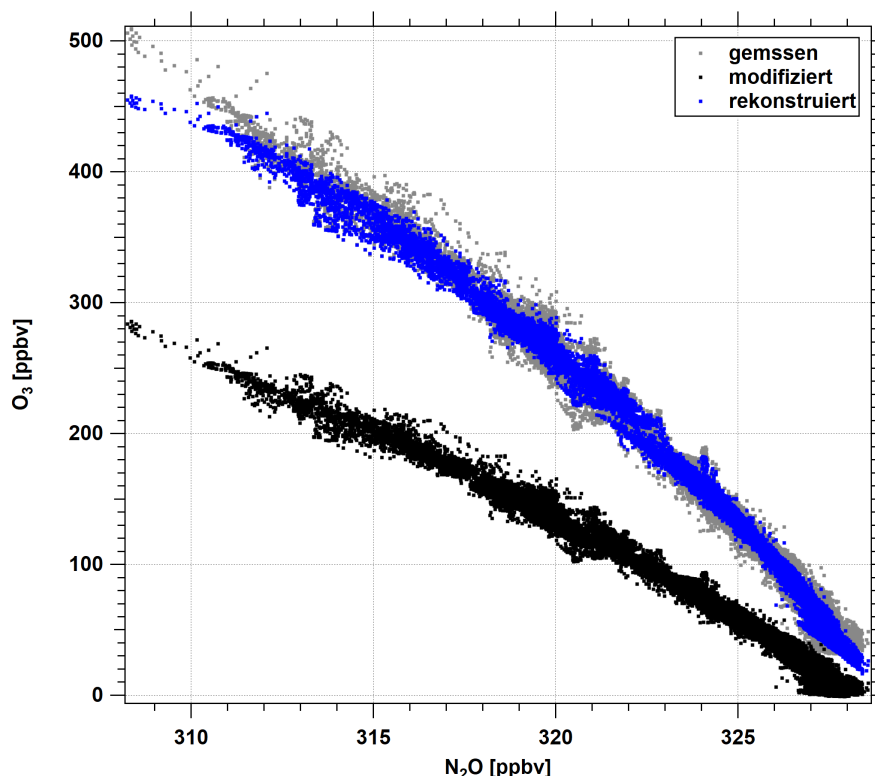


Abbildung 4.4.: O₃-N₂O-Korrelation der GW-LCYCLE I Kampagne. Die grauen Datenpunkte zeigen die originalen Messdaten, schwarze Punkte die modifizierten und blaue Punkte die rekonstruierten Daten.

Die originalen Messdaten, die auch als Hintergrundprofil genommen wurden, sind in grau dargestellt. Aus ihnen wurden die schwarze Punkte künstlich durch die erwähnten Modifikationen erzeugt. Auf diese Daten wurde das Bearbeitungsverfahren angewendet. Das Ergebnis sind die blauen Datenpunkte. Es zeigt sich, dass die gemessenen und bearbeiteten Daten größtenteils gut übereinstimmen.

Um die Unterschiede deutlicher darstellen zu können zeigt Abbildung 4.5 die Zeitreihen

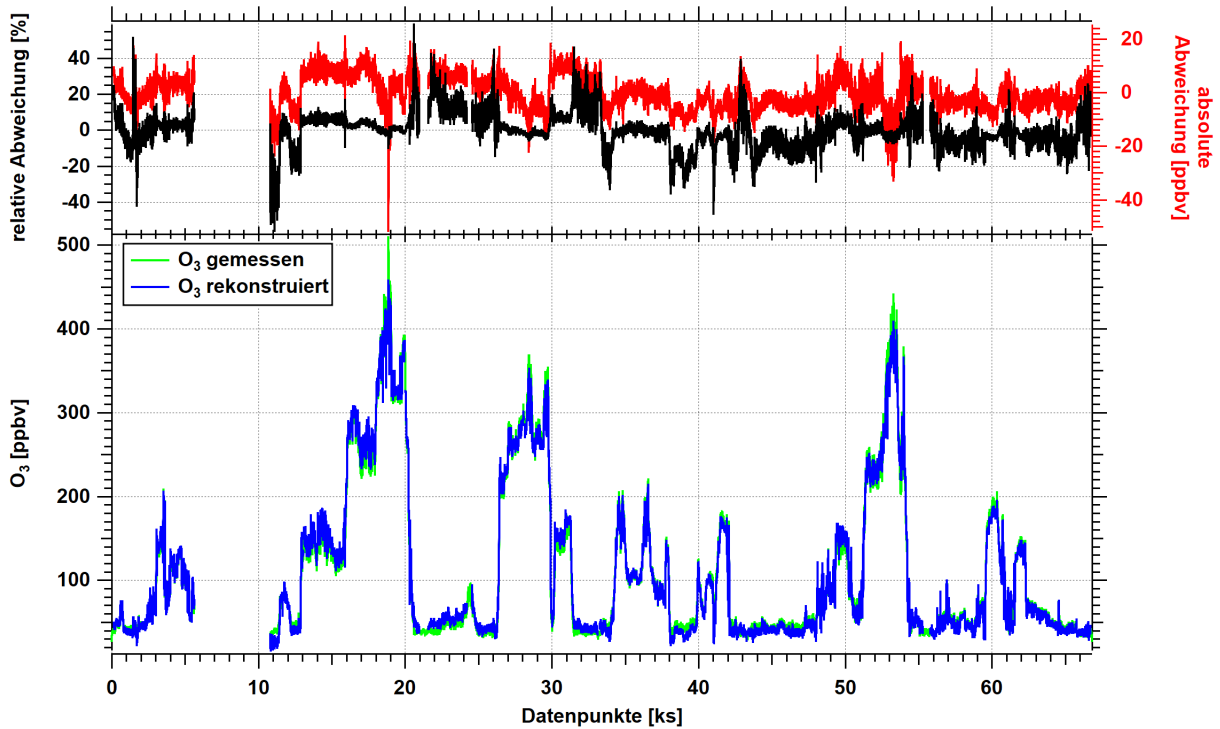


Abbildung 4.5.: Unten: Zeitreihen der gemessenen (grün) und rekonstruierten (blau) O_3 Daten (unten). Oben: Relative (schwarz) und absolute (rot) Abweichung zwischen den Zeitreihen.

der gemessenen (grün) und bearbeiteten, bzw. rekonstruierten (blau) Daten. Der Verlauf beider Reihen stimmt, wie schon die Korrelation gezeigt hat, im Großen und Ganzen sehr gut überein. Es ist außerdem zu erkennen, dass die relativen Abweichung (schwarz) in der Troposphäre (d.h. für O_3 -Mischungsverhältnisse < 100 ppbv) deutlich Größer ist als in der Stratosphäre. Dies liegt vermutlich daran, dass der Zusammenhang von N_2O und O_3 nur in der Stratosphäre annähernd linear ist und in der Troposphäre nicht gilt. Da bei der Bearbeitung aber ein fester Zusammenhang angenommen wurde, ergeben sich in der Troposphäre größere relative Unterschiede. Die größten absoluten Abweichungen von maximal zirka 52 ppbv sind in der Stratosphäre zu finden, treten in dieser Größenordnung allerdings nur lokal auf. Um dies zu verdeutlichen zeigt Abbildung 4.6 die Häufigkeitsverteilung von relativer Abweichung (links) und absoluter Abweichung (rechts). Es ist zu erkennen, dass die Abweichungen bei einem Großteil der Datenpunkte klein sind. In Zahlen ausgedrückt heißt das, dass die relative Abweichung bei 66% der Werte kleiner als 10% ist und dass die absolute Abweichung bei 60% der Werte weniger als 7 ppbv beträgt. Die mittlere Abweichung zwischen den gemessenen und den korrigierten Daten beträgt in dem gezeigten, künstlich erzeugten Beispiel zirka 7%, bzw. 5 ppbv.

Mit Hilfe dieses künstlichen Beispiels aus Daten von GW-LCYCLE I konnte gezeigt werden, dass die vorgestellte Methode zur Bearbeitung funktioniert. Das heißt, wenn Ozondaten vorliegen bei denen die Steigung und der Versatz korrigiert werden müssen, können diese mit der Methode auf einen bekannten Hintergrund korrigiert, bzw. angepasst werden. Für den größten Teil der Datenpunkte liegt der Fehler dabei im akzeptablen Bereich.

4. Mischung und lokale Spurengasflüsse an einer Tropopausenfalte

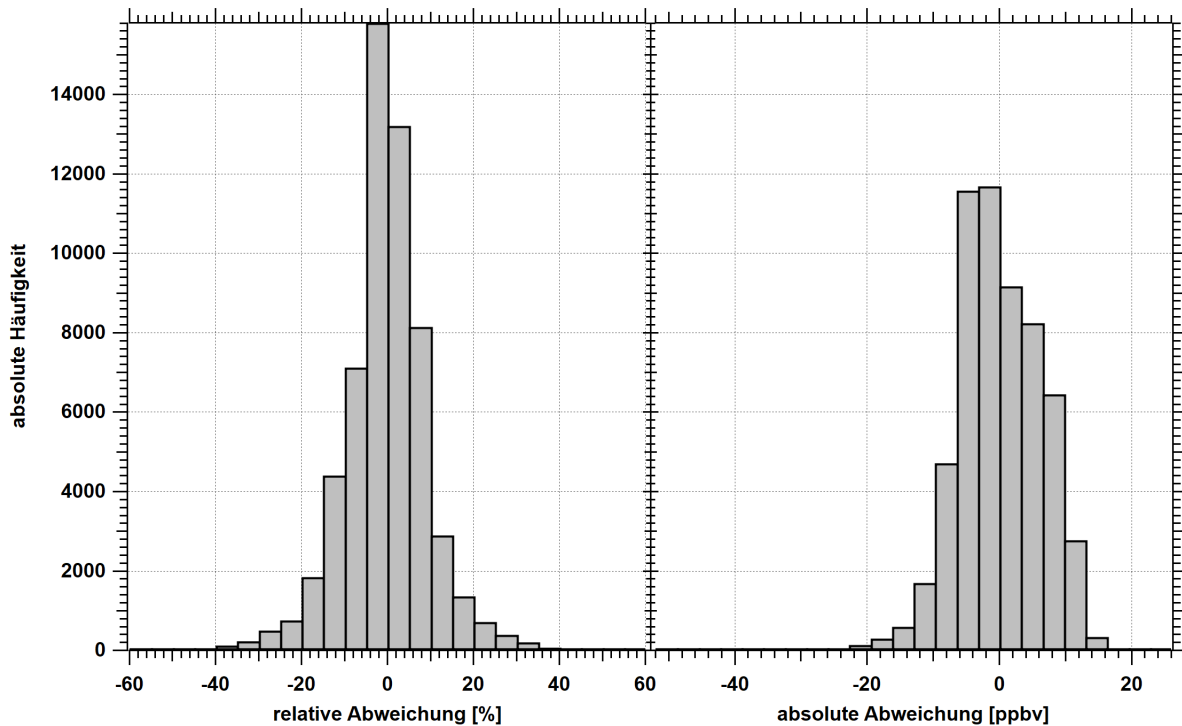


Abbildung 4.6.: Häufigkeitsverteilungen von relativer (links) und absoluter (rechts) Abweichung zwischen gemessenen und rekonstruierten Daten.

Somit können die Daten, zumindest qualitativ, für weitere Analysen, bzw. für die weitere Auswertung genutzt werden.

Um zu testen ob die Bearbeitung auch bei den Daten von GW-LCYCLE II erfolgreich war, zeigt Abbildung 4.7 Häufigkeitsverteilungen der O_3 -Mischungsverhältnisse. Zur Vermeidung von Häufungen bestimmter Mischungsverhältnisse durch horizontale Flugabschnitte, beinhalten die Verteilung nur Auf- und Absteige. Die Verteilungen sollten in der Troposphäre ein Maximum besitzen, da die Mischungsverhältnisse zwischen 15 und 100 ppbv liegen. Durch die Zunahme des Mischungsverhältnisses mit Höhe sind die Datenpunkte in der Stratosphäre gleichmäßig verteilt. Die Häufigkeitsverteilung der originalen Messdaten (blau) zeigt zwar das erwartete Verhalten, allerdings bei zu kleinen Mischungsverhältnissen (Werte zwischen 2 und 110 ppbv). Durch die Bearbeitung (grün), verschiebt sich das Maximum um zirka 25 ppbv nach oben und auch die Form der Verteilung ist wie erwartet. Der Vergleich mit den Hintergrunddaten (schwarz), zeigt eine gute Übereinstimmung. So lässt sich der Übergang zwischen Troposphäre und Stratosphäre bei beiden Verteilungen bei 60 ppbv erkennen, wobei er beim Hintergrund weniger scharf ist. Möglicherweise liegt dies daran, dass Auf- und Abstiege an anderen Orten, bzw. zu anderen Zeiten stattgefunden haben und damit unterschiedlichen atmosphärischen Bedingungen herrschten. Es könnte auch eine Rolle spielen, dass die POLSTRACC-Daten auf einer 10s Basis vorliegen, während sie bei GW-LCYCLE II sekundlich sind. Bei beiden Verteilungen liegen die Mischungsverhältnisse mit der größten Häufigkeit zwischen 30 und 60 ppbv. Die kleineren Unterschiede in der Troposphäre lassen sich ebenfalls durch unterschiedliche atmosphärische Bedingungen (z.B. Luftmassenherkunft) während der Messflüge erklären. Aus dieser generell guten Übereinstimmung lässt sich folgern, dass die Bearbeitung der Ozondaten erfolgreich durchgeführt wurde.

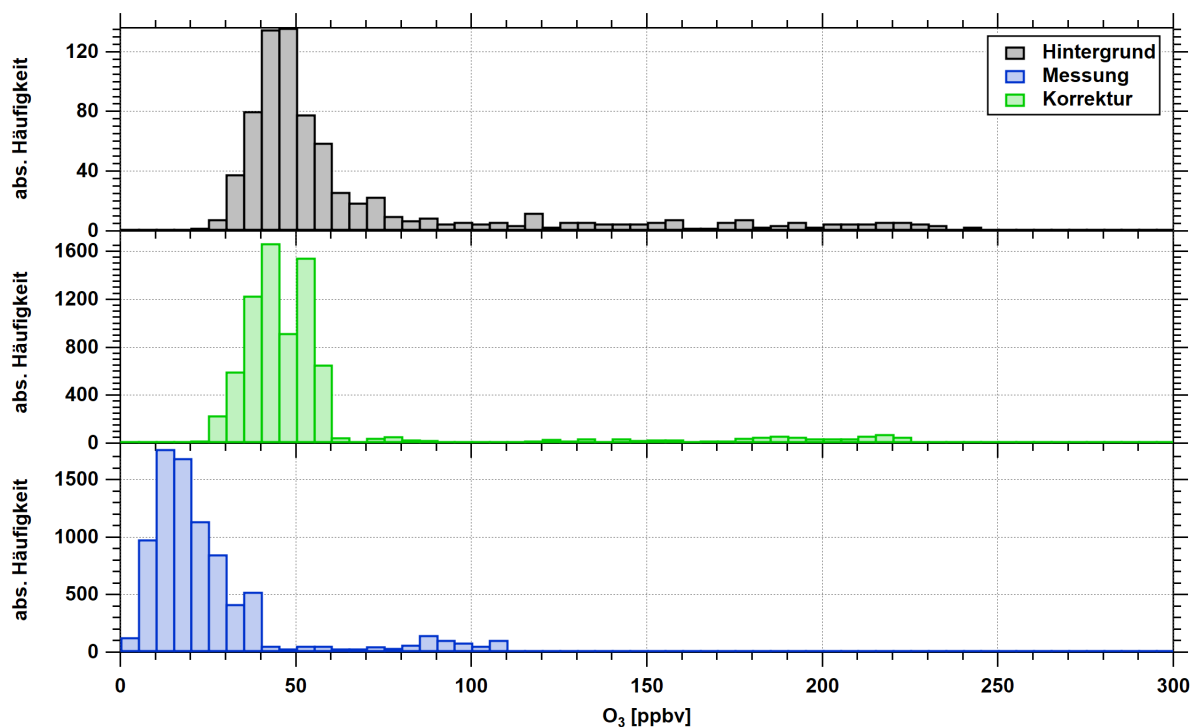


Abbildung 4.7.: Häufigkeitsverteilungen der O_3 -Mischungsverhältnisse der POLSTRACC-Hintergrunddaten (oben), GW-LCYCLE II-Messdaten (unten) und der korrigierten Daten (Mitte). Für die Verteilungen wurden nur Daten während Auf- und Absteigen verwendet.

Bei der Bearbeitungsmethode wird ausgenutzt, dass die O_3/N_2O -Steigung für eine bestimmte Region und zu einer bestimmten Jahreszeit allgemeingültig ist. Da Messflüge von POLSTRACC und GW-LCYCLE II nicht zum exakt gleichen Zeitpunkt und auch nicht am genau gleichen Ort stattgefunden haben, könnte die Methode sonst nicht verwendet werden. Aus der Literatur ist die Steigung außerdem gut bekannt und liegt im Bereich zwischen -18 und -30 . Bei Hegglin und Shepherd (2007) zum Beispiel wird sie aus Satellitenmessungen bestimmt und für den Breitengradbereich $60-90^\circ N$ mit $-22,5 \pm 0,4$ angegeben. Die Steigung der korrigierten Daten liegt mit einem Wert von $-25,82 \pm 0,05$ in der Nähe dieser Angabe, bzw. innerhalb des Intervalls und ist deutlich realistischer als die $-10,8$ bei den nicht-korrigierten Ozonmessungen.

Als Konsequenz der Bearbeitung können die Ozondaten zum Beispiel nicht mehr bei Trendanalysen genutzt werden. Auch bei der Angabe von quantitativen Werten müssen die Unsicherheiten berücksichtigt werden. Da die Fluktuationen und damit die Variabilität der Messungen erhalten bleiben, können die Ozondaten nach der Bearbeitung als Vertreter für Variabilität, Varianz und Flüsse dienen.

4.2. Wetterbedingungen und Flugübersicht

Die Ziele von Messflug 8 der GW-LCYCLE II-Kampagne, der im Folgenden näher untersucht wird, waren die Messung der Zusammensetzung einer Tropopausenfalte (troposphärischer Beitrag in stratosphärischer Luft innerhalb der Tropopausenfalte), die Loka-

4. Mischung und lokale Spurengasflüsse an einer Tropopausenfalte

lisierung von stratosphärischen Spurengasen in troposphärischer Umgebung, die Identifizierung von Regionen die möglicherweise Turbulenz erzeugen und mögliche Verbindungen von stratosphärischer Luft mit der planetaren Grenzschicht zu detektieren.

Abbildung 4.8 zeigt den Flugweg von Messflug 8 und die potentielle Wirbelstärke auf der 310 K Isentrope. Für die folgenden Analysen sind besonders die nördlichen Flugabschnitte, die parallel zur norwegischen Küste geflogen wurden, von Interesse. Anhand der potentiellen Wirbelstärke wird deutlich, dass dort ein starker isentroper PV-Gradient durchflogen wurde, der quer zum Flugweg lag. Dabei sind troposphärische Bereiche durch rote Flächen ($PV < 2$ pvu) und stratosphärische Bereiche durch blaue Bereiche ($PV > 2$ pvu) gekennzeichnet. Der Wind weht entlang des Gradienten von Nordwest nach Südost und erreicht auf dieser Fläche im Modell Geschwindigkeiten bis 31 m s^{-1} . Dies stimmt gut mit der gemessenen horizontalen Windgeschwindigkeit überein.

In Abbildung 4.9 ist ein Vertikalschnitt der potentiellen Wirbelstärke entlang der nördlichen Flugabschnitte dargestellt. Damit kann die Tropopausenfalte gut identifiziert werden. Es ist zu erkennen, dass der Flugweg so geplant wurde, dass die Falte auf sechs verschiedenen Flughöhen durchflogen wurde. Diese horizontalen Flächen liegen auf 10400 m, 9100 m, 7900 m, 6700 m, 5500 m und 4600 m. Die graue Fläche im unteren Teil der Abbildung zeigt die Topographie. Auf dem Querschnitt sind keine großen Erhebungen zu erkennen. Wie die Karte in Abbildung 4.8 zeigt, lag ein großer Teil der nördlichen Flugabschnitte über Wasser. Da die Flugabschnitte darüber hinaus auch auf der Luvseite des skandinavischen Gebirges liegen, ist ein orographischer Einfluss auf die Falte unwahrscheinlich.

Abbildung 4.10 zeigt die Zeitreihen verschiedener wichtiger Größen des Messflugs. Die grauen Kästen markieren die horizontalen Flugabschnitte bei denen die Tropopausenfalte durchflogen wurde. Im unteren Teil der Abbildung sind die Spurengase CO (hellblau), O_3 (dunkelblau) und N_2O (grün) dargestellt. Der Verlauf ist bei allen Größen sehr ähnlich, allerdings im Falle von O_3 aufgrund der Zunahme in der Stratosphäre, umgekehrt zu N_2O und CO . Dabei kann das in der Troposphäre homogen verteilte N_2O -Mischungsverhältnis als Größe zur Unterscheidung von troposphärischen und stratosphärischen Flugabschnitten verwendet werden. Aus der Zeitreihe lässt sich dieser Grenzwert, bzw. die chemische

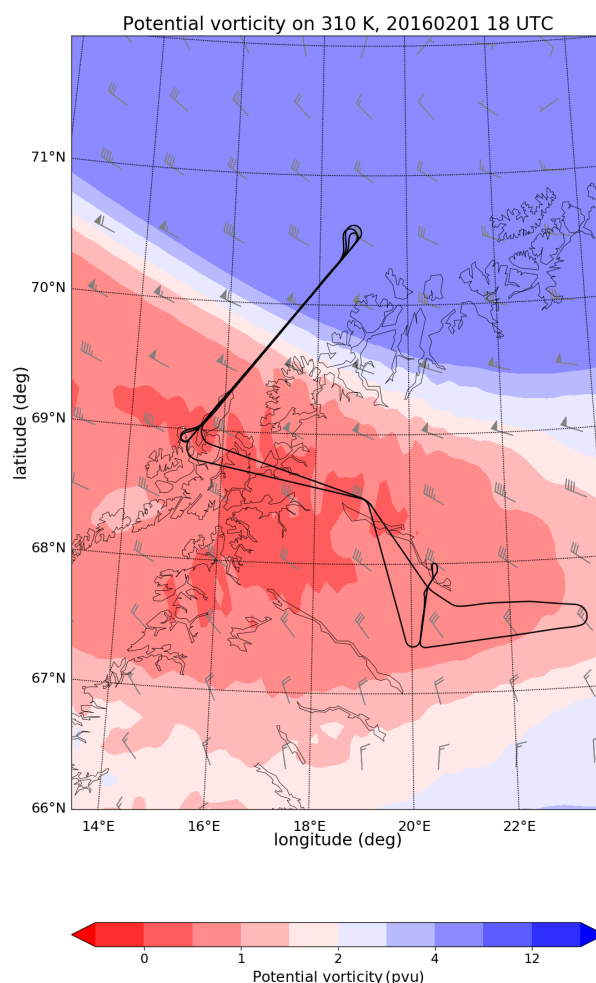


Abbildung 4.8.: Horizontalschnitt der potentiellen Wirbelstärke auf der 310 K Isentropen um 18 UTC. Die schwarze Linie zeigt den Flugpfad von Flug 8 und die Windpfeile sind grau (in Knoten).

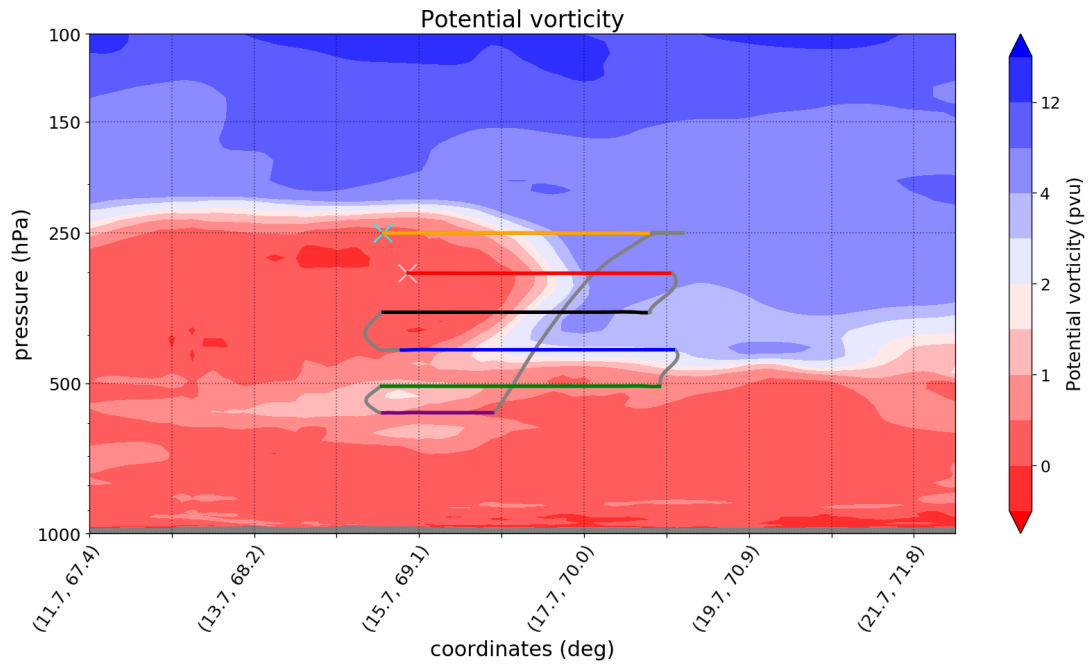


Abbildung 4.9.: Querschnitt der potentiellen Wirbelstärke entlang der nördlichen Flugabschnitte. Horizontale Flugabschnitte sind farblich hervorgehoben. Das rosafarbene und das zyanfarbene Kreuz markieren den Anfang, bzw. das Ende der nördlichen Flugabschnitte.

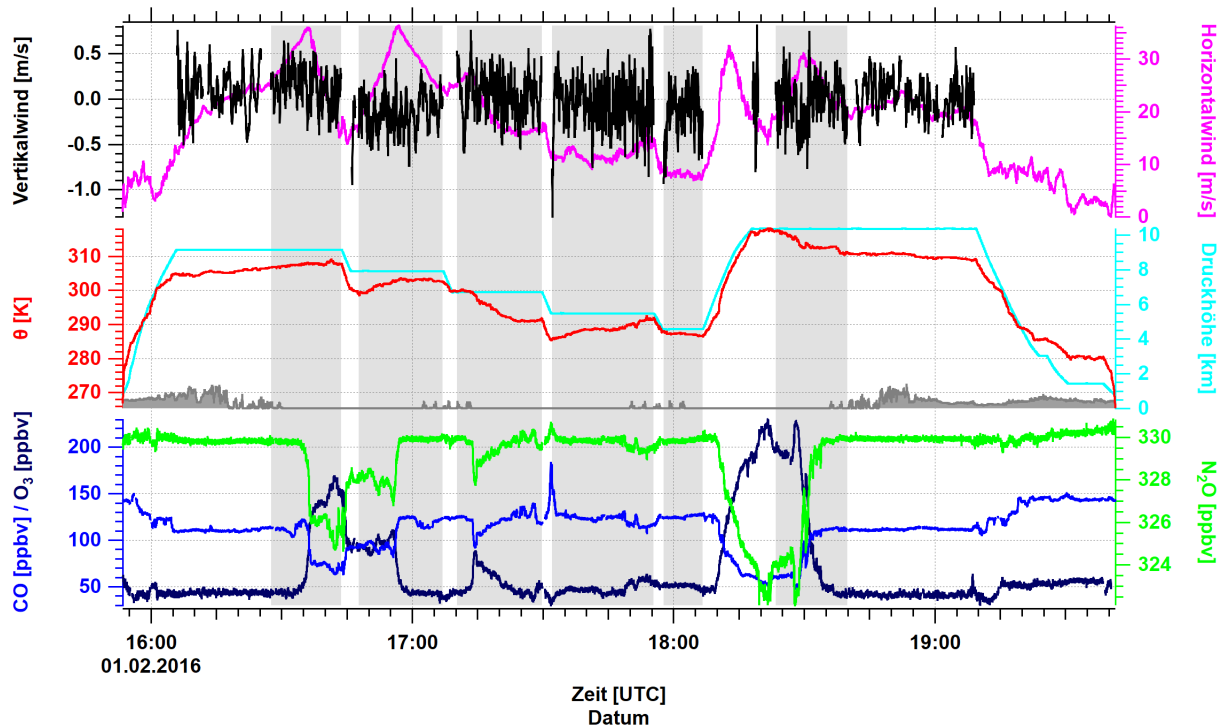


Abbildung 4.10.: Zeitreihen des Messflugs. Oben: vertikale (magenta) und horizontale (schwarz) Windgeschwindigkeit. Mitte: potentielle Temperatur (rot), Topographie (grau; aus SRTM15+-Daten interpoliert (Tozer et al., 2019); in km) und Druckhöhe (türkis). Unten: CO- (hellblau), O₃- (dunkelblau) und N₂O-Mischungsverhältnisse (grün). Der grau schattierten Bereiche markieren die horizontalen Flugabschnitte an der Tropopausenfalte.

4. Mischung und lokale Spurengasflüsse an einer Tropopausenfalte

Tropopause (Abschnitt 1.1.1) von N_2O , auf ungefähr $329,6 \pm 0,1$ ppbv abschätzen, wobei größere Mischungsverhältnisse in der Troposphäre und kleinere Werte in der Stratosphäre liegen.

Für die Berechnung der chemischen Tropopause wurden nur Daten vor 16:28 UTC und nach 18:40 UTC verwendet. Diese liegen außerhalb der Faltenregion und innerhalb der Troposphäre. Der Mittelwert dieser Abschnitte liegt bei 329,94 ppbv und die Standardabweichung bei 0,17 ppbv. Für die Troposphäre ergibt sich damit ein Wert von $329,94 \pm 0,34$ ppbv. Der Grenzwert für die N_2O -basierte chemische Tropopause hat daher ein Mischungsverhältnis von 329,60 ppbv. Das CO -Mischungsverhältnis an der chemischen Tropopause beträgt im Mittel $119,1 \pm 5,4$ ppbv und das O_3 -Mischungsverhältnis $51,1 \pm 4,1$ ppbv. Auf allen sechs Flugflächen können damit sowohl troposphärische, als auch stratosphärische Werte identifiziert werden. Diese liegen auf den unteren beiden Abschnitten jedoch sehr nahe zusammen, d.h. die N_2O -Mischungsverhältnisse sind nur minimal im stratosphärischen Bereich.

Der mittlere Teil der Abbildung zeigt die potentielle Temperatur (rot), die Druckhöhe (türkis) und die Topographie (grau). Im Verlauf der potentiellen Temperatur sind keine großen Fluktuationen und Wellen zu erkennen. Allerdings ändert sich die potentielle Temperatur auf manchen horizontalen Flugabschnitten um mehr als 7 K.

Im oberen Teil der Abbildung sind die horizontale (magenta) und die vertikale (schwarz) Windgeschwindigkeit dargestellt. Die vertikale Windgeschwindigkeit ist mit Werten, die sich zum großen Teil im Bereich zwischen $\pm 0,5 \text{ m s}^{-1}$ bewegen eher gering, zumindest im Vergleich zu hohen vertikalen Windgeschwindigkeiten, die z.B. im Bereich orographischer Wellen auftreten (vgl. Abbildung 3.7, oder Abbildung 5.9). Im Gegensatz zu diesen Flügen sind in dieser Zeitreihe keine Wellenstrukturen zu beobachten. Die horizontale Windgeschwindigkeit liegt zwischen 10 m s^{-1} und 36 m s^{-1} und stimmt damit mit den Modellwerten in Abbildung 4.8 gut überein. Das Windmaximum befindet sich im troposphärischen Teil der Falte und gehört zu einem lokalen Teil des Polarfront-Strahlstroms an der Südseite eines Tiefdruckgebietes.

Auffällig ist außerdem, dass die stratosphärischen Werte, d.h. die Datenpunkte mit den niedrigsten N_2O -Mischungsverhältnissen, bei drei Flughöhen (um 18:28 UTC, um 16:56 UTC und um 17:14 UTC) direkt am Übergang zwischen Troposphäre und Stratosphäre zu finden sind. Dies könnte ein Hinweis auf eine Abwärtsbewegung, also auf einen Transport nach unten sein. Auf der obersten und dritten Flugfläche ist zudem die vertikale Windgeschwindigkeit (zumindest im Mittel) negativ und damit ebenfalls nach unten gerichtet.

4.2.1. Entwicklung der Tropopausenfalte

In diesem Abschnitt werden ERA5-Daten (Abschnitt 2.3.1) zur Analyse der Tropopausenfalte verwendet. Diese stehen mit einer zeitlichen Auflösung von 1 Stunde zur Verfügung, womit zeitliche Veränderungen besser beobachtet werden können, als mit 6 Stunden aufgelösten ECMWF IFS-Feldern.

Um Indikatoren für das Auftreten von Instabilität und Turbulenz in den Reanalysedaten zu bestimmen und damit potentielle Bereiche, in denen es zu Austauschprozessen gekommen sein könnte, zu identifizieren werden die vertikale Windscherung des Horizontalwindes (Abschnitt 1.3.2) und die Richardson-Zahl (Abschnitt 1.3.3) verwendet.

Abbildung 4.11 zeigt die zeitliche Entwicklung der Falte im Querschnitt. Um deutlich zu

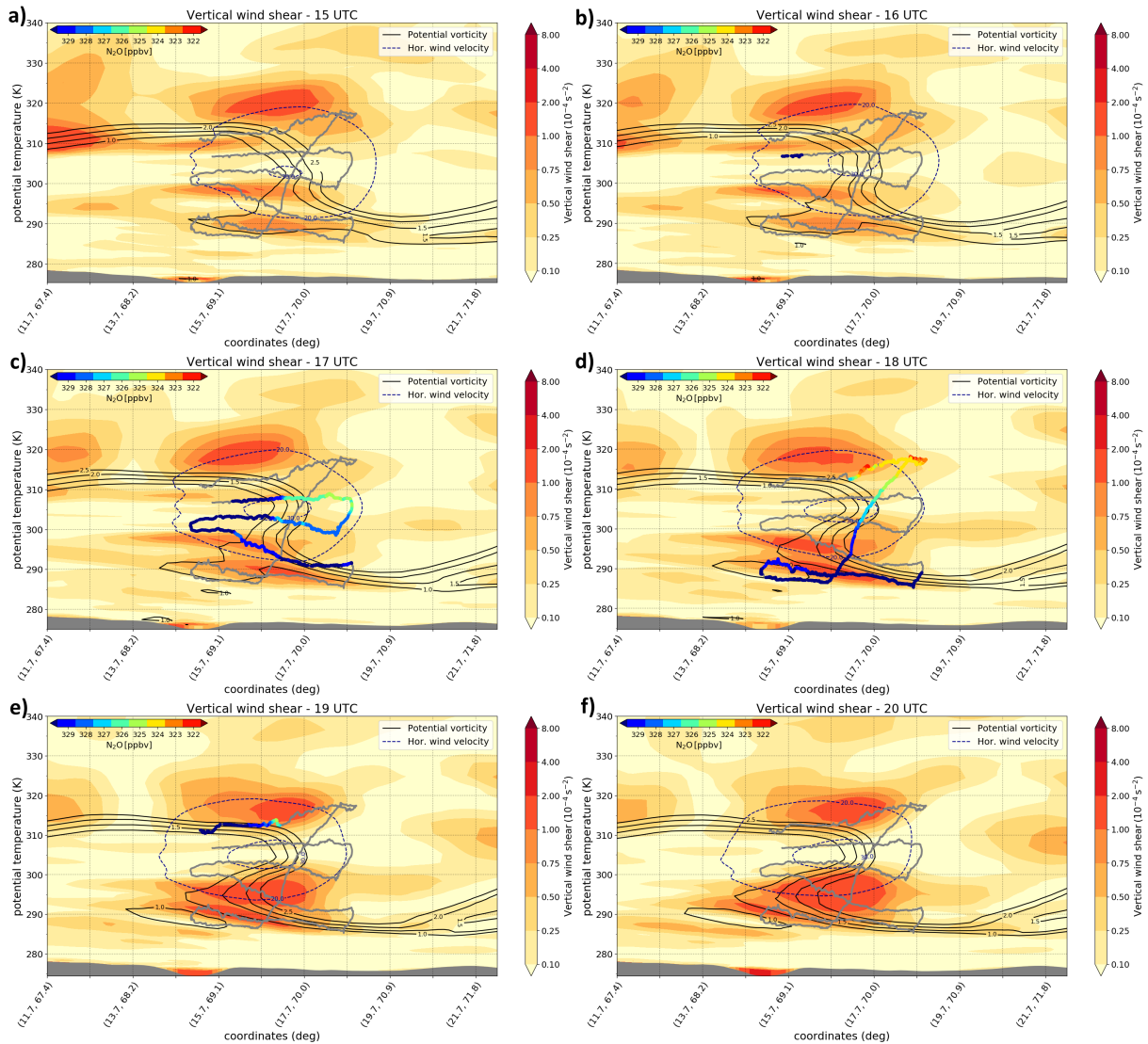


Abbildung 4.11.: Zeitliche Entwicklung der Tropopausenfalte zwischen 15 und 20 UTC aus ERA5-Daten. Die Farbskala zeigt die vertikale Windscherung des Horizontalwinds, die schwarzen Linien Konturen der potentiellen Wirbelstärke (1, 1,5, 2 und 2,5 pvu), dunkelblaue Linien Konturen der horizontalen Windgeschwindigkeit (20 und 30 m s^{-1}). Der Flugweg ist grau abgebildet und mit dem N_2O -Mischungsverhältnis eingefärbt (dunkelblaue Farben: troposphärische Werte; restliche Farben: stratosphärische Werte).

machen zu welchem Zeitpunkt welcher Flugabschnitt stattgefunden hat, ist in den Abbildungen jeweils nur der entsprechende Zeitraum farblich hervorgehoben, der Rest ist grau. So zeigt zum Beispiel das Bild um 18 UTC (Abbildung 4.11d) den Flugweg von 17:30 UTC bis 18:30 UTC. Zur Vervollständigung zeigen die Bilder um 15 UTC und 20 UTC die Bedingungen vor und nach dem Flug. Die Tropopausenfalte hat die Form von einem vertikal gespiegelten „S“, die es auch über den betrachteten Zeitraum beibehält. Anhand der PV-Konturen ist zu beobachten, dass der obere Teil der Falte über den Messzeitraum ziemlich stationär bleibt. Im Gegensatz dazu vertieft sich, bzw. verstärkt sich der untere Teil der Falte. Die S-Form wird also ausgeprägter und dementsprechend verstärken sich die vertikalen Gradienten. Die Position und die Stärke der horizontalen Windgeschwin-

4. Mischung und lokale Spurengasflüsse an einer Tropopausenfalte

digkeit verändert sich, wie die Konturen zeigen, nur leicht. Es ist also keine signifikante Änderung der Windgeschwindigkeit zu erwarten. Deutliche Veränderungen sind dennoch bei der vertikalen Windscherung des Horizontalwindes zu beobachten. Während die Scherung am oberen Teil der Tropopausenfalte, d.h. über dem Windmaximum konstant bleibt, oder teilweise sogar geringer wird, verstärkt sie sich im unteren Teil, also unter dem Windmaximum. Außerdem ist zu beobachten, dass es auf jeder Flughöhe Abschnitte gibt, die in Regionen mit erhöhter Scherung liegen. In diesen Regionen könnte es Instabilitäten gegeben haben.

Aufgrund des Zusammenhangs mit der Scherung (Formel (1.7)) ergibt sich für die Richard-

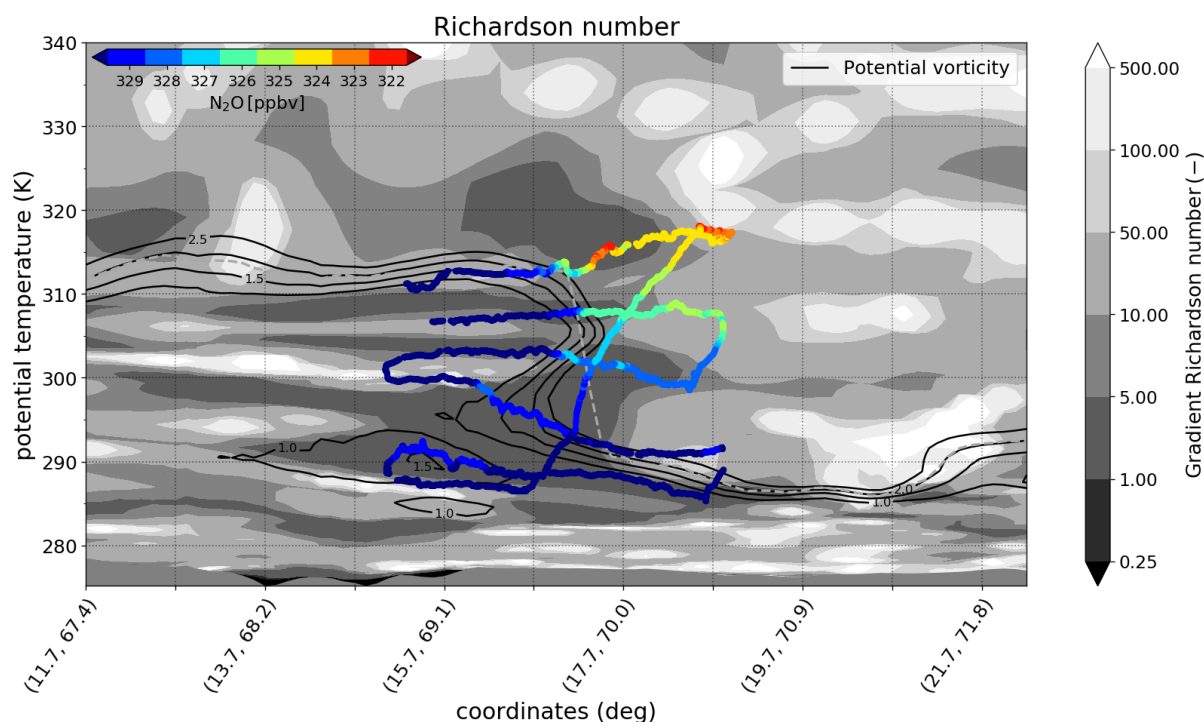


Abbildung 4.12.: Vertikalschnitt der Richardson-Zahl entlang des Flugwegs um 18 UTC. Schwarze Linien zeigen die Konturen der potentiellen Wirbelstärke. Der Flugweg (bunt) wurde mit dem N_2O -Mischungsverhältnis eingefärbt (dunkelblaue Farben: troposphärische Werte; restliche Farben: stratosphärische Werte).

son-Zahl ein ganz ähnliches Bild. Als Beispiel zeigt Abbildung 4.12 den Querschnitt der Richardson-Zahl um 18 UTC. Im Gegensatz zu den Querschnitten in Abbildung 4.11 liegt der Fokus bei dieser Abbildung auf einer möglichst hohen räumlichen Auflösung und nicht bei der zeitlichen Komponente. Daher wurden hier wieder die ECMWF IFS-Analysedaten mit einer horizontalen Auflösung von $0,125^\circ$ verwendet (siehe Abschnitt 2.3.3). Im Bereich der Tropopausenfalte sind mehrere lokale Minima der Richardson-Zahl zu erkennen, die während des Fluges auch durchflogen wurden. Diese decken sich mit Bereichen mit erhöhter Windscherung (Vergleich mit Abbildung 4.11d). Entlang des Flugwegs treten die Minima der Richardson-Zahl und damit möglicherweise instabile Bereiche, teilweise in Abschnitten auf, in denen das N_2O -Mischungsverhältnis (Farbskala) Übergänge zwischen Troposphäre und Stratosphäre andeutet. Allerdings erreicht die Richardson-Zahl entlang des Flugwegs nur Werte bis minimal 1,6 und ist damit deutlich über dem theoretischen Wert für dynamische Instabilität von 0,25. Davon abgesehen gibt es Studien

die zeigen, dass Turbulenz auch bei Richardson-Zahlen > 1 existieren können (z.B. Galperin et al. (2007)). Da im Modell kleinskalige, turbulente Prozesse möglicherweise nicht richtig aufgelöst werden, können womöglich auch größere Richardson-Zahlen auf dynamische Instabilität hindeuten. Um dies zu untersuchen wird in Abschnitt 4.2.2 ein Vergleich von Mess- und Modelldaten gezeigt.

Auf den Abbildungen 4.11 und 4.12 wurde der Flugweg mit dem N_2O -Mischungsverhältnis eingefärbt. Dabei repräsentieren die dunkelblauen Farben Mischungsverhältnisse über dem troposphärischen Wert von N_2O und die restlichen Farben stratosphärische Werte. Der Vergleich dieser Farbkodierung und damit der chemischen Tropopause von N_2O mit der 2 pvu-Kontur, die als Definition der dynamischen Tropopause genutzt wird und aus dem Modell berechnet wurde, macht deutlich, dass beide Definitionen teilweise ziemlich große Unterschiede aufweisen. Ein Grund dafür ist mit Sicherheit, dass die räumliche und zeitliche Auflösung des Modells keine exakte Positionierung der Tropopause zulässt. Möglich ist aber auch, dass sich zum einen das N_2O -Mischungsverhältnis aufgrund von Mischungsprozessen an der Tropopausenfalte verändert hat, oder zum anderen, dass sich die Lage der Falte geändert hat.

Zur Verdeutlichung zeigt Abbildung 4.13 die Unterschiede zwischen chemischer und dy-

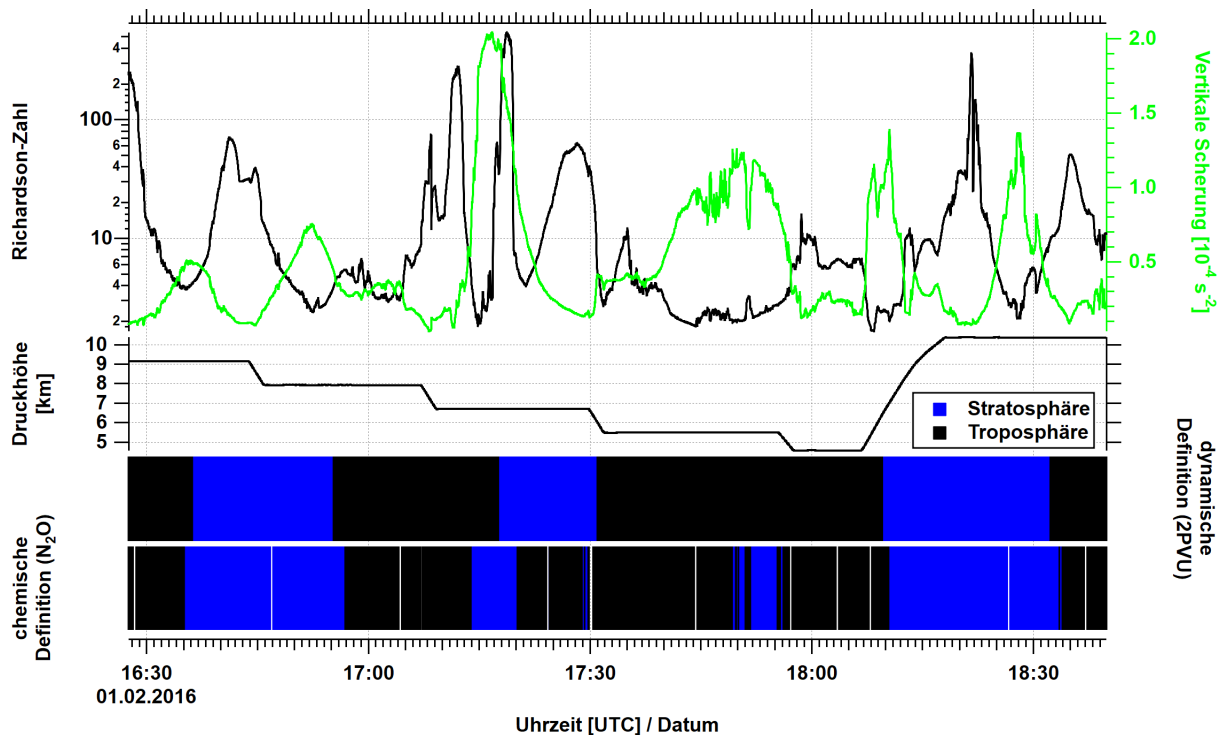


Abbildung 4.13.: Oben: Richardson-Zahl (schwarze) und Scherung (grün). Mitte: Druckhöhe. Unten: schwarze Bereiche zeigen troposphärische und blaue Bereiche stratosphärische Flugabschnitte. Unterteilung mit dynamischer (2 pvu) und chemischer (329,6 ppbv N_2O) Tropopausendefinition.

namischer Tropopause noch einmal anhand der Zeitreihen auf. Es ist zu sehen, dass die Unterschiede an ein paar Stellen (z.B. zwischen 17:15 und 17:20 UCT) in Bereichen mit erhöhter Windscherung, bzw. niedriger Richardson-Zahl auftreten. Möglicherweise haben die damit verbundenen Instabilitäten in diesen Bereichen zu Mischungsprozessen geführt, die das N_2O -Mischungsverhältnis verändert haben. Für die Berechnung von PV,

4. Mischung und lokale Spurengasflüsse an einer Tropopausenfalte

Richardson-Zahl und Windscherung wurden in dieser Abbildung wiederum die ECMWF IFS-Analysedaten verwendet. Aufgrund der höheren räumlichen Auflösungen stimmen diese etwas besser mit den Messdaten überein.

4.2.2. Vergleich der atmosphärischen Stabilität von Messungen und Modell

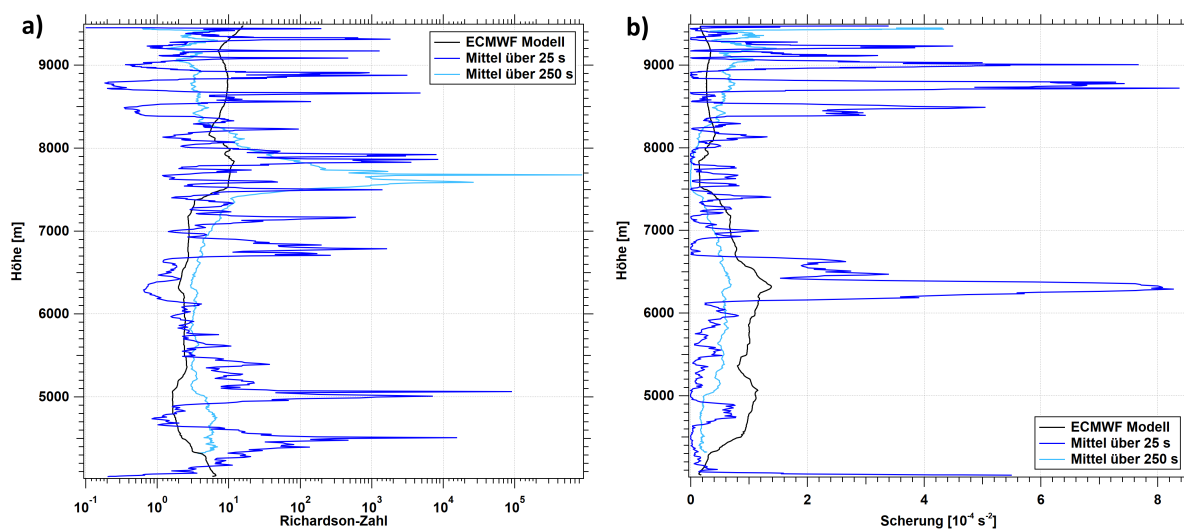


Abbildung 4.14.: Vertikalprofile a) der Richardson-Zahl und b) der Windscherung (rechts). Für den Aufstieg an der Falte zeigen die schwarze Kurven auf den Flugweg interpolierte Modelldaten und blaue Kurven aus den Messungen berechnete und über 25, bzw. 250 Sekunden gemittelte Werte.

Wie im vorigen Abschnitt 4.2.1 beschrieben wurde, sind die aus dem ECMWF-Modell berechneten Richardson-Zahlen mit einem Minimum von 1,6 laut Definition zu groß für dynamische Instabilität (siehe Abschnitt 1.3.3). Daher werden in diesem Abschnitt die Modellparameter, die auf den Flugweg interpoliert wurden, mit den aus den Messdaten berechneten Größen verglichen, um zu untersuchen inwieweit diese übereinstimmen und ob Instabilitäten auf kleineren Skalen, als das Modell auflösen kann, beobachtet wurden. Für die Berechnung von Richardson-Zahl und Windscherung aus den Messdaten können allerdings nur Steig-, bzw. Sinkflüge verwendet werden. Die in Abbildung 4.14 gezeigten Daten beziehen sich deshalb auf den Steigflug zwischen 18:07 UTC und 18:19 UTC (siehe Abbildung 4.10). Zur Entfernung kleinskaliger Fluktuationen wird ein gleitendes Mittel über 25 und 250 Sekunden genutzt. Bei einer mittleren Steigrate von 8 m s^{-1} , entspricht dies einer Höhenmittelung über 200 und 2000 Meter.

Die Graphen in Abbildung 4.14 zeigen die Richardson-Zahl und die Windscherung aufgetragen gegen die Höhe. Die Unterschiede zwischen den Modelldaten (schwarz) und Messungen (dunkelblau) sind erwartungsgemäß aufgrund der groben räumlichen und zeitlichen Auflösung des Modells offensichtlich erkennbar. Bereiche mit erhöhter Windscherung (Abbildung 4.14a) liegen vor allem zwischen 6,1 und 6,7 km, sowie oberhalb von 8,3 km, also oberhalb und unterhalb des Maximums der horizontalen Windgeschwindigkeit. In diesen Höhenbereichen ist die Richardson-Zahl (Abbildung 4.14b) aus den Messungen über

längere Abschnitte kleiner als 1 und bei ungefähr 8,75 km auch kleiner als 0,25. Durch die Verwendung eines kleineren (< 25 s) gleitenden Mittels, bzw. ohne gleitendes Mittel, sind lokal auch häufig kleinere Höhenbereiche zu identifizieren, bei denen die Richardson-Zahl kleiner als 0,25 ist. Wird ein größeres gleitendes Mittel, in diesem Fall 250 s (bzw. 2 km) genommen, zeigt sich, dass der Verlauf von Messung (hellblau) und Modell zwischen 5,3 und 8,2 km ähnlich ist. Für die Vertikalprofile der vier Sinkflüge im Bereich der Tropopausenfalte ergibt sich ein ganz ähnliches Bild.

Der Vergleich der Messdaten mit den Modelldaten zeigt also, dass das Modell die Messungen in einigen Bereichen gut widerspiegelt, vor allem bei einem Mittel von 250 s. Besonders lokal und auf kleinen Skalen ergeben sich jedoch auch große Unterschiede. Die Ergebnisse legen damit nahe, dass es in diesem Fall an der Tropopausenfalte durchaus dynamisch instabile Schichten gegeben hat, auch wenn die Richardson-Zahl des Modells über dem kritischen Wert liegt.

4.3. Mischungslinien der Spurengaskorrelationen

Zur Untersuchung des Messfluges auf mögliche Mischungsereignisse, werden in diesem Abschnitt Spurengaskorrelationen untersucht (Abschnitt 1.4.1). Dazu stehen die Spurengase N_2O , CO und O_3 zur Verfügung.

Abbildung 4.15 zeigt die N_2O -CO-Korrelation. Die einzelnen horizontalen Flugflächen an der Tropopausenfalte sind in unterschiedlichen Farben dargestellt. Auf mehreren Flughöhen lassen sich Mischungslinien erkennen, die troposphärische Luftmassen und stratosphärische Luftmassen verbinden. Da der Unterschied von stratosphärischen zu troposphärischen Werten, aufgrund der N_2O -Abnahme mit der Höhe, auf der obersten Flugfläche (orange) am größten ist, ist die Mischungslinie hier am deutlichsten. Auch auf der zweiten (rot), dritten (schwarz) und vierten (blau) Flugfläche sind ebenfalls Mischungslinien in der N_2O -CO Korrelation vorhanden und zu erkennen. Mögliche Mischungslinien auf der fünften (grün) und sechsten (lila) Flughöhe sind auf der Abbildung nicht mehr zu identifizieren. Der PV-Querschnitt in Abbildung 4.9 zeigt, dass auf den oberen vier Flugflächen die dynamische (2 pvu) Tropopause durchflogen wurde. Demnach zeigt die Korrelation, dass es auf verschiedenen Höhen zu irreversibler Mischung und damit Austausch von Luftmassen aus dem troposphärischen und dem stratosphärischen Teil der Falte gekommen ist.

Außerdem ist zu erkennen, dass sich die troposphärischen CO-Mischungsverhältnisse der Mischungslinien unterscheiden. Auf der obersten Flugfläche beträgt das CO-Mischungsverhältnis ungefähr 111 ppbv und auf den darunter liegenden Höhen zirka 122 ppbv. Folglich fand die Mischung auf dem obersten Flugabschnitt mit einer anderen troposphärischen Luftmasse statt, als auf den anderen Höhen. Bei den unteren Flugabschnitten ist die Mischungslinie aufgrund der geringen Unterschiede zwischen troposphärischen und stratosphärischen Werten nur ansatzweise erkennbar.

Abbildung 4.16 zeigt die O_3 -CO-Korrelation. Aufgrund des stärkeren O_3 -Gradienten in der Stratosphäre können die Mischungslinien damit besser identifiziert, als mit N_2O . Aufgrund des Zusammenhangs zwischen O_3 und N_2O (Abbildung 4.3a), zeigt die Abbildung allgemein ein ganz ähnliches Bild. Wie bei der N_2O -CO-Korrelation ist die Mischungslinie auf der obersten Flugfläche die deutlichste. Auffällig ist jedoch, dass die Linien der einzel-

4. Mischung und lokale Spurengasflüsse an einer Tropopausenfalte

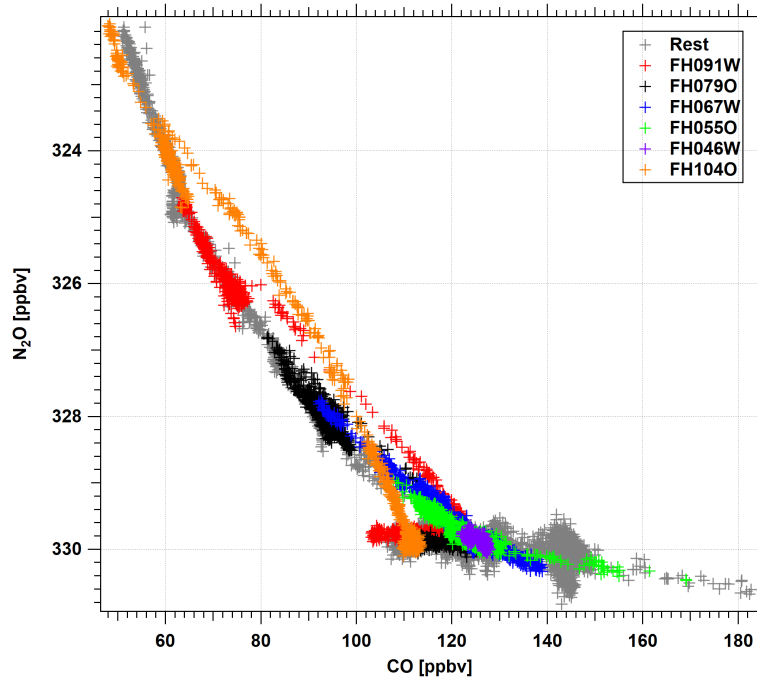


Abbildung 4.15.: N₂O-CO-Korrelation von Flug 8. Horizontale Flugabschnitte sind nach Farben unterschieden und entsprechen Abbildung 4.9. In Anlehnung an die Angabe der Flugflächen (englisch „flight level”, kurz FL) in der Fliegerei, bezeichnet die Abkürzung in der Legende die Flughöhe (FH) in Metern geteilt durch 100 und die ungefähre Flugrichtung an. Zur einfacheren Vergleichbarkeit mit Abbildung 4.16 wurde die y-Achse invertiert.

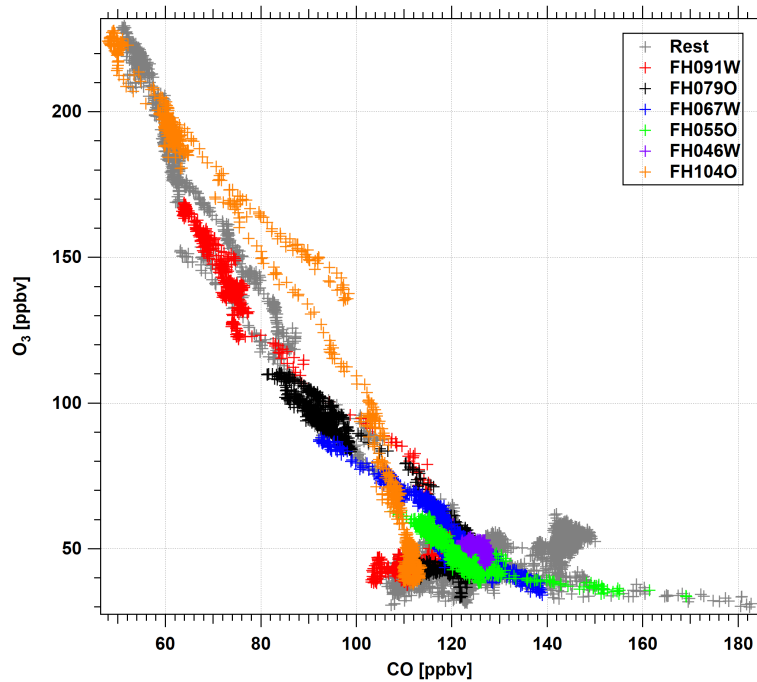


Abbildung 4.16.: O₃-CO-Korrelation von Flug 8. Horizontale Flugabschnitte sind nach Farben unterschieden.

nen Flugabschnitte weniger kompakt sind, als bei der N_2O -CO-Korrelation. So sind auf der oberen Flugfläche (orange) zwei annähernd parallele Mischungslinien (zwischen 130 und 180 ppbv O_3 , bzw. zwischen 70 und 100 ppbv CO) zu sehen, die es bei N_2O -CO-Korrelation nicht gibt, bzw. die nicht zu erkennen sind. Möglicherweise fand die Mischung auf dem obersten Flugabschnitt also nicht nur zwischen 2, sondern mehreren Luftmassen statt, die chemisch unterschiedlich stark prozessiert wurden, da nur das chemisch reaktive Ozon diese Differenzierung zeigt. Für diese These könnte sprechen, dass sich innerhalb von 8 s an dieser Stelle nicht nur das O_3 -Mischungsverhältnis um 22,7 ppbv, sondern auch die potentielle Temperatur um 1,2 K ändert. Zur Verdeutlichung wurde die O_3 -CO-Korrelation in Abbildung 4.17 mit der potentiellen Temperatur eingefärbt. Darauf ist zu erkennen, dass die auffällige Struktur auf einer niedrigeren Isentrope liegt. Ein weiterer Punkt, der für eine natürliche und keine technische Ursache spricht ist, dass der auffällige Verlauf schon in den unbearbeiteten Ozondaten zu beobachten ist.

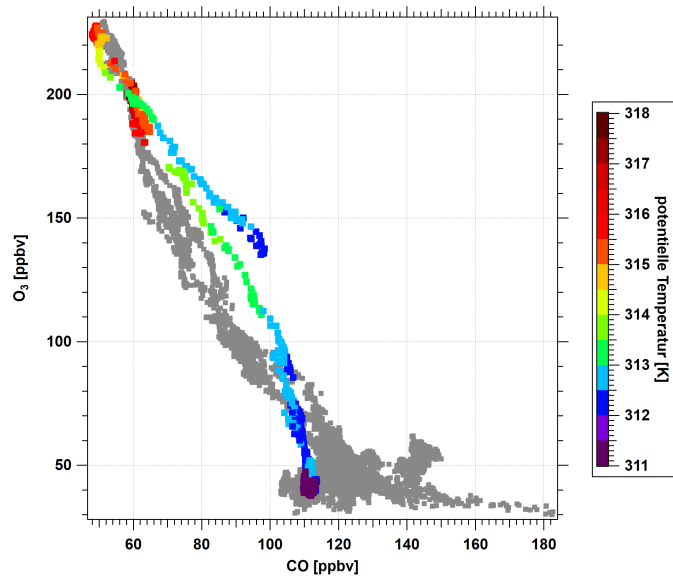


Abbildung 4.17.: Die O_3 -CO-Korrelation der höchsten Flugfläche wurde mit der potentiellen Temperatur zwischen 311 und 318 K eingefärbt. Potentielle Temperaturen < 311 K und die anderen Flugabschnitte sind grau.

Die betrachteten Korrelationen zeigen, dass an der Tropopausenfalte auf höheren horizontalen Flugabschnitten irreversibles Mischen beobachtet werden kann. Dabei läuft die Mischung lokal zwischen verschiedenen stratosphärischen (je nach Flughöhe) und unterschiedlichen troposphärischen Luftmassen (mit unterschiedlichem CO-Mischungsverhältnis), also über die Tropopause hinweg, ab. Besonders bei der N_2O -CO-Korrelation zeigen die linearen Mischungslinien unvollständiges, bzw. andauerndes Mischen.

4.4. Berechnung lokaler Ozonflüsse

In den vorherigen Abschnitten wurde gezeigt, dass während des Fluges irreversible Mischung gemessen wurde und, dass entlang des Flugwegs dynamisch instabile Abschnitte durchflogen wurden. Um zu überprüfen, ob es einen lokalen Zusammenhang zwischen diesen beiden Beobachtungen gibt, also ob das Mischungsergebnisse durch turbulenten Austausch erzeugt worden sein könnten, werden in diesem Abschnitt lokale, vertikale Spurengasflüsse berechnet (siehe Abschnitt 2.1.1). Wegen der besseren Vergleichbarkeit mit anderen Studien wird dazu das Ozonmischungsverhältnis verwendet. Zur Vervollständigung sind die berechneten vertikalen N_2O -Flüsse in Anhang C gezeigt.

Für die folgenden Analysen werden die sechs horizontalen Flugabschnitte zerlegt. Zur Verdeutlichung zeigt Abbildung 4.18 das Vorgehen beispielhaft für die zweithöchste Flugfläche. Die Einteilung in einen troposphärischen (blau) und einen stratosphärischen (rot)

4. Mischung und lokale Spurengasflüsse an einer Tropopausenfalte

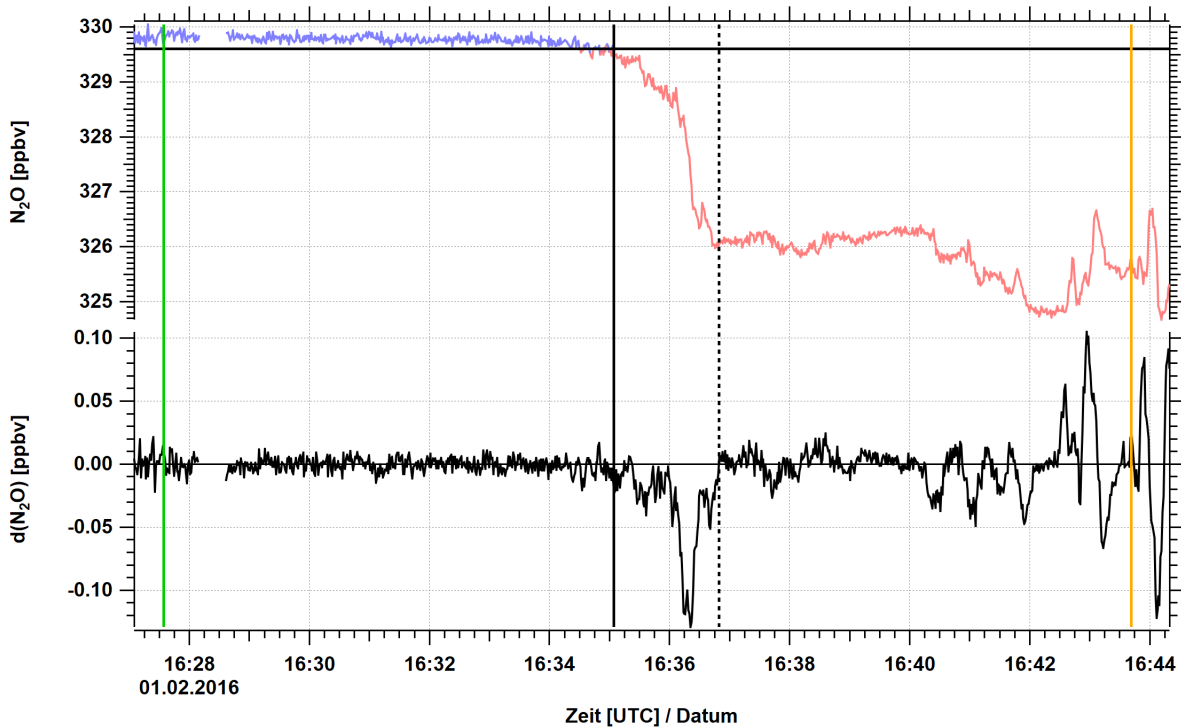


Abbildung 4.18.: Oben: Zeitreihe des N_2O -Mischungsverhältnisses. Blau eingefärbte Datenpunkte zeigen troposphärische und rot eingefärbte Datenpunkte stratosphärische Mischungsverhältnisse. Die horizontale schwarze Linie markiert die chemische N_2O -Tropopause (329,6 ppbv). Unten: Zeitreihe des N_2O -Gradienten, der mit einem gleitenden Mittel von 15 s geglättet wurde. Die grüne Linie markiert den Anfang und die orangefarbene Linie das Ende des horizontalen Flugabschnitts. Die durchgezogene vertikale schwarze Linie stellt die zeitliche Grenze zwischen dem troposphärischen und dem stratosphärischen Abschnitt dar. Die gestrichelte schwarze Linie markiert den Übergangsbereich innerhalb des stratosphärischen Abschnitts zum troposphärischen Abschnitt.

Abschnitt erfolgt hierbei unter Verwendung des N_2O -Mischungsverhältnisses, bzw. mit der in Abschnitt 4.2 bestimmten chemischen Tropopause, deren Schwellwert bei 329,6 ppbv N_2O liegt. Um ein häufiges Wechseln zwischen troposphärischen und stratosphärischen Abschnitten zu vermeiden (wenn das N_2O nahe am Schwellwert liegt, z.B. um 16:34:45 UTC), muss das N_2O -Mischungsverhältnis vor einem Wechsel mindestens 5 s in einem Regime liegen. Der stratosphärische Teil wird, soweit möglich, noch einmal unterteilt. Der hier als Übergangsbereich bezeichnete Abschnitt wird auf einer Seite durch den troposphärischen Abschnitt begrenzt. Er beinhaltet die größten Änderungen des N_2O -Mischungsverhältnisses, d.h. der horizontale Gradient (schwarze Kurve) erreicht die höchsten, bzw. niedrigsten Werte (hier um 16:36:15 UTC). Der Wechsel von Übergangsbereich und stratosphärischen Abschnitt wird auf den Zeitpunkt festgelegt, wenn der Gradient sein Vorzeichen ändert und die Werte danach deutlich kleiner sind, d.h. das N_2O -Mischungsverhältnis liegt ungefähr auf einer Isolethe.

Die Berechnung der vertikalen Ozonflüsse erfolgt auf die gleiche Weise wie in Abbildung 3.21 und damit unter Verwendung der Gleichungen (2.8), (2.9) und (2.11), also aus den Kovarianzen von O_3 und vertikaler Windgeschwindigkeit. Abbildung 4.19 zeigt die berechneten lokalen vertikalen Ozonflüsse allerdings nicht für eine spezifische Periode (ho-

rizontaler Schnitt in Abbildung 3.21), sondern als Mittelwert über alle Perioden.

Abbildung 4.19 zeigt die berechneten Ozonflüsse der sechs horizontalen Flugabschnitte

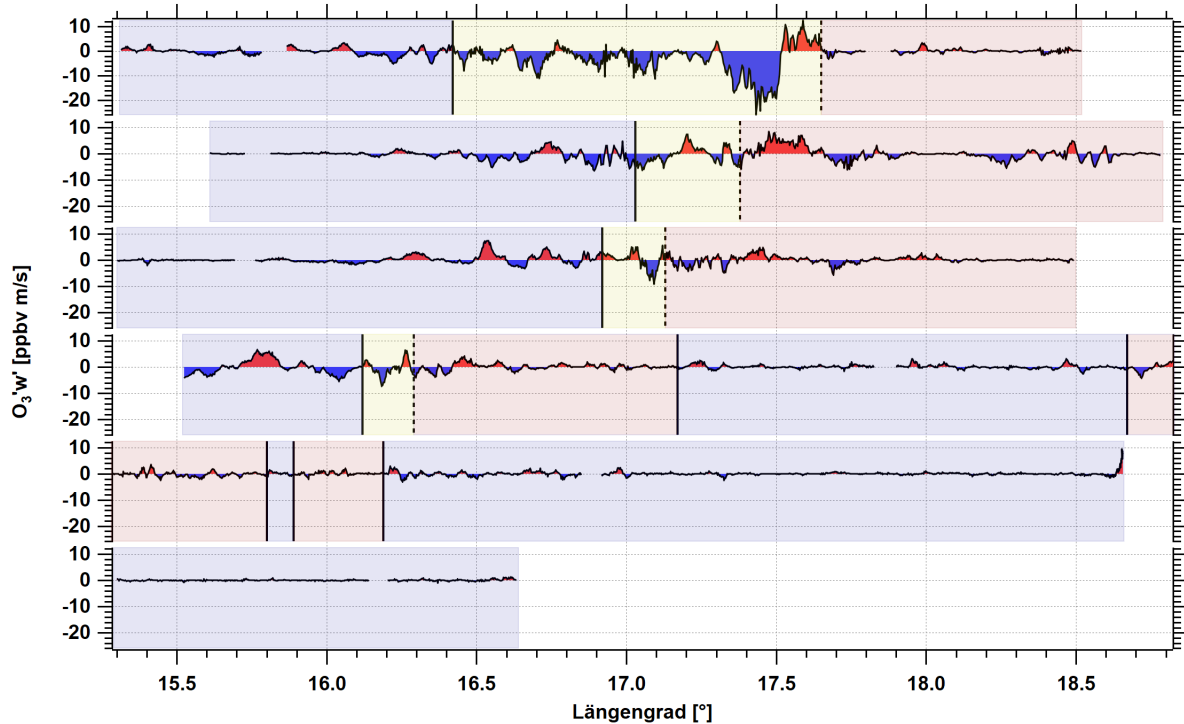


Abbildung 4.19.: Vertikale Ozonflüsse der sechs horizontalen Flugabschnitte. Durchgezogene vertikale schwarze Linien unterteilen die Flugabschnitte in troposphärische (blau hinterlegt) und stratosphärische (rot hinterlegt) Abschnitte. Gestrichelte vertikale schwarze Linien zeigen Übergangsbereiche (gelb hinterlegt), mit stratosphärischen N_2O -Mischungsverhältnissen, zur Troposphäre.

an der Tropopausenfalte. Auf den oberen drei Flughöhen zeigt die Farbkodierung jeweils einen troposphärischen Abschnitt (blau hinterlegt) im Westen, einen Übergangsbereich (gelb hinterlegt) und einen stratosphärischen Abschnitt (rot hinterlegt) im Osten der Tropopausenfalte. Im westlichen Teil der vierten Flughöhe ist die gleiche Struktur wie bei den drei darüber liegenden Flugflächen zu erkennen. Zwischen $17,1^\circ$ und $18,7^\circ$ liegt allerdings noch ein weiterer troposphärischer Abschnitt. Auf der fünften Flughöhe liegen die stratosphärischen Abschnitte im westlichen und die troposphärischen Abschnitte im östlichen Teil der Falte, die Struktur hat sich auf dieser Höhe damit umgedreht. Bei dem vierten und fünften Flugabschnitt sind außerdem Wechsel zwischen Troposphäre und Stratosphäre zu sehen an denen kein Übergangsbereich dargestellt ist. An diesen Stellen ist kein starker Gradient vorhanden, oder die N_2O -Mischungsverhältnisse liegen nahe an der chemischen Tropopause. Die N_2O -Zeitreihe des untersten Flugabschnitts beinhaltet nur troposphärische Mischungsverhältnisse.

Mit Werten zwischen $-25,8$ und $+12,5 \text{ ppbv} \cdot \text{m s}^{-1}$ treten die größten Flüsse in Abbildung 4.19 auf der obersten Flugfläche auf. Über den gesamten Abschnitt gemittelt liegt der Fluss bei $-1,5 \text{ ppbv} \cdot \text{m s}^{-1}$. Negative Werte (blau) repräsentieren einen nach unten gerichteten lokalen Fluss und positive Werte (rot) einen nach oben gerichteten O_3 -Fluss. Auf der zweiten, dritten und vierten Flughöhe sind die Flüsse mit $-9,0$ bis $+8,4 \text{ ppbv} \cdot \text{m s}^{-1}$ deutlich kleiner und auf den beiden darunterliegenden Abschnitten nochmals nur halb so

4. Mischung und lokale Spurengasflüsse an einer Tropopausenfalte

groß.

Bei der höchsten Flugfläche gibt es im Frequenzbereich 3 Maxima (Ozonflüsse sind Mittelwerte über alle Perioden), die den größten Anteil am Vertikalfluss haben (nicht gezeigt). Diese liegen bei Perioden um 15, 131 und 563 Sekunden, das entspricht Wellenlängen von 3,2, 27,7 und 119,2 Kilometern.

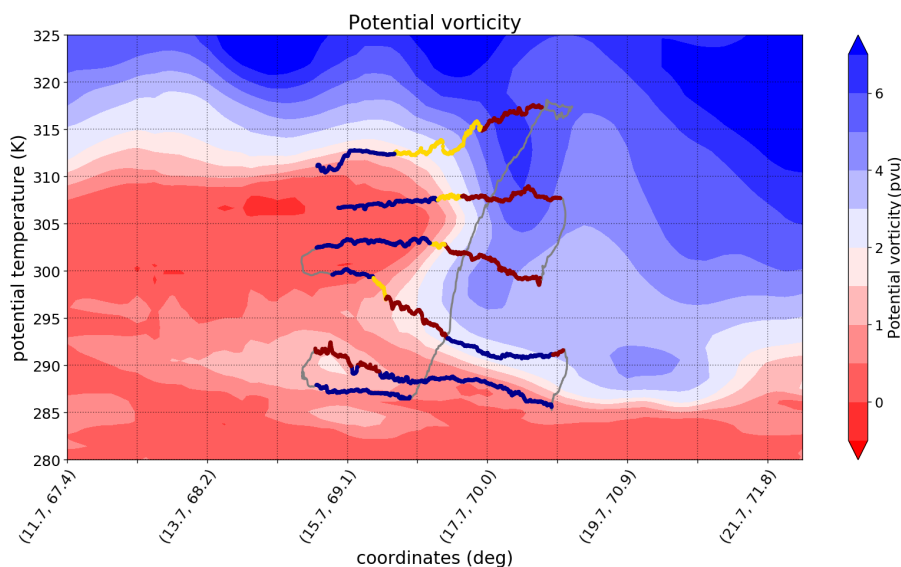


Abbildung 4.20.: Querschnitt der potentiellen Wirbelstärke entlang der nördlichen Flugabschnitte um 18 UTC. Horizontale Flugabschnitte mit troposphärischen N_2O -Werten sind blau, mit stratosphärischen Werten rot und gelb, wobei die gelben die Übergangsbereiche zeigen (wie in Abbildung (4.19)).

Abbildung 4.20 zeigt die Aufteilung der horizontalen Flugflächen im Querschnitt der potentiellen Wirbelstärke. Wie schon der Vergleich von dynamischer und chemischer Tropopause (Abbildung 4.13) gezeigt hat, fällt auch bei dieser Abbildung auf, dass die Wechsel zwischen troposphärischem und stratosphärischem Regime, besonders auf den unteren Flugniveaus, nicht an der 2 pvu-Grenze liegen. So ist zum Beispiel entlang der vierthöchsten Flugfläche ein Abschnitt mit troposphärischen N_2O -Mischungsverhältnissen bei PV-Werten zwischen 2 und 3 pvu zu erkennen. Auf der anderen Seite sind beim fünfhöchsten Flugabschnitt stratosphärischen N_2O -Mischungsverhältnisse bei PV-Werten zwischen 1 und 1,5 pvu vorhanden.

Um zu ermitteln ob es einen Zusammenhang zwischen den berechneten Ozonflüssen und den Mischungslinien gibt, zeigen die Abbildungen 4.21a und 4.21b die N_2O -CO- und O_3 -CO-Korrelationen. In diesem Fall wurde zur besseren Übersichtlichkeit nur die oberste Flugfläche mit dem vertikalen Ozonfluss eingefärbt, da der Fluss hier am größten ist und die Mischungslinie am deutlichsten zu erkennen ist. Zur einfacheren Unterscheidung der Farben, wurde die Skala so gewählt, dass nur Werte zwischen $\pm 12 \text{ ppbv} \cdot \text{m s}^{-1}$ unterschieden werden können.

Es ist zu beobachten, dass die größten Flüsse ($-25,8$ bis $+12,5 \text{ ppbv} \cdot \text{m s}^{-1}$) entlang der Mischungslinien in beiden Korrelationen auftreten und hauptsächlich negativ (grüne Farben) sind. In der Stratosphäre liegen die Ozonflüsse zwischen $-3,2$ und $+7,1 \text{ ppbv} \cdot \text{m s}^{-1}$ und in der Troposphäre zwischen $-5,2$ bis $+3,4 \text{ ppbv} \cdot \text{m s}^{-1}$. Auf der zweiten, dritten und vierten Flugfläche tritt dieses Verhalten ebenfalls auf, allerdings gibt es auf den Mi-

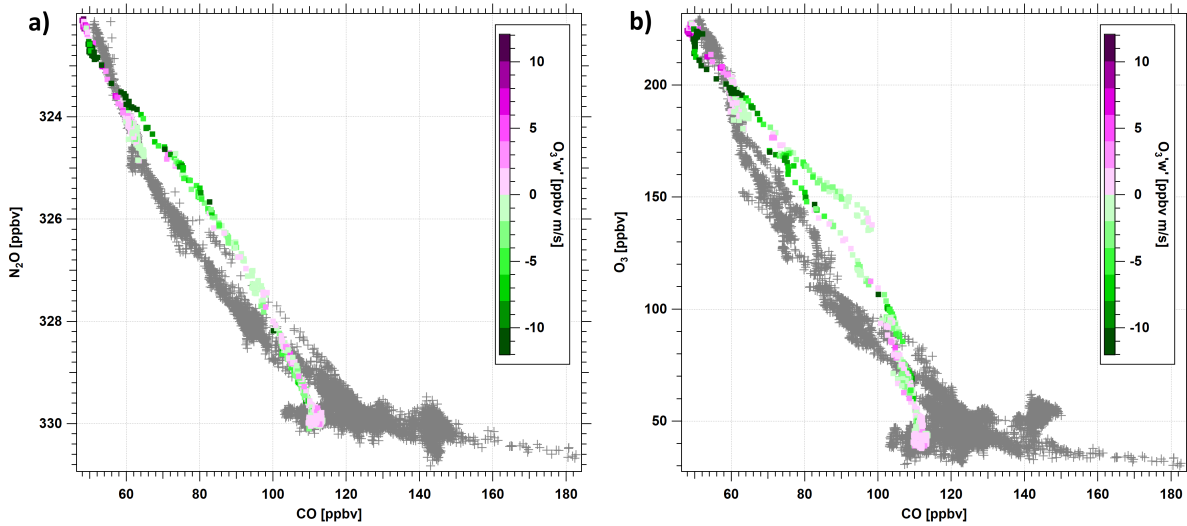


Abbildung 4.21.: a) N_2O -CO-Korrelation und b) O_3 -CO-Korrelation. Der oberste Flugabschnitt ist in Abhängigkeit des lokalen Ozonflusses dargestellt.

	Troposphäre	Mischungslinie	Stratosphäre
	$ \overline{\text{O}_3'w'} $	$ \overline{\text{O}_3'w'} $	$ \overline{\text{O}_3'w'} $
FH104O	1,15	4,81	0,54
FH091W	1,10	2,56	1,61
FH079O	0,95	2,33	0,93
FH067W	0,98	2,21	0,94
FH055O	0,49	-	0,60
FH046W	0,16	-	-

Tabelle 4.1.: Die Betragsmittelwerte der vertikalen O_3 -Flüsse in $\text{ppbv} \cdot \text{m s}^{-1}$ für jeden Bereich der 6 horizontalen Flugabschnitte.

schungslinien häufiger positive Ozonflüsse.

Bei Abbildung 4.21b ist außerdem zu beobachten, dass die Spurengasflüsse bei der, im vorigen Abschnitt (Abbildung 4.17) beschriebenen, auffälligen Struktur niedriger sind. Im Mittel sind sie die Flüsse auf der Mischungslinie ungefähr 2,7 Mal größer, als bei der Struktur. Möglicherweise wurde an dieser Stelle ein dünnes Filament mit höheren O_3 -Mischungsverhältnissen durchflogen.

Das Auftreten von großen Ozonflüssen auf den Mischungslinien wird in Tabelle 4.1 noch deutlicher. Dort wurden die Mittelwerte vom Betrag der lokalen Ozonflüsse berechnet. Die Einteilung entspricht der von Abbildung 4.20. Wenn mehrere troposphärische, oder stratosphärische Abschnitte auf einer Flugfläche vorlagen, wurden diese zusammengefasst. Die vorher als Übergangsbereich bezeichneten Abschnitte entsprechen damit den Flugabschnitten mit den Mischungslinien. Die Tabelle zeigt, dass die betragsmäßig größten Mittelwerte jeweils im Bereich der Mischungslinien, bzw. in den Übergangsbereichen der einzelnen Flugflächen auftreten. In den troposphärischen und stratosphärischen Abschnitten der jeweiligen Flugflächen haben die Betragsmittelwerte eine ähnliche Größe. Die Mittelwerte (ohne Betrag) der Ozonflüsse sind in den Übergangsbereichen zudem auf allen vier Flughöhen negativ. Dieser Fluss ($\text{O}_3'w'$) ist negativ wenn es einen aufwärts-

4. Mischung und lokale Spurengasflüsse an einer Tropopausenfalte

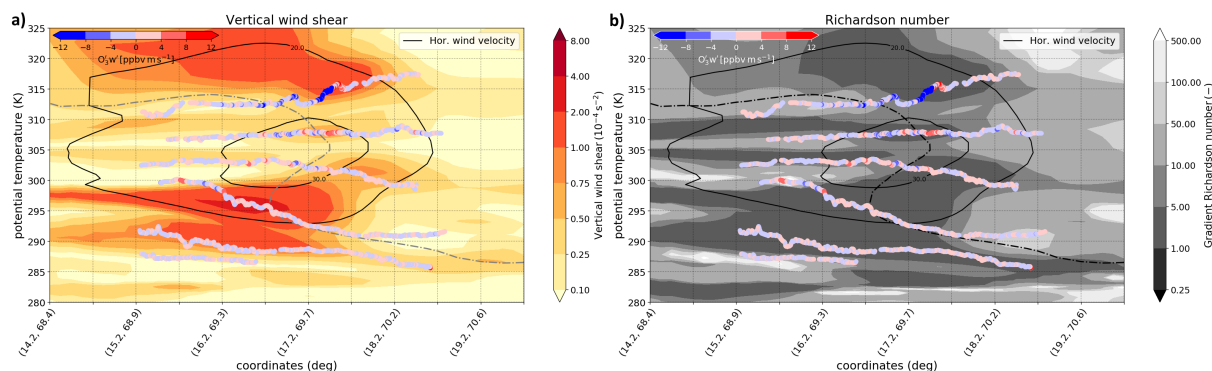


Abbildung 4.22.: Vertikalschnitte a) der Windscherung und b) der Richardson-Zahl an der Tropopausenfalte um 18 UTC. Schwarze Linien: Konturen der horizontalen Windgeschwindigkeit. Graue Linie: dynamische (2 puv) Tropopause. Horizontale Flugabschnitte mit rot-blau Farbskala der lokalen Ozonflüsse (zwischen -12 und $+12$ ppbv \cdot m s $^{-1}$) eingefärbt, wobei rote Farben einen positiven und blaue Farben einen negativen Fluss zeigen.

gerichteten Fluss von niedrigeren Mischungsverhältnissen, oder einen abwärtsgerichteten Fluss von höheren Mischungsverhältnissen gibt. Der Beitrag von letzterem ist größer, auch weil w' größtenteils negativ ist. Der abwärtsgerichtete Ozonfluss innerhalb der troposphärischen und stratosphärischen Abschnitten ist nicht korrespondierend. Die Tabelle zeigt außerdem noch einmal, dass der größte gemittelte Fluss auf der obersten Flugfläche auftritt.

Demnach ist die sehr gerade Mischungslinie (N_2O -CO-Korrelation) auf dem obersten Flugniveau, die troposphärische und stratosphärische Luftmassen verbindet, mit den größten lokalen, vertikalen Spurengasflüssen verbunden. Dies ist ein Hinweis darauf, dass die Flüsse in diesem Fall zu einem Spurengasaustausch und damit zu irreversibler Mischung geführt haben. Die Mischung, die durch den gekrümmten Teil der Korrelation repräsentiert wird, ist entweder schwächer, oder nicht-lokal und deshalb länger zurückliegend.

Die Abbildungen 4.22a und 4.22b zeigen die Vertikalschnitte von Scherung und die Richardson-Zahl aus ECMWF IFS-Analysedaten um 18 UTC. Der Flugweg, bzw. die horizontalen Flugabschnitte wurden mit dem vertikalen Ozonfluss eingefärbt. Auf dem höchsten Flugabschnitt liegen die größten Ozonflüsse in Bereichen, in denen die vertikale Windscherung des Horizontalwinds Werte zwischen $0,5$ und $1,4 \cdot 10^{-4} \text{ s}^{-2}$ und die Richardson-Zahl Werte zwischen $2,0$ und $5,7$ erreichen. Auch bei den darunterliegenden Flugniveaus treten die jeweils größten Ozonflüsse überwiegend in Bereichen auf, in denen die Richardson-Zahl ein lokales Minimum und die Scherungen ein lokales Maximum haben. Eine Ausnahme bildet die unterste Flugfläche, wobei die berechneten Flüsse ohnehin sehr klein sind.

Die berechneten lokalen Ozonflüsse treten damit nicht nur auf den beobachteten Mischungslinien der Spurengaskorrelationen auf, sondern zusätzlich auch bei Flugabschnitten in denen das Auftreten von dynamischer Instabilität möglich ist. Die Ergebnisse legen nahe, dass Instabilitäten an der Tropopausenfalte zu Turbulenz und dadurch zu Spurengasflüssen und irreversibler Mischung geführt haben könnten.

4.5. Analyse der spektralen Leistungsdichte und Wavelet-Analyse an der Tropopausenfalte

In Abschnitt 4.2 wurde gezeigt, dass während des Messflugs möglicherweise dynamisch instabile Regionen durchflogen wurden. Um die Zeitreihen nach weiteren Hinweisen auf Turbulenz an der Tropopausenfalte zu untersuchen, werden in diesem Abschnitt die spektralen Leistungsdichten (Abschnitt 2.2.2) von verschiedenen Messgrößen analysiert, sowie eine Wavelet-Analyse (Abschnitt 2.2.1) durchgeführt. Für die Analysen der Spurengase kommt in diesem Abschnitt hauptsächlich das N_2O -Mischungsverhältnis zum Einsatz, da es chemisch inert ist und außerdem nicht wie die Ozondaten zusätzlich bearbeitet werden musste, womit ein Einfluss durch die Bearbeitung auf die spektralen Eigenschaften ausgeschlossen werden.

4.5.1. Untersuchung der spektralen Leistungsdichte

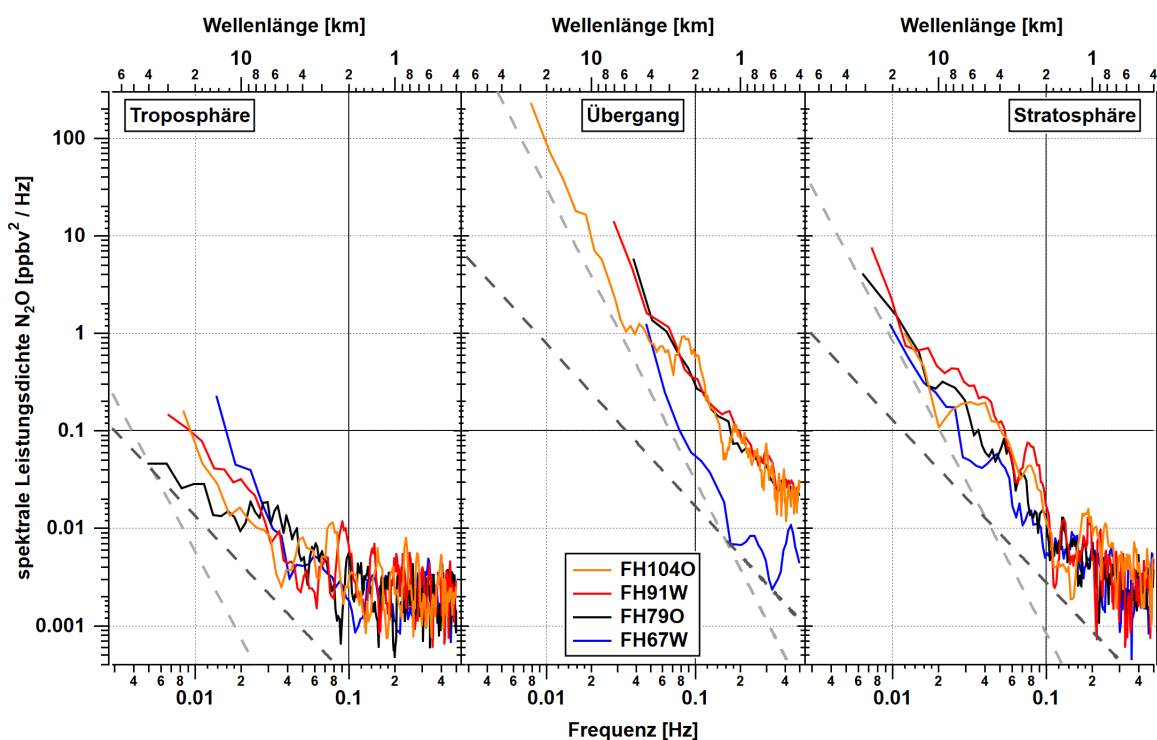


Abbildung 4.23.: Spektrale Leistungsdichten von N_2O für die vier höchsten Flughöhen unterteilt in einen troposphärischen (links), stratosphärischen (rechts) und Übergangsbereich (Mitte). Die hellgraue Linie zeigt eine Steigung von -3 und die dunkelgraue Linie eine Steigung von $-5/3$.

Abbildung 4.23 zeigt die spektrale Leistungsdichte von N_2O für die vier höchsten Flugflächen. Um den Graphen nicht zu unübersichtlich zu machen, sind die Analysen der unteren beiden Flugflächen nicht abgebildet. Dabei wurden die einzelnen Flugniveaus, wie im vorigen Abschnitt 4.4 beschrieben (Abbildung 4.20), in einen troposphärischen Abschnitt (links), einen stratosphärischen Abschnitt (rechts) und einen Übergangsbereich

4. Mischung und lokale Spurengasflüsse an einer Tropopausenfalte

(Mitte) unterteilt. Abbildung 4.19 zeigt, dass es bei der vierten Flughöhe zwei troposphärische und zwei stratosphärische Abschnitte gibt. Für die Analyse wurden nur die an den Übergangsbereich angrenzenden troposphärischen und stratosphärischen Abschnitte verwendet. Die berechneten Leistungsdichten wurden außerdem mit einem gleitenden Mittel von 5 Sekunden geglättet. Bei allen Flughöhen ist zu beobachten, dass die Leistung im troposphärischen Abschnitt am geringsten ist. Dies liegt an der geringen Variabilität von N_2O in der Troposphäre. Bei Frequenzen größer 0,1, bzw. 0,2 Hz nimmt die Leistung im troposphärischen Abschnitt nicht weiter ab. Das bedeutet, dass das Rauschen, bzw. die Leistung des Rauschens des Messgeräts ab diesen Frequenzen größer ist, als die Leistung des atmosphärischen Signals. Die Untersuchung mehrerer Beispiele hat gezeigt, dass diese Grenze beim N_2O bei zirka $0,002 \text{ ppbv}^2 \text{ Hz}^{-1}$ liegt. Die Leistung im Übergangsbereich ist bei allen Flugabschnitten am größten. Dies passt dazu, dass in diesem Bereich auch die höchsten Spurengasflüsse auftreten (Abschnitt 4.4).

In Abbildung 4.23 repräsentiert die dunkelgraue Linie eine Steigung von $-5/3$ und die hellgraue Linie eine Steigung von -3 . Im troposphärischen Abschnitt auf der höchsten Flugfläche (orange Linie) beträgt die mittlere Steigung bei Frequenzen kleiner 0,04 Hz ($> 5,3 \text{ km}$) $-2,4$. Für Frequenzen größer 0,04 Hz wird die Steigung kleiner, was sich aufgrund des Rauschens allerdings nicht genauer definieren lässt. Im Übergangsbereich liegt die mittlere Steigung bei Frequenzen kleiner 0,1 Hz ($> 2,1 \text{ km}$) bei $-2,6$ und bei Frequenzen größer 0,1 Hz ($< 2,1 \text{ km}$) bei $-1,5$. Über alle Frequenzen beträgt die Steigung im stratosphärischen Abschnitt im Mittel $-1,5$. Die Steigungswerte auf den anderen Flugabschnitten sind ganz ähnlich zu denen auf der höchsten Flugfläche, allerdings sind die Frequenzbereiche an denen sich die Steigung verändert teilweise etwas anders. Besonders bei hohen Frequenzen und damit kleinen Wellenlängen folgt die Steigung also eher einer Steigung von $-5/3$ ($-1,6$) und ist damit ein Hinweis auf mögliche Turbulenz.

Abbildung 4.24 zeigt die spektrale Leistungsdichte der potentiellen Temperatur. Es ist zu erkennen, dass die Leistungsunterschiede zwischen den drei Abschnitten deutlich kleiner ausfallen, als beim N_2O . Dies lässt sich wahrscheinlich dadurch erklären, dass die Variabilität der potentiellen Temperatur auf den Flugabschnitten mit weniger als 2 K eher klein ist und dementsprechend auch die Unterschiede zwischen den Abschnitten. Ähnlich wie beim N_2O -Mischungsverhältnis liegt die Steigung der potentiellen Temperatur auf der höchsten Flugfläche bei kleinen Frequenzen nahe an der Steigung von $-5/3$. Im troposphärischen Abschnitt für Frequenzen größer 0,025 Hz ($< 8,5 \text{ km}$; mittlere Steigung $-1,6$), im Übergangsbereich bei Frequenzen größer 0,085 Hz ($< 2,5 \text{ km}$; mittlere Steigung $-1,5$) und im stratosphärischen Abschnitt bei Frequenzen größer 0,04 Hz ($< 5,3 \text{ km}$; mittlere Steigung $-1,5$).

In Abbildung 4.25 sind die spektrale Leistungsdichten der vertikalen Windgeschwindigkeit dargestellt. Auf der höchsten Flugfläche sind sie in der Stratosphäre (stratosphärischer Abschnitt und Übergangsbereich) größer als in der Troposphäre. Bei den Steigungen ergibt sich ein ganz ähnliches Bild wie beim N_2O -Mischungsverhältnis und der potentiellen Temperatur. Auffällig ist allerdings die Zunahme der Leistungsdichte um mehr als eine Größenordnung bei Frequenzen größer 0,25 Hz ($< 8,5 \text{ km}$) in allen drei Bereichen, aber besonders im Übergangsbereich der höchsten Flugfläche. Ein ähnliches Verhalten, bei etwas größeren Frequenzen, konnte im vorherigen Kapitel 3 in Abbildung 3.24 beobachtet werden und könnte in diesem Abschnitt möglicherweise eine entsprechende Ursache haben. Allerdings liegt die maximal auflösbare Frequenz mit 0,5 Hz nahe am Frequenzbereich mit der Leistungszunahme, was die Interpretation dieses Verlaufs erschwert. Zur genaueren

4.5. Analyse der spektralen Leistungsdichte und Wavelet-Analyse an der Tropopausenfalte

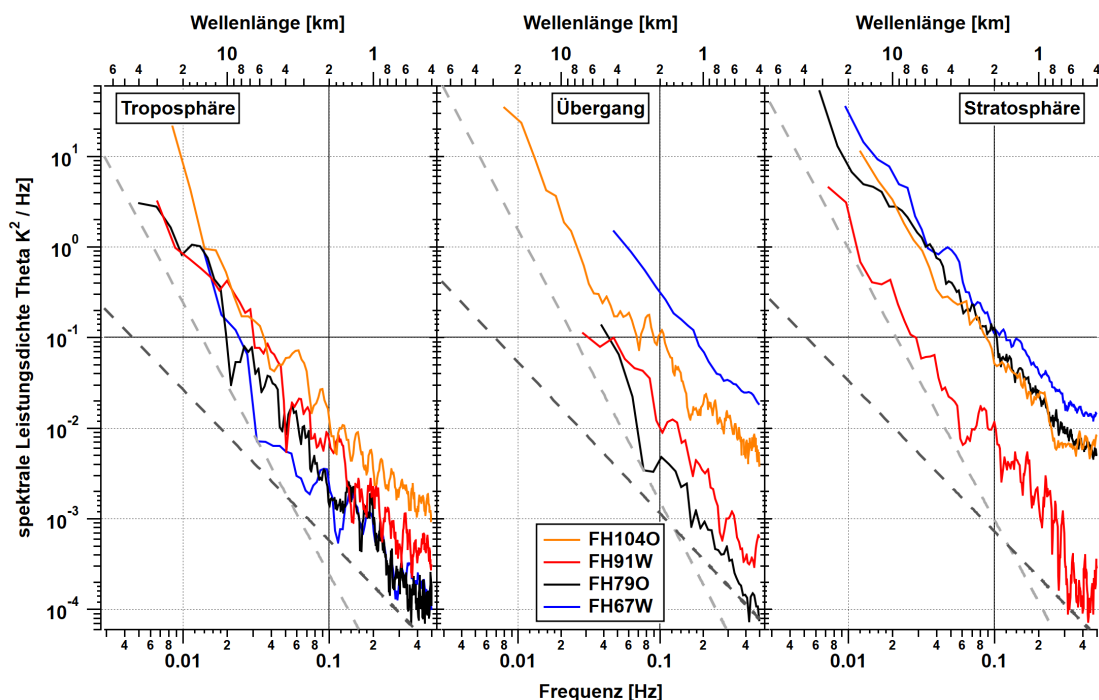


Abbildung 4.24.: Spektrale Leistungsdichte der potentiellen Temperatur für die vier höchsten Flughöhen unterteilt in einen troposphärischen (links), stratosphärischen (rechts) und Übergangsbereich (Mitte). Die hellgraue Linie zeigt eine Steigung von -3 und die dunkelgraue Linie eine Steigung von $-5/3$.

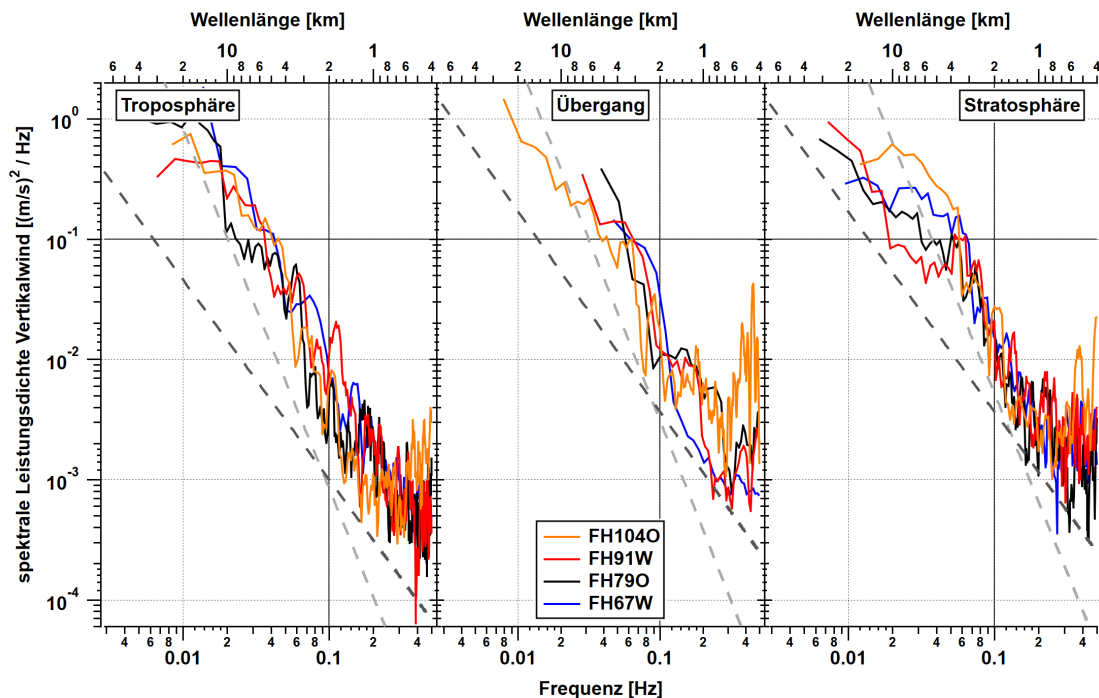


Abbildung 4.25.: Spektrale Leistungsdichte der vertikalen Windgeschwindigkeit für die vier höchsten Flughöhen unterteilt in einen troposphärischen (links), stratosphärischen (rechts) und Übergangsbereich (Mitte). Die hellgraue Linie zeigt eine Steigung von -3 und die dunkelgraue Linie eine Steigung von $-5/3$.

4. Mischung und lokale Spurengasflüsse an einer Tropopausenfalte

Analyse sind daher Daten der vertikalen Windgeschwindigkeit mit einer höheren zeitlichen Auflösung nötig. Ein technisches Problem, eine Schwingung des Nasenmastes, an dem die Windsensoren sitzen, oder auch eine Schwingung des Messflugzeugs selbst, aufgrund der Trimmung durch den Autopiloten, kann nicht ausgeschlossen werden, auch wenn diese Auffälligkeit nur beim Vertikalwind und nicht bei den horizontalen Windkomponenten (siehe Abbildung D.2 in Anhang D) auftritt und nur zeitweise vorhanden ist.

Die Analyse der spektrale Leistungsdichte des N_2O -Mischungsverhältnisses, der potentiellen Temperatur und besonders der vertikalen Windgeschwindigkeit zeigt, dass besonders auf kleinen Skalen, d.h. bei hohen Frequenzen ein Verlauf mit einer Steigung von $-5/3$ zu beobachten ist. Das stimmt mit den Beobachtungen von Richardson-Zahl und Windscherung (Abschnitt 4.2.1) überein, bei denen Regionen mit niedrigen, bzw. hohen Werten auch nicht auf einzelne Flugbereiche begrenzt waren. Turbulenz könnte es somit, zumindest lokal, in fast allen Abschnitten gegeben haben. Des Weiteren ist zu beobachten, dass die Leistung bei allen Größen und auf allen Flughöhen in der Troposphäre kleiner ist, als in der Stratosphäre. Bei der vertikalen Windgeschwindigkeit und der potentiellen Temperatur ist die spektrale Leistung im stratosphärischen Abschnitt und im Übergangsbereich überwiegend auf ähnlichem Niveau, nur bei den Spurengasen ist sie im Übergangsbereich größer als im stratosphärischen Abschnitt. Dieser Punkt, also dass die spektrale Leistungsdichte im Übergangsbereich, bzw. auf den Mischungslinien am größten ist, stimmt mit den Ergebnissen der Spurengasflüsse (Abschnitt 4.4) überein.

4.5.2. Wavelet-Analysen im Bereich der Tropopausenfalte

Die Untersuchung der spektralen Leistungsdichten hat gezeigt, dass es auf allen Flugniveaus Turbulenz gegeben haben könnte. Mit Hilfe der Wavelet-Analyse soll nun untersucht werden, wo genau, d.h. zu welchem Zeitpunkt, bzw. an welcher geographischen Position Signale auftreten, die einen Hinweis auf Turbulenz liefern können.

Abbildung 4.26 zeigt die Wavelet-Transformation von N_2O (oben) und vertikaler Windgeschwindigkeit (unten) vom obersten Flugabschnitt. Die Analyse des N_2O -Mischungsverhältnisses zeigt die höchste Leistung bei Perioden größer 65 Sekunden ($> 13,8$ km) zwischen $17,2^\circ$ und $17,7^\circ$, d.h. größtenteils im Übergangsbereich ($\sim 16,4 - 17,6^\circ$) und zudem bei Längengraden, bei denen die größten Ozonflüsse auftreten (siehe Abbildung 4.19). Vor allem im Übergangsbereich sind zudem bei kleineren Skalen, bzw. Perioden (< 8 s, bzw. $< 1,7$ km) Regionen mit erhöhter Leistung zu sehen. Wie bei der spektralen Leistungsdichte (Abbildung 4.23) ist auch bei der Wavelet-Transformation der Leistungsunterschied zwischen dem troposphärischen Bereich und dem stratosphärischen, bzw. Übergangsbereich deutlich erkennbar.

Bei der Analyse der vertikalen Windgeschwindigkeit fallen zwei Dinge besonders ins Auge. Zum einen ist im troposphärischen Flugabschnitt ($< 16,4^\circ$) bei Perioden kleiner 8 s ($< 1,7$ km) weniger Leistung vorhanden, als im Übergangsbereich und im stratosphärischen Abschnitt. Zum anderen gibt es auf der gesamten Flugfläche bei Perioden kleiner 4 s (< 850 m) häufiger Bereiche mit hoher Leistung, die ein Zeichen für Turbulenz sein könnten. Am deutlichsten ist dies um 17° , also im Übergangsbereich, bzw. auf der Mischungslinie der Korrelationen, zu sehen. Beides stimmt gut mit den Ergebnissen der spektralen Leistungsdichte in Abbildung 4.25 überein. Die in Abbildung 4.25 beobachtete

4.5. Analyse der spektralen Leistungsdichte und Wavelet-Analyse an der Tropopausenfalte

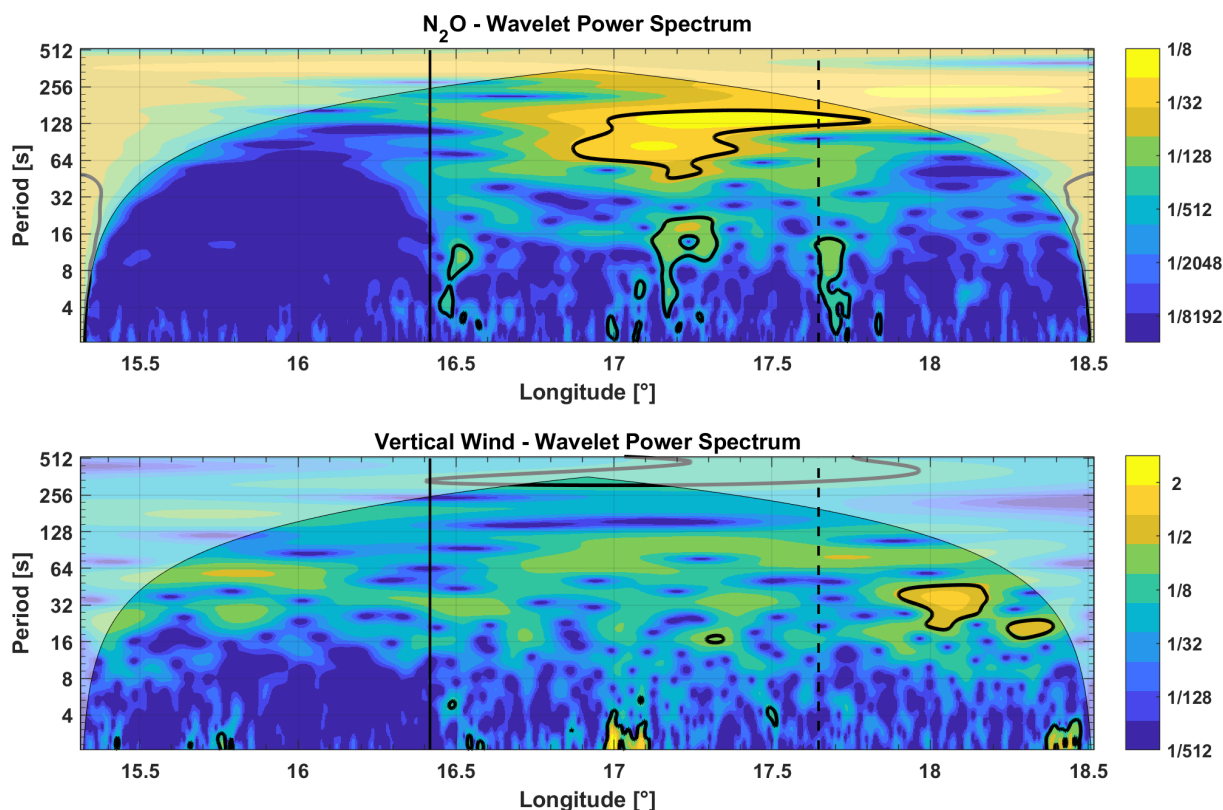


Abbildung 4.26.: Wavelet-Transformationen des N_2O -Mischungsverhältnisses (oben) und vertikaler Windgeschwindigkeit (unten) des obersten Flugabschnitts. Die dicken schwarzen Konturen zeigen die 5% Signifikanz und die dünne schwarze Linie den COI. Die vertikalen Linien teilen den Flug wie in Abbildung 4.20.

Zunahme der spektralen Leistungsdichte bei hohen Frequenzen kann hauptsächlich auf diese Intervalle mit signifikant erhöhter Leistung zurückgeführt werden.

Um zu untersuchen bei welchen Perioden starke Vertikalflüsse auftreten und qualitativ einen Vergleich mit den berechneten Spurengasflüssen aus Abschnitt 4.4 machen zu können, werden die Vertikalflüsse von N_2O und O_3 alternativ mit Hilfe der Wavelet-Analyse berechnet. Dazu ist das Kospektrum der Kreuz-Wavelet-Analyse (Abschnitt 2.2.1) des höchsten Flugabschnitts von O_3 , bzw. N_2O und vertikaler Windgeschwindigkeit in Abbildung 4.27 dargestellt. Die größte Leistung, die in diesem Fall auch als vertikaler Fluss interpretiert werden kann, ist bei Perioden zwischen 65 und 136 Sekunden, bzw. einer Wellenlänge zwischen 13,8 und 28,8 Kilometern, im Übergangsbereich der Tropopausenfalte zu erkennen. Dies Punkt passt gut mit Abbildung 4.19 zusammen. Der größte Fluss beim Ozon liegt dabei bei maximal $1,1 \text{ ppbv} \cdot \text{m s}^{-1}$. Dieser Wert kann jedoch nicht mit den Werten der Flüsse von Abbildung 4.19 verglichen werden, da dort zum einen die Mittelwerte über alle Skalen betrachtet wurden und zum anderen die Berechnung ohne zusätzliches räumliches Mittel durchgeführt wurde (siehe dazu auch Abschnitt 3.5.5). Besonders im Übergangsbereich sind die Ozonflüsse größtenteils negativ (und die N_2O -Flüsse positiv), was ebenfalls zu der Ergebnissen von Abbildung 4.19 passt. Wie in Abbildung 4.26 zeigt auch das Kospektrum um 17° signifikant hohe Werte bei kleinen Perioden ($< 3,5 \text{ s}$, bzw. $< 740 \text{ m}$ Wellenlänge). In diesem Bereich des Fluges treten im ECMWF-Modell auch erhöhte Windscherung und niedrige Richardson-Zahlen (siehe Abschnitt 4.2)

4. Mischung und lokale Spurengasflüsse an einer Tropopausenfalte

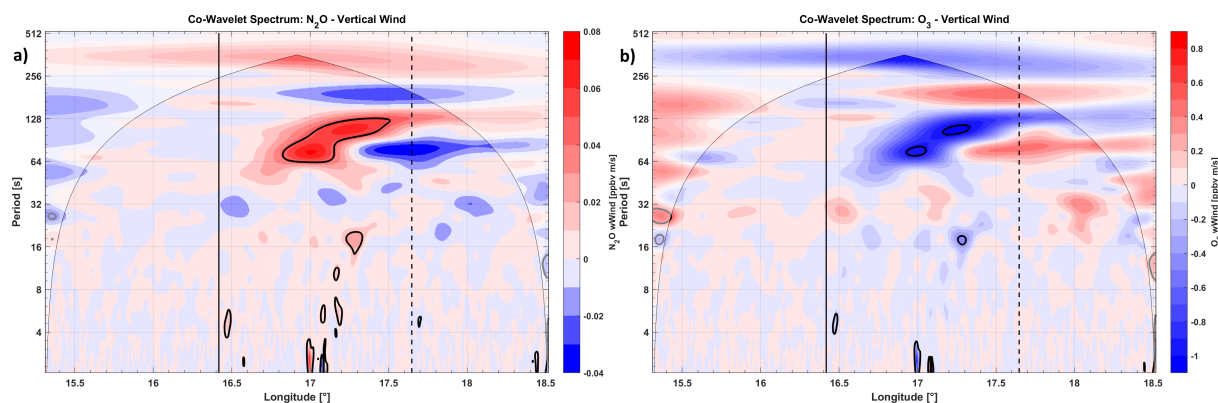


Abbildung 4.27.: Kospektrum Kreuz-Wavelet-Transformation von a) N₂O, bzw. b) O₃ und vertikaler Windgeschwindigkeit des obersten Flugabschnitts. Die dicken schwarzen Konturen zeigen die 5% Signifikanz und die dünne schwarze Linie den COI. Die gestrichelten vertikalen Linien teilen den Flug wie in Abbildung 4.20.

auf. Die Unterschiede zwischen N₂O und O₃ bei Perioden kleiner 15 s können durch die geringere Sensoraufösung des O₃-Messgeräts erklärt werden.

Die Wavelet-Analysen bestätigen noch einmal, dass die größte Leistung im Übergangsbereich liegt. Dabei ist sie sowohl bei großen, wie auch lokal bei kleinen Skalen vorhanden und weist somit einen möglichen Einfluss von Turbulenz hin. Dadurch kombiniert und bestätigt sie die Ergebnisse der vorherigen Abschnitte 4.4 und 4.5.

4.6. Diskussion

Die Analyse der Tropopausenfalte während des 8. Messflugs hat deutliche Hinweise auf Scherung und Turbulenz ergeben. Diese wurden in vielen Studien, wie z.B. Shapiro et al. (1980); Keyser und Shapiro (1986); Danielsen et al. (1991); Holton et al. (1995); Cho et al. (1999); Brioude et al. (2006); Gettelman et al. (2011); Woiwode et al. (2018), beobachtet und beschrieben. Bisher konnte dabei jedoch noch kein direkter Zusammenhang zwischen Turbulenz und dem Nachweis von irreversiblen Mischungsprozessen in Spurengaskorrelationen gezeigt werden. Die Untersuchungen in diesem Kapitel haben gezeigt, dass die, wahrscheinlich durch Turbulenz erzeugten, lokalen Spurengasflüsse ihre Höchstwerte auf jeder Flughöhe jeweils in der Nähe des Übergangs zwischen Troposphäre und Stratosphäre erreicht haben. Auf der höchsten Flugfläche beträgt der lokale Ozonfluss im betragsmäßigen Mittel $2,49 \text{ ppbv} \cdot \text{m s}^{-1}$. Dieser Wert liegt im selben Größenbereich, wie er auch von Shapiro (1980) ($0,6$ bis $6,3 \text{ ppbv} \cdot \text{m s}^{-1}$) und Cho et al. (1999) (ungefähr $1,5 \text{ ppbv} \cdot \text{m s}^{-1}$) angegeben wird. Auch die darunterliegenden Flugflächen liegen mit einem Mittelwerten von $1,49$, $1,03$ und $+1,04 \text{ ppbv} \cdot \text{m s}^{-1}$ noch in diesem Literaturbereich. Die mittleren Flüsse der unteren Flugniveaus hingegen sind kleiner. Die in Abbildung 4.11 dargestellte zeitliche Entwicklung der Falte zeigt, dass Scherung auf der dritten und vierten Flugfläche nach dem durchfliegen noch stärker geworden ist. Möglicherweise wären die lokalen Flüsse dieser Abschnitte zu einem späteren Zeitpunkt größer. Werden für den Vergleich die in Tabelle 4.1 gezeigten mittleren Flüsse aus dem Übergangsbereich verwendet, d.h. der Bereich in dem die Mischung wahrscheinlich zum großen Teil statt-

gefunden hat, werden die Ozonflüsse um ungefähr 50% größer. Auf den untersten beiden Flächen sind die Spurengasgradienten hingegen zu schwach um signifikante Vertikalflüsse zu bestimmen.

Zur Analyse von irreversiblen Mischungsprozessen sind Spurengaskorrelationen gut geeignet. In den Arbeiten von Zahn et al. (2000); Brioude et al. (2006); Pan et al. (2007); Gettelman et al. (2011); Woiwode et al. (2018) konnten an Tropopausenfalten mit Hilfe der Spurengaskorrelationen O_3 -CO-, oder O_3 -H₂O-Mischungslinien, bzw. häufiger zumindest Mischungsschichten identifiziert werden. Bei den Spurengaskorrelationen von N₂O-CO und O_3 -CO von diesem Flug sind mehrere Mischungslinien auf unterschiedlichen Flughöhen zu sehen. Im Gegensatz zu früheren Studien haben die Analysen in dieser Arbeit gezeigt, dass es einen direkten Zusammenhang zwischen dem Auftreten dieser Mischungslinien und den lokalen vertikalen Spurengasflüssen gibt. Besonders deutlich wird dies auf der obersten Flugfläche, bei dem die größten Spurengasflüsse auf der ausgeprägtesten Mischungslinie auftritt. Daraus ergeben sich deutliche Hinweise darauf, dass lokale Mischungsprozesse, die durch Turbulenz erzeugt wurden, die beobachteten Spurengaskorrelationen erzeugt, oder zumindest beeinflusst haben.

4.7. Zusammenfassung

In diesem Kapitel wurde ein Flug der Messkampagne GW-LCYCLE II untersucht. Mit Hilfe von Spurengasmessungen, Messungen meteorologischer Größen, sowie Modelldaten von ERA5 und ECMWF IFS wurde die nähere Umgebung einer Tropopausenfalte analysiert. Die Ergebnisse legen nahe, dass es an dieser Tropopausenfalte zu Scherung gekommen ist, die wiederum Turbulenz erzeugt hat. Die daraus resultierende Mischung führte im Gegenzug zu diabatischen Flüssen. Diese lokalen Spurengasflüsse haben zu Mischung von Luft aus der Troposphäre und Luft aus der Stratosphäre geführt und konnten mit Hilfe der Spurengaskorrelationen identifiziert werden.

Eine notwendige Bearbeitung der gemessenen Ozondaten wurde durchgeführt, um sowohl die Verteilung, als auch das Mischungsverhältnis der Messungen an den atmosphärischen Hintergrund anzupassen, ohne dabei die Variabilität der Originaldaten signifikant zu beeinflussen.

Die Tropopausenfalte wurde während des Fluges auf sechs verschiedenen Flughöhen durchflogen. Troposphärische und stratosphärische Luftmassen lassen sich dabei mit Hilfe der Spurengase (N₂O, CO, O₃) deutlich unterscheiden.

Die Analyse der Faltenstruktur hat gezeigt, dass sich der untere Teil der Falte im Laufe des Messfluges verstärkt hat. Dabei konnten erhöhte Scherungswerte und verringerte Richardson-Zahlen auf allen Abschnitten gefunden werden. In solchen, eher instabilen, Bereichen hat ein Vergleich, der aus den Spurengasmessungen ermittelten chemischen Tropopause, mit der aus dem Modell gewonnenen dynamischen Tropopause, zum Teil deutliche Unterschiede ergeben, was auf Mischung, bzw. einen Spurengastransport über die Tropopause hindeutet.

Die Analyse der Spurengaskorrelationen von N₂O, CO und O₃ zeigt einzelne Mischungslinien auf mehreren Flughöhen, die durch das irreversible Mischen von Luftmassen, in diesem Falle einer troposphärischen und einer stratosphärischen Luftmasse entstanden sind.

Berechnungen der lokalen Ozonflüsse haben ergeben, dass sie bevorzugt an der Tropopau-

4. Mischung und lokale Spurengasflüsse an einer Tropopausenfalte

senfalten und damit am Übergang von Troposphäre und Stratosphäre zu finden sind. Die größten Flüsse der jeweiligen Flughöhen treten im Bereich der diagnostizierten Mischungslinien der Spurengaskorrelationen und in möglicherweise dynamisch instabilen Bereichen der Atmosphäre auf.

Aus den Analysen der spektralen Leistungsdichten und der Wavelet-Analysen konnten weitere Hinweise auf mögliche Turbulenz gefunden werden. Dabei zeigte sich auch eine Überstimmung von Bereichen mit hoher Wavelet-Leistung und Bereichen die erhöhte Scherung, bzw. niedrige Richardson-Zahlen aufweisen.

Die durchgeführten Untersuchungen haben gezeigt, dass lokale Mischung die Verteilung von Spurengasen an einer Tropopausenfalte beeinflussen. Dabei konnten die Mischungslinien der Spurengaskorrelation mit einem physikalischen Mischungsprozess, der Turbulenz, in Verbindung gebracht werden. Das heißt, dass Turbulenz zu Spurengasflüssen und damit zu Mischung zwischen troposphärischen und stratosphärischen Luftmassen führen kann.

5. Untersuchung von welleninduziertem Austausch am antarktischen polaren Wirbel

In diesem Kapitel wird der Effekt von Schwerewellen auf Mischungsprozesse am antarktischen polaren Wirbel, während eines Messflugs der Kampagne SouthTRAC 2019, untersucht. In diesem Zusammenhang werden hochauflösende, d.h. Datensätze mit einer zeitlichen Auflösung von 1 Hz, in-situ Spurengasmessungen von N_2O und O_3 genutzt und die Spurengaskorrelationen auf Mischungsprozesse untersucht. Zur Identifizierung von Turbulenz im Messgebiet werden des Weiteren Messdaten mit einer zeitlichen Auflösung von bis zu 100 Hz verwendet. Um Informationen über die Herkunft von Luftmassen zu erhalten, können CLaMS-Daten entlang des Flugwegs genutzt werden. Komplettiert werden den Analysen mit ECMWF IFS-Vorhersage- und Analysedaten.

Anhand der in diesem Kapitel durchgeführten Analysen sollen folgende Fragen beantwortet werden:

- Können orographisch erzeugte Schwerewellen zum Austausch von Luftmassen aus dem polaren Wirbel und den mittleren Breiten beitragen?
- Gibt es Hinweise auf Mischung von Luftmassen mit einer unterschiedlichen Herkunft?
- Können Schwerewellen am Rand, bzw. an einem Filament des polaren Wirbels Turbulenz erzeugen?
- Wie beeinflussen Schwerewellen die Spurengasverteilung am Rand des Polarwirbels?

5.1. SouthTRAC-Kampagne

Die SouthTRAC-Kampagne fand in zwei Phasen von September bis November 2019, also im späten Winter und Frühling, in Argentinien statt. Standort des Forschungsflugzeugs HALO war Rio Grande auf Feuerland. Ziele der Kampagne waren die Untersuchung von Austauschprozessen an der Tropopause und Schwerewellen (Rapp et al., 2021) in der Südhemisphäre. Außerdem wurde der Einfluss von Biomassenverbrennung auf die südhemisphärische UTLS, sowie der Einfluss des antarktischen Polarwirbels auf die Zusammensetzung der UTLS untersucht. Die Transferflüge nach und von Argentinien wurden darüber hinaus zur Analyse von interhemisphärischen Unterschieden und Austauschprozessen genutzt. Dazu wurde HALO, das vom DLR betriebe Forschungsflugzeug, mit 13 Messinstrumenten ausgestattet, die den atmosphärischen Zustand, die atmosphärische Zusammensetzung und dynamische Parameter durch in-situ und Fernerkundungsmessungen zeigen.

5. Untersuchung von welleninduziertem Austausch am antarktischen polaren Wirbel

Im Rahmen des hier analysierten Messflugs (ST17) wurde die Atmosphäre im Bereich des Subtropen-Strahlstroms und am Rand des polaren Wirbels untersucht. Außerdem führte der Flug durch ein Filament des antarktischen polaren Wirbels.

5.2. Der polare Wirbel zum Zeitpunkt von ST17

In diesem Abschnitt wird untersucht, ob die Daten des 17. Messflugs am 2. Oktober 2019 vom polaren Wirbel beeinflusst wurden. Zur Ermittlung von Position und Form des Wirbels werden Modelldaten aus der Vorhersage des ECMWF IFS und CLaMS, sowie Satellitenbeobachtungsdaten verwendet.

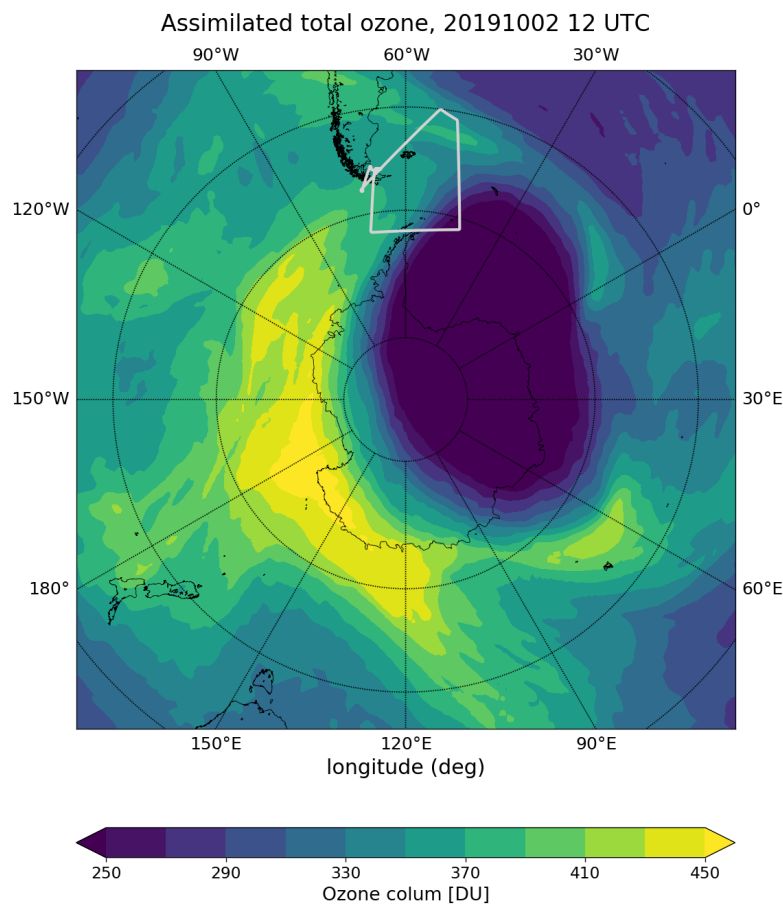


Abbildung 5.1.: Ozonsäule vom 02.10.2019 um 12 UTC. Die graue Linie zeigt den Flugweg.

Abbildung 5.1 zeigt die gesamte Ozonsäule über dem Südpol. Dabei basieren die Ozonwerte auf den Beobachtungsdaten von 6 Satelliten und wurden von einem Assimilationsprogramm des KNMI (**K**öniglich **N**iederländisches **M**eteorologisches **I**nstitut) berechnet (Van Der A et al., 2015). Die horizontale Auflösung dieser Daten beträgt $0,5^\circ$. Durch den O_3 -Abbau innerhalb des polaren Wirbels lässt sich dieser anhand der niedrigen O_3 -Werte gut erkennen. Das Ozonloch von 2019 war das kleinste seit 1982 und lag zum Zeitpunkt des Fluges nicht mehr zentral über der Antarktis (Rapp et al., 2021). Es ist zu erkennen, dass der Rand des Ozonlochs, bzw. des polaren Wirbels über der Antarktischen Halbinsel

und damit auch im Messgebiet lag und vom Flugweg (graue Linie) gekreuzt wurde. Das abgebildete Fünfeck wurde dabei im Uhrzeigersinn geflogen. Von besonderem Interesse in dieser Analyse ist der südliche Flugabschnitt über der Antarktischen Halbinsel, da diese eine mögliche Quelle von orographisch erzeugten Schwerewellen ist.

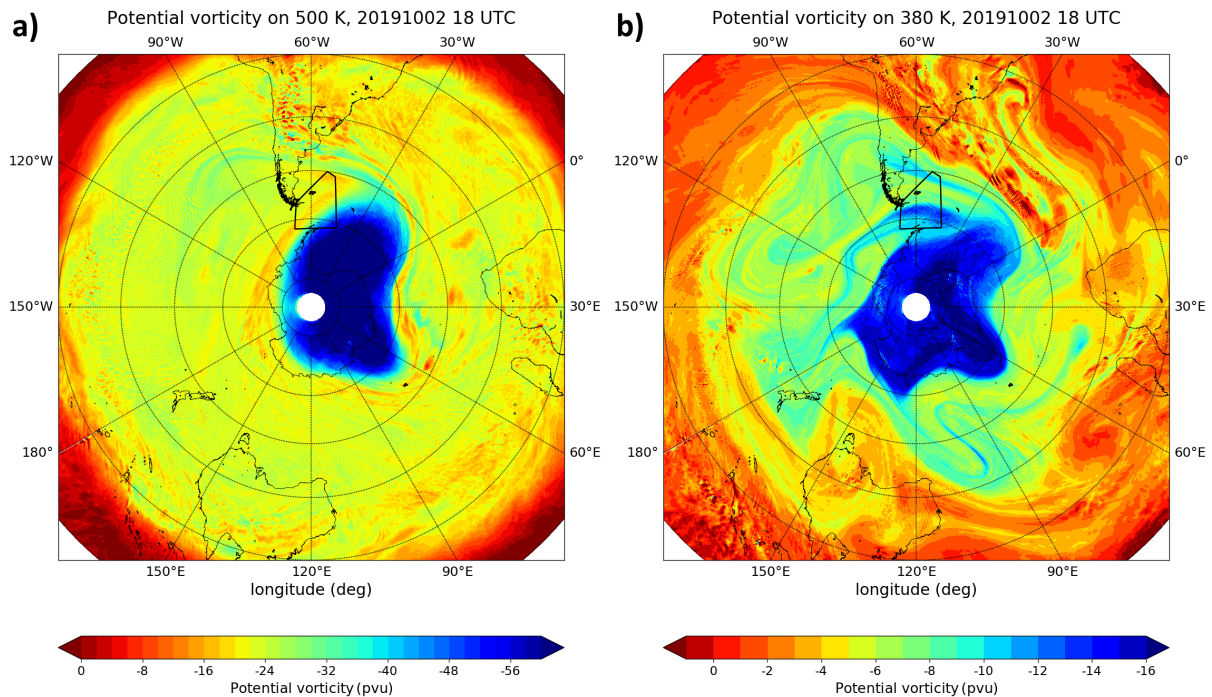


Abbildung 5.2.: Potentielle Wirbelstärke a) auf 500 K und b) auf 380 K am Flugtag um 18 UTC. Die schwarze Linie zeigt den Flugweg.

Bei den in Abbildung 5.2 verwendeten Modelldaten handelt es sich ECMWF IFS-Analyse-daten mit einer horizontalen Auflösung von $0,25^\circ$, die alle 6 Stunden vorliegen.

Die potentielle Wirbelstärke der 500 K-Isentrope ist in Abbildung 5.2a dargestellt. Anhand der niedrigen PV-Werte lässt sich der polare Wirbel gut identifizieren. Dabei stimmen die Form und die Position des Wirbels mit den Satellitendaten von Abbildung 5.1 überein. Der Rand des polaren Wirbels, der sich durch einen starken PV-Gradienten auszeichnet (Abschnitt 1.1.3), ist auf 500 K fast überall eindeutig definierbar. Nur um 30°W ist ein schwächerer Gradient, sowie eine Filamentenbildung zu beobachten. Auf dieser Höhe ist der Wirbel also größtenteils intakt und isoliert die Luftmassen innerhalb des polaren Wirbels von den Luftmassen aus den mittleren Breiten.

Ein etwas anderes Bild ergibt sich auf der 380 K-Isentrope, deren PV-Werte auf Abbildung 5.2b zu sehen ist. Diese Höhe entspricht der mittleren Flughöhe des südlichen Flugabschnitts (Abbildung 5.3). Ähnlich wie auf 500 K lassen sich der polare Wirbel selbst, sowie der Rand des Wirbels durch niedrige PV-Werte, bzw. einen erhöhten PV-Gradienten erkennen. Beide sind jedoch kleiner, als auf 500 K. Darüber hinaus ist der Wirbel auf 380 K deutlich verformter und es sind mehrere PV-Filamente zu sehen. Das bedeutet, dass der polare Wirbel auf dieser Höhe begonnen hat sich aufzulösen, wodurch sich die chemisch prozessierten Luftmassen aus dem Inneren mit Luftmassen aus den mittleren Breiten vermischen können. Im Messgebiet, also entlang des Flugwegs (schwarze Linie), sind zwei solche PV-Filamente vorhanden.

5. Untersuchung von welleninduziertem Austausch am antarktischen polaren Wirbel

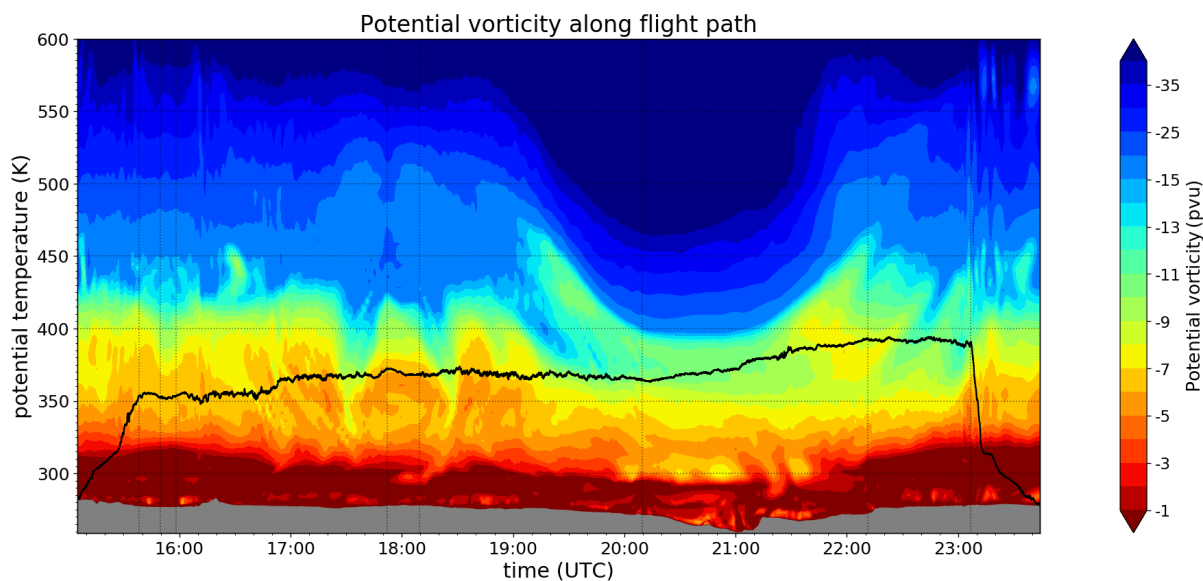


Abbildung 5.3.: Vertikalschnitt der potentiellen Wirbelstärke entlang des Flugwegs (schwarze Linie). Die vertikalen grauen Rasterlinien markieren die Kurven des Flugmusters.

Abbildung 5.3 zeigt den Vertikalschnitt der potentiellen Wirbelstärke entlang des Flugwegs um Informationen über die vertikale Struktur zu erhalten. Die hier verwendeten ECMWF IFS-Vorhersagedaten haben eine zeitliche Auflösung von 1 Stunde und eine räumliche Auflösung von 0.073° . Der in Abbildung 5.2 gezeigte polare Wirbel ist gut in der südöstlichen Ecke des Fünfecks zu erkennen, also um 20:10 UTC. Außerdem zeichnen sich die einzelnen PV-Filamente des Wirbels, z.B. um 17:40 UTC oder 18:20 UTC, deutlich im Vertikalschnitt ab. Der gewählte Flugweg von HALO liegt im untersten Bereich des vom Wirbel beeinflussten Teils der Atmosphäre. Beim südlichen Flugabschnitt (20:10 UTC bis 22:11 UTC) fällt außerdem ein Filament mit höheren Werten (zwischen -6 und -8 pvu) auf, das gegen Ende dieses Flugabschnitts durchflogen wurde.

Zur Übersicht zeigt Abbildung 5.4 auf beiden Bildern das O_3 -Mischungsverhältnis und die PV-Konturen auf 380 K, die aus den ECMWF-Vorhersagedaten berechnet wurden. Der Flugweg von SouthTRAC-Flug 17 ist mit dem mittleren Alter der Luft (Abbildung 5.4a) und einem passiven Wirbeltracer (Abbildung 5.4b) eingefärbt. Beide Größen kommen aus dem CLaMS-Modell, haben eine zeitliche Auflösung von 10 Sekunden und wurden auf den Flugweg interpoliert (siehe Abschnitt 2.3.2).

Wie schon Abbildung 5.2b angedeutet hat, hat der polare Wirbel auf 380 K, der mittleren Flughöhe des südlichen Flugabschnitts, keine scharfe Grenze. Stattdessen sind mehrere Filamente zu beobachten, die sich in allen vier dargestellten Modellgrößen zeigen. Der grundlegende Verlauf der beiden ECMWF-Größen und der beiden CLaMS-Größen stimmt über weite Teile des Flugs gut überein. Besonders das Filament in der nordöstlichen Ecke kann aufgrund des erhöhten O_3 -Mischungsverhältnisses, mittleren Alters und Wirbeltracer Anteils, sowie der kleineren PV-Werte eindeutig identifiziert werden. Bei der Feinstruktur zeigen sich sowohl zwischen beiden Modellen, als auch zwischen den einzelnen Größen Unterschiede. So hat zum Beispiel die älteste Luft nicht den größten Wirbeltraceranteil und auch nicht die niedrigsten PV-Werte, oder höchsten O_3 -Mischungsverhältnisse. Die erkennbaren Schwankungen im Alter und im Anteil der CLaMS-Größen entlang des Flug-

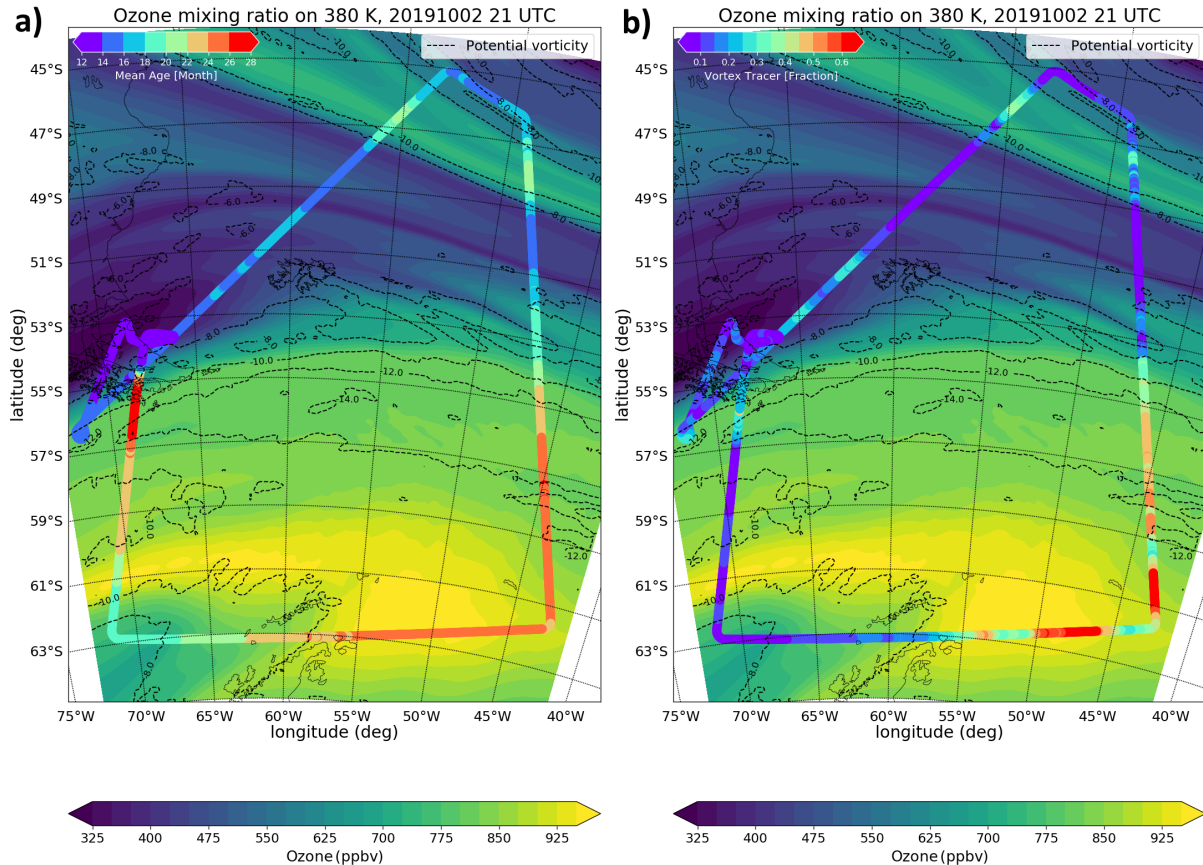


Abbildung 5.4.: Horizontalschnitte des O_3 -Mischungsverhältnisses auf 380 K um 21 UTC. Der Flugweg ist in a) mit dem mittleren Alter und in b) mit einem Wirbeltracer eingefärbt. Die Konturen der potentiellen Wirbelstärke (-6 , -8 , -10 , -12 , -14 pvu) werden durch die gestrichelten Konturenlinien dargestellt.

wegs können auf einen möglichen Austausch zwischen dem Filament des Wirbels und Luftmassen außerhalb des polaren Wirbels hindeuten. Dies ist beispielsweise auch über der Antarktischen Halbinsel auf dem südlichen Flugabschnitt zu sehen.

Die bisherigen Abbildungen 5.1 bis 5.4 der Satellitenbeobachtung und der Modelldaten haben gezeigt, dass die südöstliche Ecke des geflogenen Fünfecks am Messtag unterhalb des polaren Wirbels lag. Die Analysen legen außerdem nahe, dass Luftmassen aus dem polaren Wirbel nicht nur in diesem Bereich, sondern auch an mehreren anderen Stellen entlang des Flugwegs zu finden sind. Entlang des südlichen Flugabschnitts deuten die CLaMS-Daten einen Luftmassenwechsel im Bereich der Antarktischen Halbinsel an. Die ECMWF-Analysen, besonders Abbildung 5.3, zeigen außerdem, dass in diesem Abschnitt ein PV-Filament mit höheren Werten durchflogen wurde, wodurch ein erhöhter horizontaler PV-Gradient vorhanden ist. Die PV-Isoplethen verlaufen also teilweise vertikal und stehen senkrecht auf den Isentropen.

Ohne den Einfluss von chemisch prozessierten Luftmassen aus dem polaren Wirbel ergibt sich, aufgrund der komplementären Verteilung von Quellen und Senken von O_3 und N_2O , in der Stratosphäre eine Anti-Korrelation, solange keine zusätzlichen Quellen und Senken wirken. Außerdem sind O_3 und N_2O in der unteren Stratosphäre langlebig, was unter

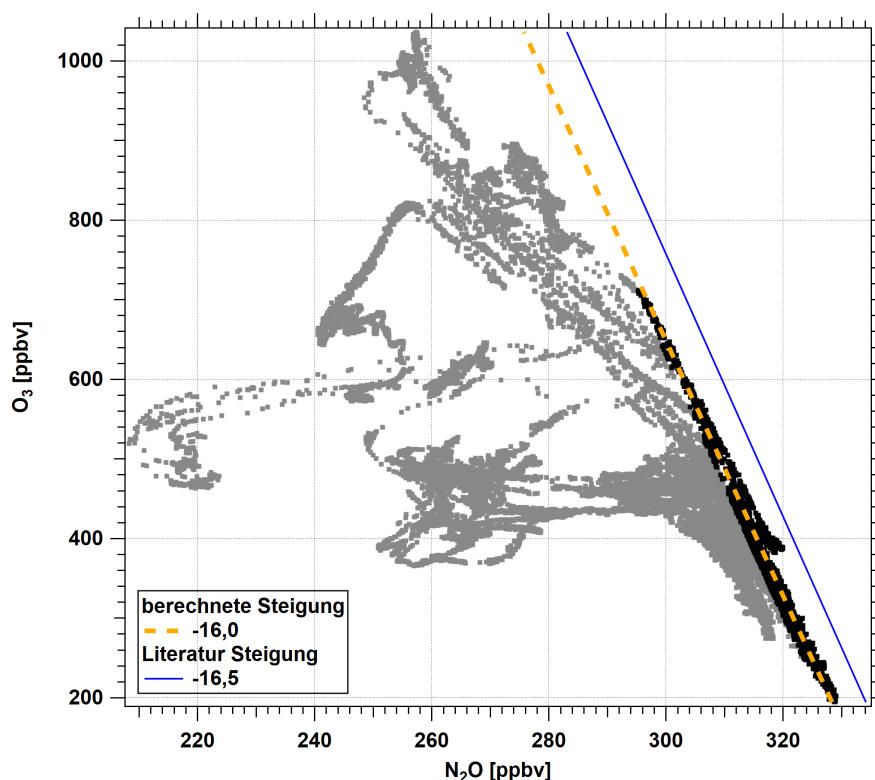


Abbildung 5.5.: O₃-N₂O-Korrelation. Die gestrichelte orange Linie zeigt die aus den schwarzen Datenpunkten berechnete Steigung. Die blaue Linie repräsentiert eine aus der Literatur übernommene Steigung.

dem Einfluss der großräumigen stratosphärischen Zirkulation zu kanonischen Korrelationen führt (Plumb und Ko, 1992), wie er z.B. in Abbildung 3.20 dargestellt ist (Abschnitt 1.4.1). Abweichungen von diesem Zusammenhang sind ein Hinweis darauf, dass die Luft vom polaren Wirbel beeinflusst wurde, die Luftmassen also aus Regionen stammen, in denen Ozonabbau stattgefunden hat. In der O₃-N₂O-Korrelation von SouthTRAC-Flug 17, die in Abbildung 5.5 dargestellt ist, ist dies bei einem Großteil der Datenpunkte erkennbar.

Um den Einfluss des antarktischen polaren Wirbels auf die Spurengasmessungen zu verdeutlichen, wurden für die Berechnung der O₃/N₂O-Steigung (orange Linie) in Abbildung 5.5 nur Datenpunkte verwendet, die nicht, bzw. möglichst wenig vom polaren Wirbel beeinflusst wurden. In der Abbildung sind diese Datenpunkte in schwarz dargestellt. Zur Berechnung wurde, ähnlich wie in Strahan et al. (1989) beschrieben, das Verhältnis von „verlorenem“ N₂O zu O₃ gebildet. D.h. $(N_2O^K - N_2O) / O_3$, wobei N₂O^K hier ein konstantes N₂O-Mischungsverhältnis bezeichnet. Anschließend wurden die O₃- und N₂O-Daten mit diesem Verhältnis gefiltert. Um nur Datenpunkte mit hohem N₂O-Mischungsverhältnis auf einer O₃-Isoplethe und damit eine möglichst große (negative) Steigung zu erhalten, wurde N₂O^K = 338,5 ppbv und der Filter $(N_2O^K - N_2O) / O_3 > 0,061$ gewählt.

Daraus ergibt sich eine Steigung von ungefähr -16. Dieser Wert repräsentiert Luftmassen aus den mittleren Breiten, also außerhalb des polaren Wirbels und ordnet sich gut in die Steigungen anderer Flugzeugmesskampagnen auf der Südhemisphäre ein. So zum Beispiel -16,5 aus der Studie von Strahan et al. (1989), -15 aus Waugh et al. (1997), oder -13 aus Tuck et al. (1997). Auch die Satellitenbeobachtungen und Modelldaten von Hegglin und

Shepherd (2007) liegen mit Steigungen von $-16,5$, bzw. -11 bis -13 in diesem Bereich. Wie in Abbildung 5.5 zu erkennen ist, wurde für die Berechnung der Steigung nur ein kleiner Teil der verfügbaren Daten verwendet. Ein Fit über alle stratosphärischen Messpunkte, d.h. ohne die Daten von Start und Landung ergibt eine Steigung von ungefähr $-3,8$ und verdeutlicht damit noch einmal den starken Einfluss der Luftmassen aus dem polaren Wirbel auf die Messungen.

5.3. Analyse meteorologischer Parameter

Um einen Überblick über die vorherrschenden Verhältnisse zu bekommen, werden in diesem Abschnitt verschiedene meteorologische Größen auf mögliche Einflussfaktoren bei den Messungen analysiert. Dazu werden wiederum ECMWF IFS-Vorhersagedaten verwendet.

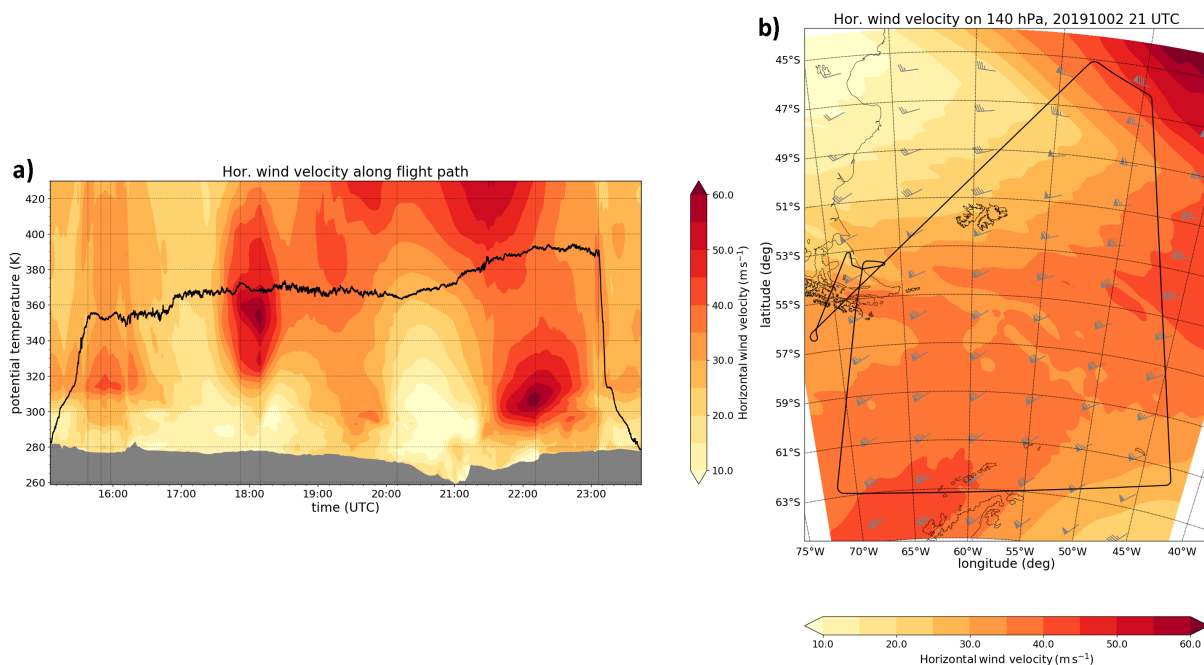


Abbildung 5.6.: a) Querschnitt entlang des Flugwegs und b) Horizontalschnitt auf 140 hPa von der horizontalen Windgeschwindigkeit. Die schwarze Linie zeigt den Flugweg. Die vertikalen grauen Rasterlinien markieren die Kurven des Flugmusters.

Abbildung 5.6a zeigt den Querschnitt der horizontalen Windgeschwindigkeit entlang des Flugwegs. Die vertikalen grauen Rasterlinien geben jeweils die Wendepunkte des Flugmusters an. In Abbildung 5.6b ist ein Horizontalschnitt auf 140 hPa dargestellt, dies entspricht ungefähr dem mittleren Luftdruck auf dem südlichen Flugabschnitt, also im Querschnitt zwischen 20:10 UTC und 22:11 UTC. Im Querschnitt sind 3 Bereiche mit hoher Windgeschwindigkeit zu erkennen. Ein Bereich liegt im Nordosten und ist auch auf dem Horizontalschnitt zu beobachten. Dabei handelt es sich um den Subtropen-Strahlstrom, der im Modell Geschwindigkeiten über 80 m s^{-1} erreicht. Dieser wurde durch den gewählten Flugweg zumindest angeschnitten. Der Querschnitt zeigt, dass das Windmaximum unterhalb des Flugwegs lag. Das nördlichere PV-Filament (siehe Abbildung 5.4) verläuft in diesem Abschnitt, also entlang des Subtropen-Strahlstroms. Zwischen der Südspitze

5. Untersuchung von welleninduziertem Austausch am antarktischen polaren Wirbel

Südamerikas und der Antarktischen Halbinsel (südwestliche Ecke) liegt der Polarfront-Strahlstrom auf ungefähr 310 K und damit deutlich unterhalb des Flugwegs. Beim östlichen und südlichen Flugabschnitt sind im Querschnitt oberhalb des Flugwegs ebenfalls erhöhte Windgeschwindigkeiten zu beobachten. Dabei handelt es sich um den unteren Teil des Polarnacht-Strahlstroms, der den polaren Wirbel umgibt. Die Windpfeile zeigen außerdem, dass der Wind auf 140 hPa größtenteils aus südwestlichen bis westlichen Richtungen gekommen ist.

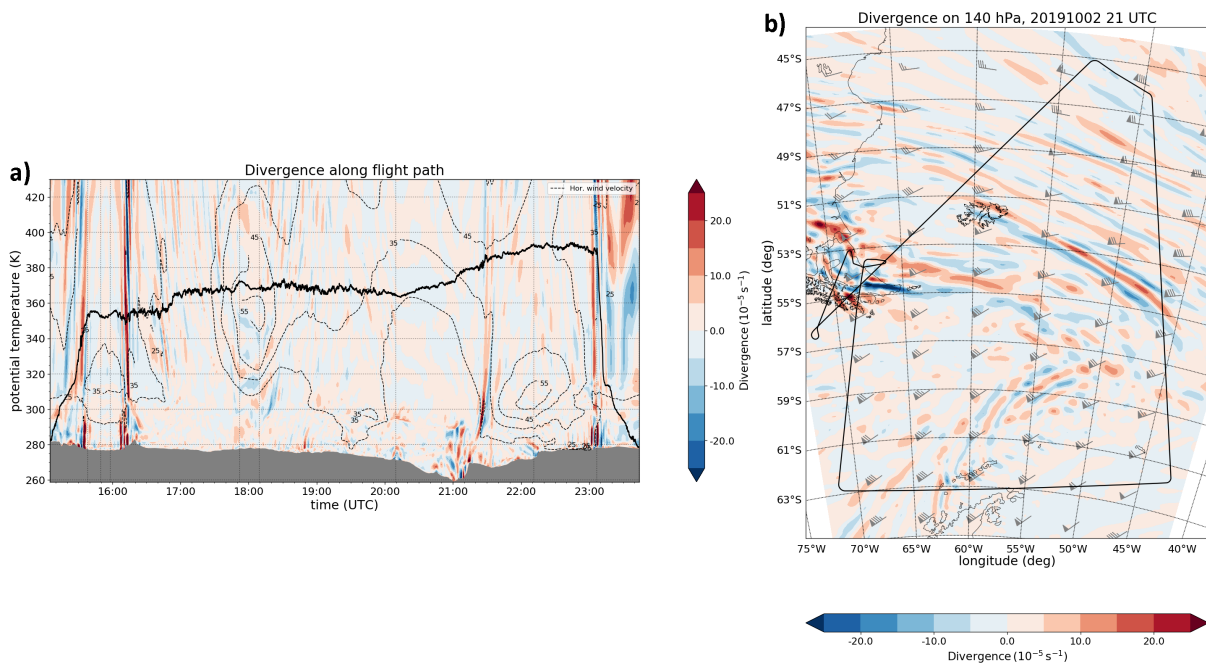


Abbildung 5.7.: a) Querschnitt entlang des Flugwegs und b) Horizontalschnitt auf 140 hPa von der horizontalen Divergenz der Windgeschwindigkeit. Die schwarze Linie zeigt den Flugweg. Die schwarzen gestrichelten Linien zeigen Konturen der horizontalen Windgeschwindigkeit (25 , 35 , 45 und 55 m s^{-1}). Die vertikalen grauen Rasterlinien markieren die Kurven des Flugmusters.

Zur Untersuchung von Wellenausbreitung von Schwerewellen zeigt Abbildung 5.7 die horizontale Divergenz der Geschwindigkeit im Querschnitt (5.7a) und im Horizontalschnitt (5.7b). Beide Bilder zeigen, dass die Anden, die am Anfang und am Ende des Fluges überflogen wurden, die stärkste Quelle von hohen Divergenzwerten sind. Eine weitere Quelle scheint der Subtropen-Strahlstrom zu sein. Wie Abbildung 5.6 zeigt, liegt dieser im Nordosten der Karte. Südlich von ihm sind parallel verlaufende Wellenphasen sowohl im Horizontalschnitt, als auch im Querschnitt zu beobachten, die auf dem nördlichen und östlichen Flugabschnitt liegen. Eine dritte Quelle von Wellen sind die Südlichen Shetlandinseln auf dem südlichen Flugabschnitt, die ungefähr 150 km vor der Antarktischen Halbinsel liegen. Vor allem in der Troposphäre (siehe Abbildung 5.3) sind unterhalb von 300 K erhöhte Divergenzwerte zu sehen. Dabei fällt auf, dass sich das Wellensignal auf dem Weg durch die Atmosphäre auf 140 hPa abschwächt. Passend zum Wellenmuster zeigen die Windpfeile eine südwestliche Anströmung, auch auf niedrigeren Höhen. Außerdem ist zu beobachten, dass die Inseln direkt vor der Antarktischen Halbinsel auf 140 hPa, trotz gleicher Anströmrichtung, keine Wellen erzeugen, bzw. diese gedämpft werden. Dies lässt

auf etwas andere Bedingungen schließen. So liegt zum Beispiel eine Tropopausenfalte zwischen den Südlichen Shetlandinseln und der Antarktischen Halbinsel. Außerdem sind im Vertikalprofil (nicht gezeigt) an beiden Standorten Unterschiede bei Windrichtung und -geschwindigkeit zu beobachten. Möglicherweise führt dies zur Entstehung einer kritischen Schicht, die die Wellenausbreitung beeinflusst.

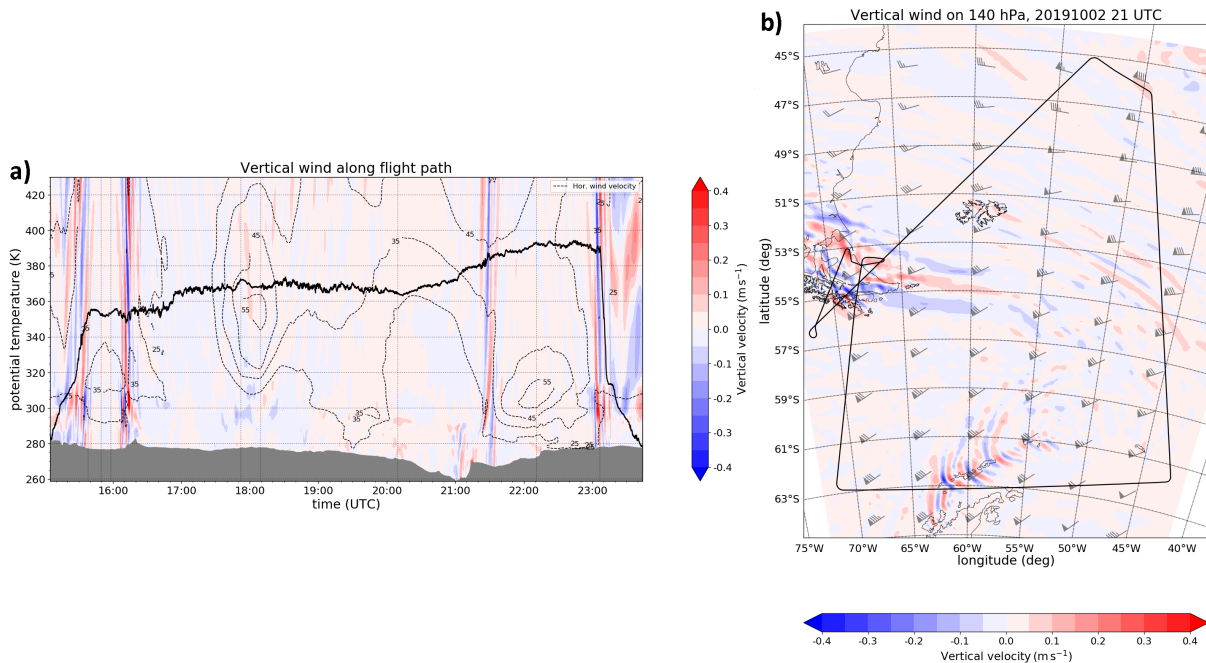


Abbildung 5.8.: a) Querschnitt entlang des Flugwegs und b) Horizontalschnitt auf 140 hPa von der vertikalen Windgeschwindigkeit. Die schwarze Linie zeigt den Flugweg. Die schwarzen gestrichelten Linien zeigen Konturen der horizontalen Windgeschwindigkeit (25 , 35 , 45 und 55 m s^{-1}). Die vertikalen grauen Rasterlinien markieren die Kurven des Flugmusters.

Abbildung 5.8 zeigt die vertikale Windgeschwindigkeit im Querschnitt entlang des Flugweges (5.8a) sowie im Horizontalschnitt auf 140 hPa (5.8b). Dabei sind im Querschnitt hohe vertikale Windgeschwindigkeiten besonders am Anfang und am Ende des Fluges zu beobachten. Da in diesen Abschnitten über, bzw. im Lee (bei südwestlicher Anströmung) der Anden geflogen wurde, handelt es sich dabei wahrscheinlich um Gebirgswellen. Auf dem südlichen Flugabschnitt, also zwischen 20:10 UTC und 22:11 UTC, ist ein weiteres starkes Vertikalwindssignal zu erkennen, das vom Boden bis in die Stratosphäre reicht (um 21:30 UTC). Der Horizontalschnitt zeigt, dass dieses durch die Südlichen Shetlandinseln hervorgerufen wird, deren Berge Höhen bis 2300 m erreichen. Das dadurch erzeugte Wellensignal ist nicht nur direkt über dem Berg, bzw. im Lee zu beobachten, sondern breitet sich „V“-förmig (Eckermann et al., 2015), horizontal in der Atmosphäre aus. Dadurch konnte das Wellensignal auch vom Flugzeug gemessen werden, obwohl der Flugweg nicht direkt über die Berge der Südlichen Shetlandinseln führte. Im Gegensatz zur horizontalen Divergenz der Geschwindigkeit in Abbildung 5.7 schwächt sich die vertikale Windgeschwindigkeit auch nicht, bzw. deutlich weniger stark mit der Höhe ab. Außerdem ist das Wellenmuster der Gebirgswellen ausgeprägter und damit besser sichtbar, als bei der Divergenz.

5. Untersuchung von welleninduziertem Austausch am antarktischen polaren Wirbel

Die Untersuchung der meteorologischen Parameter der Modelldaten hat gezeigt, dass die Südlichen Shetlandinseln Schwerewellen angeregt haben. Diese wurden vom Flugweg gekreuzt und befinden sich zudem in einer Region unterhalb des Polarwirbels, bzw. im Bereich es PV-Filaments.

5.4. Zeitreihen des Messflugs

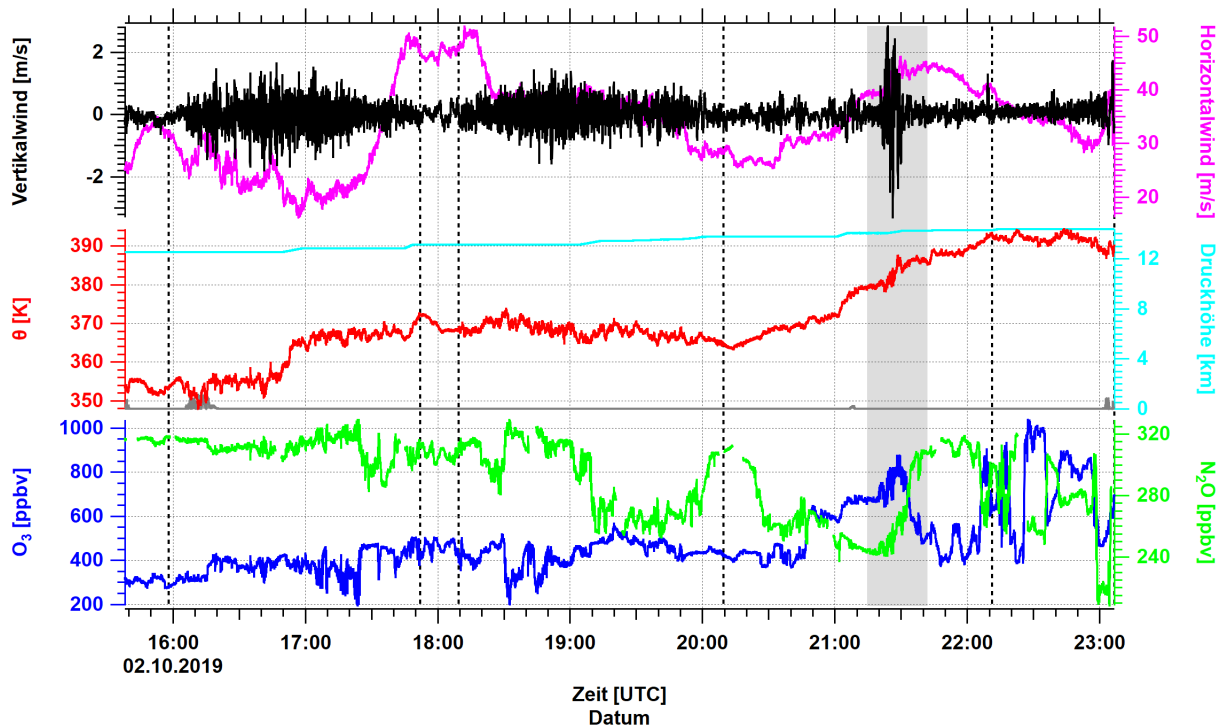


Abbildung 5.9.: Zeitreihen des Messflugs ohne Start und Landung. Oben: vertikale (magenta) und horizontale (schwarz) Windgeschwindigkeit. Mitte: potentielle Temperatur (rot), Topographie (grau; aus SRTM15+-Daten interpoliert (Tozer et al., 2019); in km) und Druckhöhe (türkis). Unten: O₃- (blau) und N₂O-Mischungsverhältnisse (grün). Der grau schattierte Bereich markiert einen Teil des südlichen Flugabschnitts. Die vertikalen schwarzen Striche markieren die Kanten des Fünfecks.

Abbildung 5.9 zeigt die Zeitreihen einiger wichtiger Messgrößen von Flug 17 zur Übersicht und Identifizierung von markanten Flugabschnitten für weitere Analysen, die möglicherweise auch schon in den Abschnitten 5.2 und 5.3 hervorgehoben wurden.

Bei der vertikalen Windgeschwindigkeit fallen während des Fluges drei Bereiche besonders auf. Die ersten beiden liegen zwischen 16:00 und 17:50 UTC, bzw. 18:10 und 20:00 UTC. Sie zeigen einen ähnlichen Verlauf und erreichen Windgeschwindigkeiten von $\pm 2 \text{ m s}^{-1}$. Ein Blick auf den Horizontalwind zeigt um 17:45 UTC und um 18:15 UTC ein Maximum mit Windgeschwindigkeiten von jeweils über 50 m s^{-1} . Diese hohen Werte lassen vermuten, dass in der Nähe eines Strahlstroms geflogen wurde. Die ECMWF-Modelldaten der horizontalen Windgeschwindigkeit von Abbildung 5.6 bestätigen diese Vermutung und zeigen, dass es sich um den Subtropen-Strahlstrom handelt. Die beobachteten Windgeschwindigkeiten stimmen außerdem gut mit dem Modell überein.

Der dritte auffällige Abschnitt wurde um zirka 21:30 UTC (21:15 bis 21:42 UTC) durchflogen, liegt somit im südlichen Flugabschnitt und wurde in der Abbildung grau hinterlegt. Abbildung 5.8 zeigt, dass dieses Signal auch in Modell vorhanden ist und durch die Südlichen Shetlandinseln hervorgerufen wurde. Die vertikale Windgeschwindigkeit hat eine hohe Variabilität und steigt innerhalb wenigen Minuten um mehr als das Dreifache, bleibt für ungefähr 10 Minuten auf diesem Niveau und geht dann genauso schnell wieder auf die vorigen Werte zurück. Dabei wurden in der Spitze Geschwindigkeiten über $3,3 \text{ m s}^{-1}$ erreicht. Auch die potentielle Temperatur hat zu dieser Zeit eine hohe Variabilität und fluktuiert um bis zu 4,6 K und zeigt teilweise auch ein turbulentes Verhalten. Die Druckhöhe zeigt, dass in jedem Bereich zum Teil mehrere Flughöhenwechsel stattgefunden haben. Sowohl die Winddaten, als auch die potentielle Temperatur und Druckhöhe wurden mit dem BAHAMAS gemessen (Krautstrunk und Giez, 2012).

Die in der Abbildung dargestellten Spurengase N₂O und O₃ wurden von UMAQS, bzw. FAIRO gemessen. Das UMAQS-Messgerät ist in Abschnitt 3.3.1 beschrieben. FAIRO ist ein Chemielumineszenzdetektor mit einer Präzision von $\approx 0,3$ ppbv (bei 10 Hz) und einer Ungenauigkeit von ungefähr 1,5% (Zahn et al., 2012). Beide Spurengase zeigen vor allem in der ersten Flughälfte (bis ca. 19:10 UTC) größtenteils das erwartete anti-korrelierte Verhalten. In der zweiten Flughälfte und speziell gegen 20:15 UTC ist dies stellenweise nicht mehr der Fall. Dies ist ein weiterer Hinweis auf den Einfluss des polaren Wirbels auf die Spurengasmischungsverhältnisse und stimmt ebenfalls mit den Modelldaten von CLaMS (Abbildung 5.4) überein.

Im dritten, durch die vertikale Windgeschwindigkeit definierten, grau hinterlegten Abschnitt (21:15 - 21:42 UTC), schwankt das N₂O-Mischungsverhältnis (von Peak zu Peak) um ungefähr 19,1 ppbv und das O₃-Mischungsverhältnis um zirka 144,2 ppbv. Auch andere, hier nicht abgebildete Spurengase, zeigen eine erhöhte Variabilität. Es ist außerdem zu beobachten, dass sich der Zusammenhang von N₂O und O₃ innerhalb des markierten Abschnitts ändert. Während auf dem südlichen Flugabschnitt vor 21:19 UTC kein fester Zusammenhang zwischen beiden Spurengasen zu erkennen ist, die Zeitreihen also nicht-korrelieren, stellt sich danach, d.h. mit dem Beginn der starken Fluktuationen ein korrelierter Zusammenhang ein. Ab zirka 21:28 UTC ändert sich das Verhältnis von N₂O und O₃ erneut und es ergibt sich ein anti-korrelierter Zusammenhang. Der in Abschnitt 5.2, bzw. Abbildung 5.4 gezeigte Übergang zwischen unterschiedlichen Luftmassen, ist demnach auch in den Zeitreihen der beiden bemessenen Spurengasen sichtbar.

Auffällig ist außerdem der N₂O-Peak um 23 UTC, bei dem das N₂O-Mischungsverhältnis die niedrigsten Werte (208,3 ppbv) des gesamten Fluges erreicht. Das O₃-Mischungsverhältnis sinkt ebenfalls (um zirka 180 ppbv), aber im Vergleich zum N₂O deutlich schwächer. Damit sind N₂O und O₃ in diesem Bereich sogar eher korreliert, als anti-korreliert. Die geringen N₂O-Mischungsverhältnisse sind ein Hinweis darauf, dass Luft aus dem polaren Wirbel gemessen wurde und in diesem Bereich ein Filament durchflogen wurde. Dieses Merkmal ist ebenfalls in den CLaMS-Daten zu beobachten (Abbildung 5.4).

5.5. Untersuchung der O₃-N₂O-Korrelationen

Um mögliche Mischungsprozesse zu identifizieren und das in Abbildung 5.9 gezeigte Verhalten von N₂O und O₃ genauer zu untersuchen, wird die Spurengaskorrelation beider Größen analysiert (Abschnitt 2.1.2).

5. Untersuchung von welleninduziertem Austausch am antarktischen polaren Wirbel

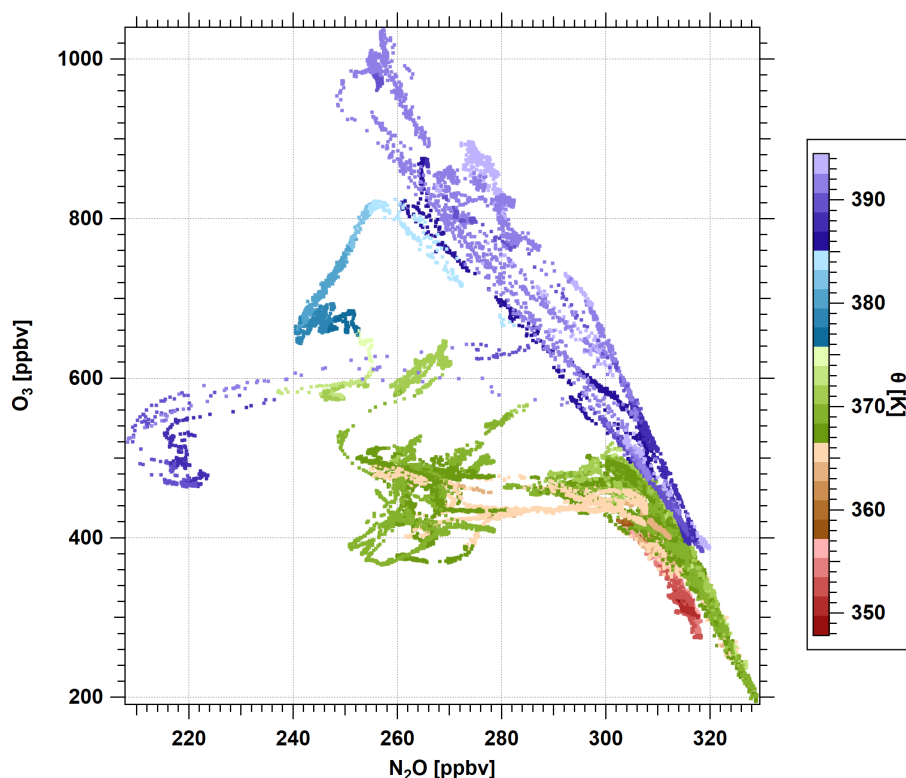


Abbildung 5.10.: O₃-N₂O-Korrelation in Abhängigkeit der potentiellen Temperatur, ohne die Datenpunkte von Start und Landung.

Abbildung 5.10 zeigt die O₃-N₂O-Korrelation, die mit der potentiellen Temperatur eingefärbt wurde. Wie schon in Abbildung 5.5 gezeigt wurde, ist O₃-N₂O-Korrelation stark durch den polaren Wirbel und dem damit verbundenen Ozonabbau beeinflusst. Dies zeigt sich in den Teilen der Korrelation, in denen es keinen festen (anti-korrelierten) Zusammenhang zwischen N₂O und O₃ gibt, bzw. in denen sich die O₃/N₂O-Steigung verändert (Hegglin und Shepherd, 2007). Im Ausschnitt zwischen 240 und 260 ppbv N₂O und 640 bis 820 ppbv O₃ (blaue Farben) ist in der Abbildung ein Bereich zu erkennen, in dem die O₃/N₂O-Steigung umgekehrt ist (d.h. bei steigendem N₂O steigt auch O₃ an), also die Spurengase korrelieren und die Datenpunkte zudem kompakt sind. Diese positive Korrelation entsteht bei der Mischung zwischen zwei sehr verschiedenen Luftmassen, in diesem Fall durch Mischung von Luftmassen außerhalb und innerhalb des antarktischen polaren Wirbels (Strahan et al., 1989; Proffitt et al., 1992; Müller et al., 2001). In der Zeitreihe (Abschnitt 5.4) liegt diese Mischungslinie im grau markierten Intervall von Abbildung 5.9 um ungefähr 21:25 UTC. Damit tritt sie außerdem in einer Region auf, die durch Schwerewellen, ausgelöst von den Südlichen Shetlandinseln, beeinflusst wurde (Abbildung 5.7).

Bei den Datenpunkten, die einen anti-korrelierter Verlauf zeigen (N₂O > 295 ppbv, O₃ < 700 ppbv), ist eine Höhenabhängigkeit mit der potentiellen Temperatur zu beobachten. Die O₃/N₂O-Steigung ist in den unterschiedlichen Temperaturbereichen sehr ähnlich. In der Studie von Waugh et al. (1997) wird dies durch einen unterschiedlich starken Ozonabbau und chemische Prozessierung auf verschiedenen Höhen erklärt wodurch die O₃-Isoplethen und die Isentropen nicht perfekt übereinander liegen (Sankey und Shepherd, 2003). Die Abhängigkeit von O₃ mit der potentiellen Temperatur hat also eine chemische und keine

dynamische Ursache (Proffitt et al., 1990).

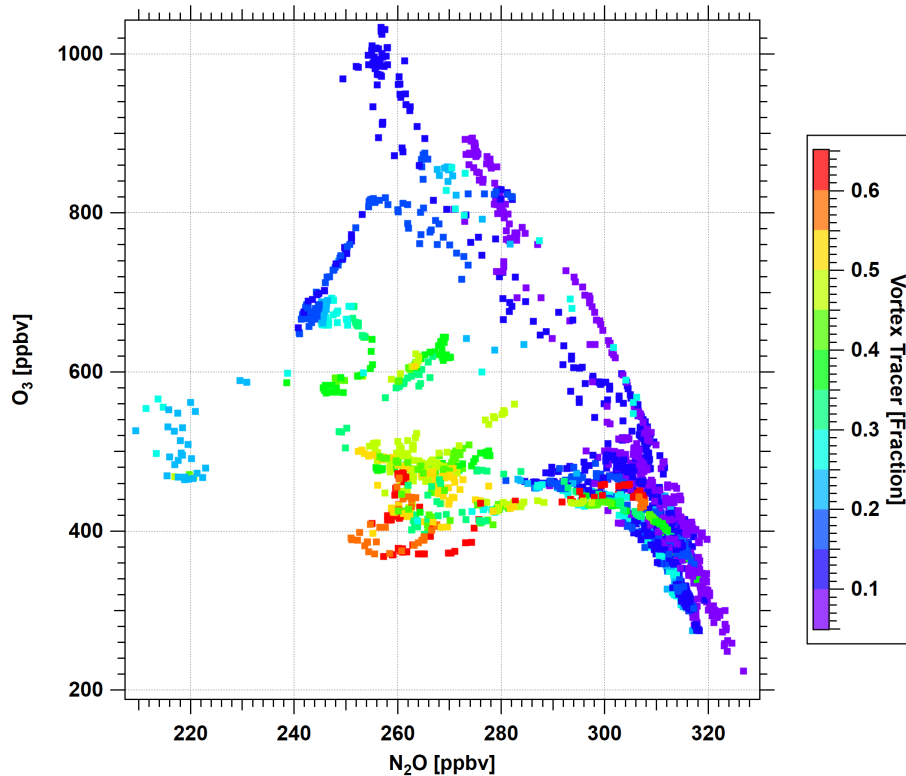


Abbildung 5.11.: Die O_3 - N_2O -Korrelation in Abhängigkeit eines CLaMS-Wirbeltracers, ohne die Datenpunkte von Start und Landung.

Um zu verdeutlichen, welcher Teil der Korrelation durch den polaren Wirbel beeinflusst wurde, zeigt Abbildung 5.11 die O_3 - N_2O -Korrelation eingefärbt mit dem künstlichen Wirbeltracer aus dem CLaMS-Modell (Abschnitt 2.3.2). Die Intervalle der Farbskala sind die gleichen, wie in Abbildung 5.4b. Die Datendichte ist im Vergleich zu Abbildung 5.4 geringer, da die CLaMS-Daten nur alle 10 Sekunden vorliegen. Es ist zu erkennen, dass die Datenpunkte, die die Anti-Korrelationsgerade bilden, größtenteils einen niedrigen Anteil aus dem Wirbel besitzen. Bei den Datenpunkten außerhalb der Geraden ist der Anteil aus dem polaren Wirbel erhöht. Es fällt dennoch auf, dass die niedrigsten N_2O -Mischungsverhältnisse nicht mit dem höchsten Wirbeltraceranteil übereinstimmen. In dem kompakten, korrelierten Bereich liegt der Luftmassenanteil aus dem Polarwirbel zwar bei vergleichsweise niedrigen Werten von 0,13 bis 0,20, dennoch ist ein Übergangsbereich von Luftmassen mit einem höheren Wirbeltraceranteil zu Luftmassen mit einem niedrigeren Anteil zu beobachten. Da es sich bei den CLaMS-Daten um Modelldaten handelt, sind gewisse Abweichungen zu den Messungen nicht überraschend. Diese lassen sich möglicherweise durch im Modell nicht aufgelöste kleinskalige Prozesse, abweichende Wirbelgrenzen, Filamente und unterschiedliche Abstiegseschwindigkeiten im Wirbelkern und Wirbelrand (Greenblatt, 2002) erklären. Auch eine Diskontinuität bei der Initialisierung des Tracers (1 im Wirbel, 0 außerhalb) wäre eine mögliche Erklärung. Im Allgemeinen stimmen die Beobachtungsdaten mit den Modelldaten von CLaMS gut überein.

5.6. Einfluss der Turbulenz und Mischung

Um die Eigenschaften und den Einfluss der Schwerewellen und möglicher Turbulenz genauer zu untersuchen wird eine Wavelet-Analyse durchgeführt. Dazu stehen hoch aufgelöste Daten mit einer Messfrequenz von 10 Hz, bzw. teilweise von 100 Hz, die mit BAHAMAS gemessen wurden, zur Verfügung.

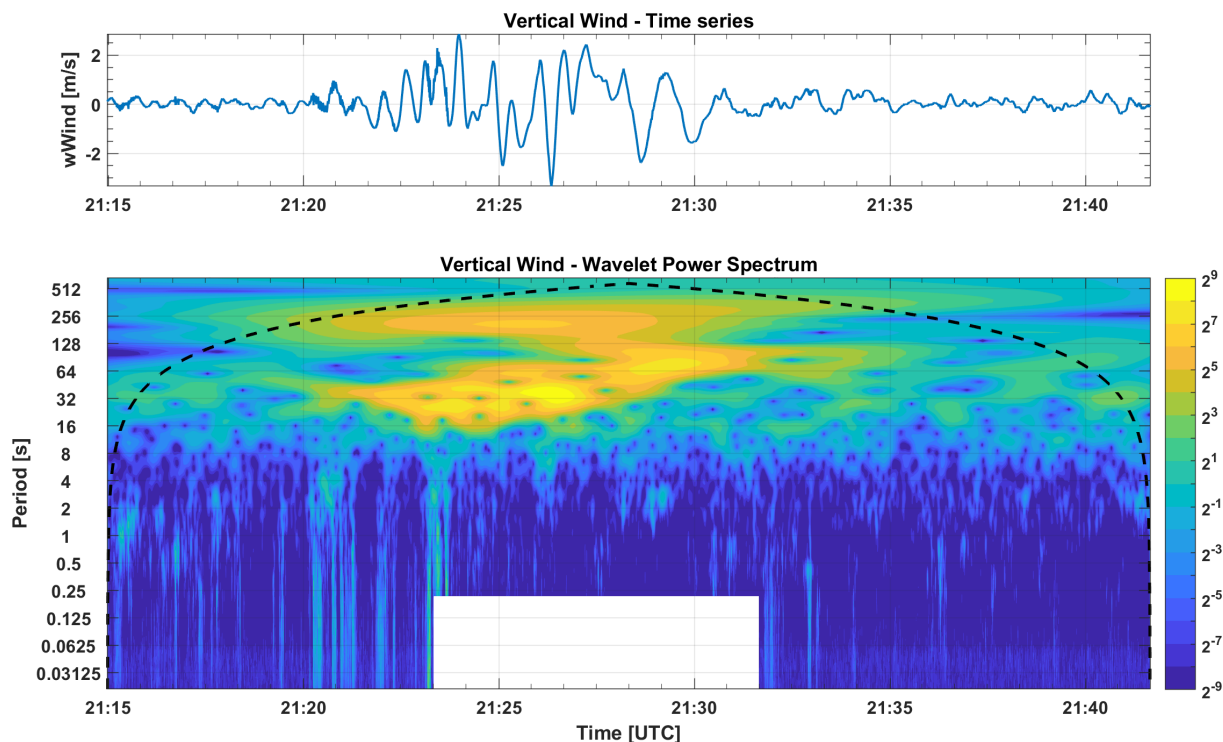


Abbildung 5.12.: Oben: Zeitreihe der vertikalen Windgeschwindigkeit zwischen 21:15:00 UTC und 21:41:40 UTC. Unten: Wavelet-Analyse der vertikalen Windgeschwindigkeit. Die gestrichelte Linie zeigt den COI.

Abbildung 5.12 zeigt die kontinuierliche Wavelet-Transformation der vertikalen Windgeschwindigkeit für den Bereich der starken Wellenaktivität auf dem südlichen Flugabschnitt, d.h. von 21:15:00 UTC bis 21:41:40 UTC (grau markierter Bereich in Abbildung 5.9). Aus der Abbildung der Zeitreihen und speziell der Druckhöhe geht hervor, dass HALO im hier untersuchten Zeitraum um ungefähr 185 m gestiegen ist. Für den Bereich zwischen 21:23:20 UTC und 21:31:39 UTC stehen aus diesem Grund keine 100 Hz-Turbulenzdaten zur Verfügung und es muss auf 10 Hz-Daten zurückgegriffen werden. Damit erklärt sich auch der weiße Kasten bei kleinen Perioden in der Abbildung. Bei den 10 Hz-Daten und den verwendeten Einstellungen der Wavelet-Transformation kann eine minimale Periode von 0,207 s aufgelöst werden, das entspricht einer Wellenlänge von 50,28 m (bei einer Fluggeschwindigkeit von zirka $242,9 \text{ m s}^{-1}$). In den zwei Bereichen, die mit den 100 Hz-Daten analysiert werden konnten, liegt die minimale Periode bei 0,021 s, bzw. einer Wellenlänge von 5,03 m.

Im Zeitintervall zwischen ungefähr 21:21 UTC und 21:31 UTC, also über ungefähr 10 Minuten, ist auf der Abbildung ein Wellensignal, das sich durch hohe Wavelet-Leistungen bei Perioden zwischen 16 und 128 Sekunden zeigt, zu erkennen. Dies entspricht einer Wellenlänge von 3,9 bis 31,1 km und repräsentiert damit großskalige Wellen, die auf der

Zeitreihe der vertikalen Windgeschwindigkeit (oben) gut zu sehen sind. Neben diesem starken Signal bei großen Skalen sind außerdem über den gesamten Abschnitt immer wieder Teilbereiche mit erhöhter Leistung auf kleinen Skalen zu erkennen. Besonders deutlich ist dies vor dem Steigflug ab zirka 21:20 UTC zu sehen. Bis hinunter zu den kleinsten auflösbaren Perioden von 0,021 s (zirka 5,1 m) ist erhöhte Wavelet-Leistung vorhanden. Dies ist ein klarer Hinweis auf mögliche Turbulenz in diesem Flugabschnitt, die durch die orographischen Wellen induziert wurde.

Bei einer Periode von 0,03 bis 0,06 s ist über den gesamten Zeitraum (der 100 Hz-Daten) ein Band mit leicht erhöhter Leistung zu beobachten. Bei diesem Signal handelt es sich nicht um ein atmosphärisches Signal, sondern um eine messtechnische Störung. Der Nasenmast von HALO, an dem sich die Sensoren zur Messung der Windgeschwindigkeit befinden, kann unter Umständen, z.B. bei Turbulenz, ins Schwingen kommen. Die Eigenfrequenz des Mastes liegt laut DLR Angaben bei zirka 18 Hz, bzw. einer Periode von ungefähr 0,056 s.

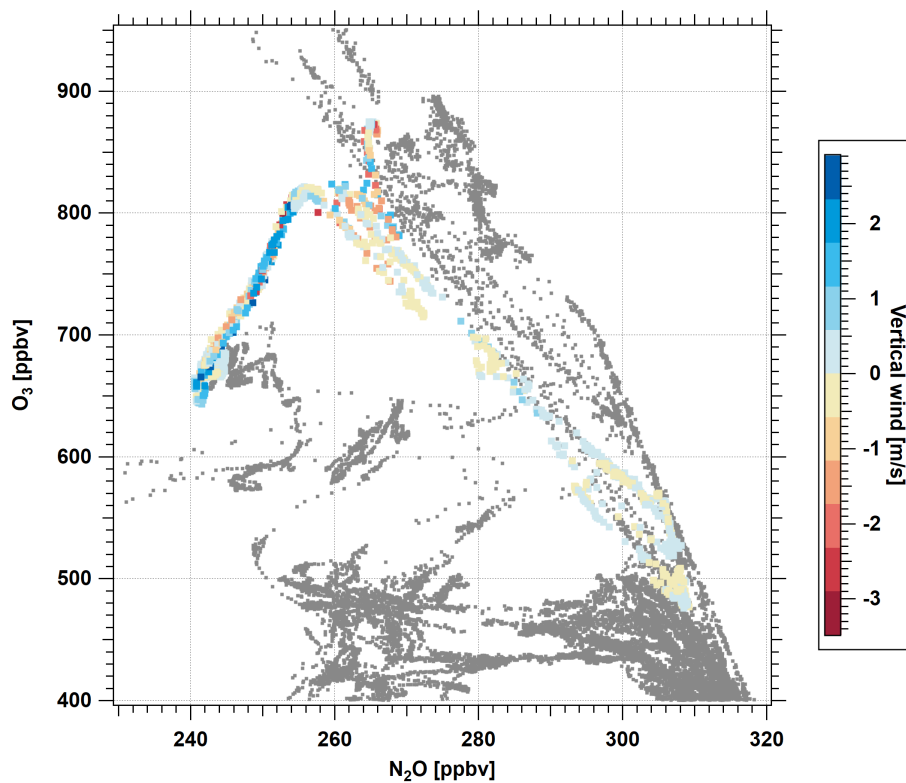


Abbildung 5.13.: Ausschnitt der O₃-N₂O-Korrelation, in Abhängigkeit der vertikalen Windgeschwindigkeit für den in Abbildung (5.12) untersuchten Bereich zwischen 21:15:00 UTC und 21:41:40 UTC.

Die Abschnitte 5.4 und 5.5 haben gezeigt, dass die orographischen Schwerewellen der Südlichen Shetlandinseln in dem Bereich der O₃-N₂O-Korrelationen auftreten, die positiv korreliert ist. Um dies genauer zu untersuchen, wurde in Abbildung 5.13 der entsprechende Teil des südlichen Flugabschnitts mit der vertikalen Windgeschwindigkeit eingefärbt, die in Abbildung 5.12 analysiert wurde. Dabei treten die höchsten vertikalen Windgeschwindigkeiten im korrelierten Teil der O₃-N₂O-Korrelation, bzw. teilweise direkt am Übergang zum anti-korrelierten Teil auf. Die gemessenen Gebirgswellen verbinden damit einen Bereich mit unkorrelierten Daten, also Luftmassen, die stark vom polaren Wirbel

5. Untersuchung von welleninduziertem Austausch am antarktischen polaren Wirbel

beeinflusst wurden, mit Luftmassen, die weniger stark beeinflusst wurden. Auffällig ist außerdem, dass die Datenpunkte erst mit dem Vorhandensein von starker Turbulenz und dem Beginn der großen Fluktuationen um ungefähr 21:21 UTC in Abbildung 5.12, die kompakte korrelierte Form einer Mischungslinie annehmen. Davor sind die Datenpunkte unkorreliert und auch danach wieder weniger kompakt. Möglicherweise ist der korrelierte Teil in der O_3 - N_2O -Korrelation ein Resultat von turbulenter Mischung der unterschiedlichen Luftmassen in dieser Region.

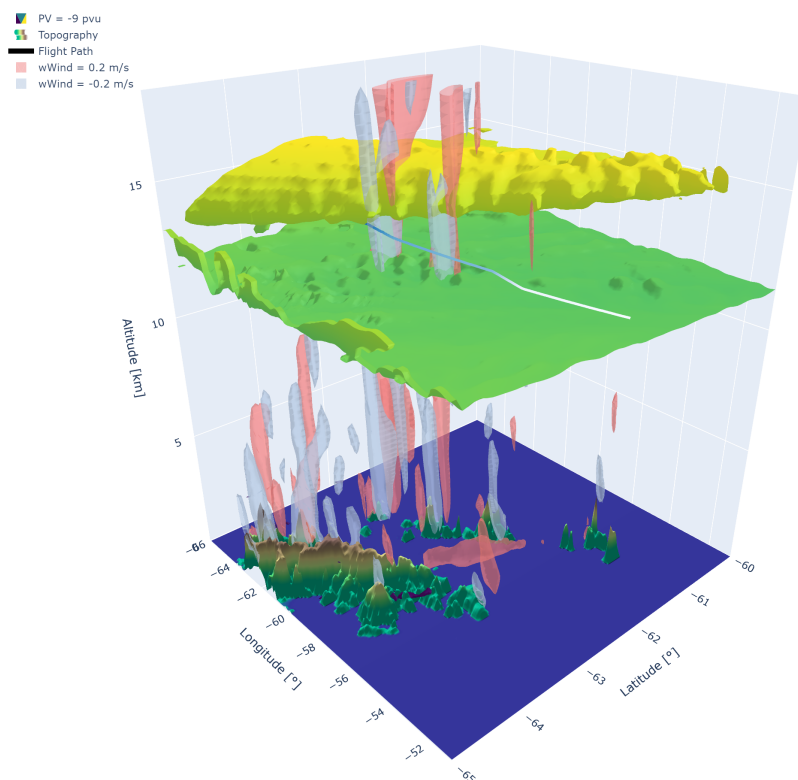


Abbildung 5.14.: 3-dimensionale Darstellung des südlichen Flugabschnitts über der Antarktischen Halbinsel. Die gelb-grüne Fläche zeigt die -9 pvu-Kontur. Die durchsichtigen roten und blauen Flächen stellen $\pm 0,2$ $m\ s^{-1}$ -Konturen der vertikalen Windgeschwindigkeit dar. Der Flugweg ist durch die blau-weiße Linie dargestellt.

Zusammenfassend zeigt Abbildung 5.14 eine 3-dimensionale Darstellung von potentieller Wirbelstärke, nämlich der -9 pvu-Kontur (gelb-grüne Fläche), sowie die $\pm 0,2$ $m\ s^{-1}$ -Konturen der vertikalen Windgeschwindigkeit (rot und blau) und liefert somit einen Eindruck von den Strukturen im 3-dimensionalen Raum.

Ähnlich wie Abbildung 5.8 verdeutlicht die Abbildung noch einmal, dass von den Südlichen Shetlandinseln orographische Schwerewellen ausgelöst werden. Das markante Wellenmuster im Vertikalwind reicht bis in die Stratosphäre (über 18 km). In 15 km Höhe ist außerdem die Struktur des PV-Filaments zu erkennen, das auch in Abbildung 5.3 zu sehen ist. Es liegt ungefähr 1,4 km, bzw. 20 K oberhalb der horizontalen -9 pvu Fläche. Im gezeigten Bildausschnitt hat das Filament keine Verbindung zur PV-Isofläche. Sowohl die Spurengasmessungen (Abbildung 5.10), als auch die CLaMS-Daten (Abbildung 5.4) zeigen, dass die Luftmassen innerhalb des Filaments weniger vom polaren Wirbel beeinflusst wurden, als die Luftmassen außerhalb des Filaments. Der Flugweg (weiß-blaue Linie) kreuzt das Filament genau in der Region, in dem hohe vertikale Windgeschwindigkeiten

auftreten (Abbildung 5.13).

Die Ergebnisse legen nahe, dass die durch die Orographie der Südlichen Shetlandinseln induzierten Schwerewellen zu Turbulenz geführt haben (Abbildung 5.12), wodurch Mischung von Luftmassen, die unterschiedlich stark vom polaren Wirbel beeinflusst wurden, beobachtet werden konnte.

5.7. Untersuchung und Vergleich der Spurengasflüsse

In diesem Abschnitt wird untersucht wie groß die kinematischen Spurengasflüsse im Bereich der orographischen Schwerewellen sind. Sie werden mit der Kovarianz-Methode berechnet, die in Abschnitt 2.1.1 vorgestellt wurde. Die berechneten Spurengasflüsse werden im Anschluss mit den Flüssen der anderen beiden Fallstudien dieser Arbeit aus Kapitel 3 und 4 verglichen.

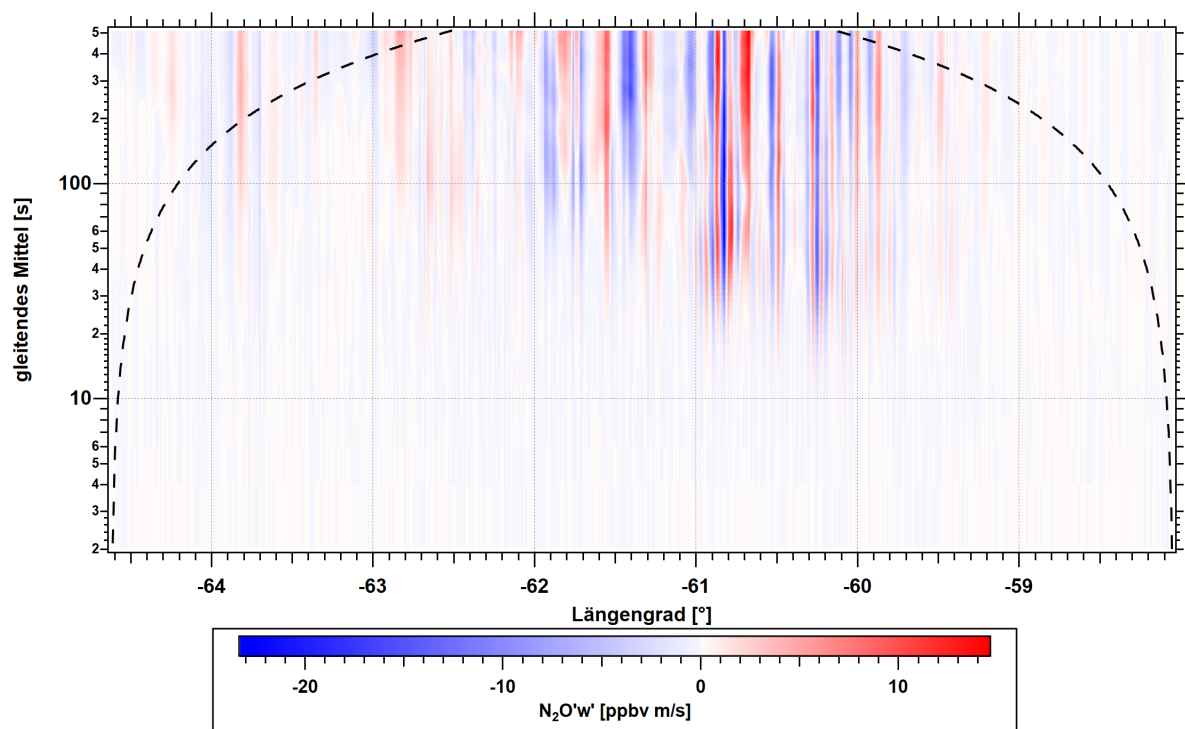


Abbildung 5.15.: Vertikaler kinematischer N_2O -Fluss für den Bereich des südlichen Flugabschnitts.

In Abbildung 5.15 ist der kinematische N_2O -Fluss für den wellenbeeinflussten Teil (siehe Abbildung 5.12) des südlichen Flugabschnitts dargestellt. Aufgrund der hohen vertikalen Windgeschwindigkeit (um $3\ m\ s^{-1}$) und der großen N_2O -Fluktuation ($20\ ppbv$) im Bereich der stärksten Gebirgswellen ($-62,0^\circ$ bis $-59,8^\circ$) ergeben sich hohe kinematische N_2O -Flüsse von über $23\ ppbv\ m\ s^{-1}$. Diese treten vor allem bei gleitenden Mitteln zwischen 20 und 80 Sekunden ($4,9$ bis $19,4\ km$) auf und stimmen gut mit der Wavelet-Analyse (Abbildung 5.12) überein. Gemittelt über alle Skalen und in dem gezeigten Zeitraum ergibt sich ein negativer kinematischer Vertikalfluss von $-0,22\ ppbv\ m\ s^{-1}$. Bei den anderen zur Verfügung stehenden Spurengasen (O_3 , CO , CO_2 , CH_4 , OCS) ergibt sich ein ähnliches

5. Untersuchung von welleninduziertem Austausch am antarktischen polaren Wirbel

	SouthTRAC Flug 17	DEEPWAVE Flug 09	GW-LCYCLE II Flug 08
N ₂ O [ppbv m s ⁻¹]	23,3	5,6	1,6
O ₃ [ppmv m s ⁻¹]	205,4	102,5	30,3
CO [ppbv m s ⁻¹]	16,2	28,1	13,7
CO ₂ [ppmv m s ⁻¹]	4,2	0,7	-
CH ₄ [ppbv m s ⁻¹]	93,2	27,1	-
OCS [ppbv m s ⁻¹]	0,3	-	-

Tabelle 5.1.: Vergleich der größten kinematischen Spurengasflüsse von N₂O, O₃ und CO, sowie vorhanden CO₂, CH₄ und OCS für den 17. Flug von SouthTRAC, den 9. Flug von DEEPWAVE und den 8. Flug von GW-LCYCLE II.

Bild. Im Vergleich dazu waren es beim 8. Flug von GW-LCYCLE II (Abschnitt 4) auf der höchsten Flugfläche mit Mittel +0,03 ppbv m s⁻¹ und beim 9. Flug von DEEPWAVE (Abschnitt 3) +0,02 ppbv m s⁻¹.

Tabelle 5.1 zeigt den Vergleich der größten gemessenen Spurengasflüsse von N₂O, O₃ und CO bei den in dieser Arbeit untersuchten Flügen von SouthTRAC, DEEPWAVE und GW-LCYCLE II. Bei allen Werten handelt es sich um den betragsmäßig maximalen, d.h. dieser kann positiv oder negativ sein, nicht zusätzlich gemittelten, kinematischen Spurengasfluss (Abbildung 5.15) für Perioden zwischen 2 und 512 Sekunden. Dabei wurden CO₂ und CH₄ bei SouthTRAC von UMAQS (Abschnitt 3.3.1) und bei DEEPWAVE vom DLR mit einem Cavity-Ringdown-Spektroskop von Picarro (Crosson, 2008) gemessen. Das O₃-Mischungsverhältnis wurde bei SouthTRAC vom KIT mit FAIRO (Zahn et al., 2012) und bei DEEPWAVE und GW-LCYCLE II vom DLR mit dem TE49-Messgerät (Schumann et al., 2011; Huntrieser et al., 2016) gemessen. Die OCS-Messungen wurden ebenfalls mit UMAQS durchgeführt.

Bei fast allen Spurengasen sind die berechneten Flüsse bei SouthTRAC größer als die Flüsse bei DEEPWAVE, obwohl es sich in beiden Fällen um Flüsse handelt, die von orographischen Wellen induziert wurden. Nur der CO-Fluss ist bei DEEPWAVE größer als bei SouthTRAC. Dies könnte daran liegen, dass bei DEEPWAVE nahe an der Tropopause (~ 10 K darüber) und bei SouthTRAC mehrere Kilometer oberhalb der Tropopause (~ 60 K) geflogen wurde und der Gradient des CO-Mischungsverhältnisses in der Stratosphäre mit der Höhe kleiner wird. Die Spurengasflüsse bei GW-LCYCLE II sind bei allen drei verfügbaren Größen am kleinsten. In diesem Fall wurde der Fluss jedoch durch einen anderen Prozess, nämlich durch Scherung und Turbulenz an einer Tropopausenfalte erzeugt, bei dem keine großen vertikalen Windgeschwindigkeiten aufgetreten sind.

5.8. Zusammenfassung

In diesem Kapitel wurde gezeigt, dass orographisch erzeugte Schwerewellen am Rand des antarktischen polaren Wirbels zu Mischung von Luftmassen führen können, die unterschiedlich stark vom Wirbel beeinflusst wurden und damit zu einem Transport in die Extratropen, bzw. mittleren Breiten beitragen können.

Die Modelldaten und die Satellitenbeobachtungen haben gezeigt, dass HALO während des 17. Messflugs der SouthTRAC-Kampagne am Rand, bzw. durch den Rand des antarktischen polaren Wirbels geflogen ist. Dabei lag der Flugweg im untersten Teil des Wirbels, da die maximale Flughöhe von HALO bei 15,5 km liegt. Das unterscheidet SouthTRAC auch von früheren flugzeuggetragenen Messungen bei denen der antarktische polare Wirbel untersucht wurde und bei denen das Höhenforschungsflugzeug ER-2 der NASA (National Aeronautics and Space Administration) genutzt wurde (Strahan et al., 1989; Tuck et al., 1997; Waugh et al., 1997), dessen maximale Flughöhe bei 21,4 km liegt.

Über weite Teile des Fluges sind die O_3 - und N_2O -Mischungsverhältnisse nicht korreliert. Dies zeigt den Einfluss des polaren Wirbels auf die Spurengasmessungen und dass in diesen Abschnitten prozessierte Luftmassen gemessen wurden. Die O_3 - N_2O -Korrelation bildet in der unteren Stratosphäre im Winter und Frühling in der Polarregion keine kompakte Korrelation, wie in den mittleren Breiten, was durch verschiedene in-situ Beobachtungen (Flugzeug, Ballon, Satellit) und Modellstudien bekannt ist (Proffitt et al., 2003; Strahan et al., 1989; Plumb und Ko, 1992; Tuck et al., 1997; Waugh et al., 1997; Strahan et al., 1999; Müller et al., 2001; Hegglin und Shepherd, 2007). Ziele dieser Studien war jedoch nicht die Untersuchung von kleinskaligen Mischungsprozessen, sondern häufig die Bestimmung des Ozonabbaus, oder die Untersuchung von Klimatologien.

Von den Südlichen Shetlandinseln wurden orographische Wellen induziert, die sich bis in die Stratosphäre ausgebreitet haben und zu starken Fluktuationen sowohl bei den meteorologischen Größen, als auch bei den Spurengasen geführt haben. Die Beobachtung, dass kleine Inseln im Südmeer häufig orographische Schwerewellen erzeugen können, die bis in die Mesosphäre reichen und signifikante Impulsflüsse haben, wurde in unterschiedliche Studien gezeigt und untersucht (Alexander und Grimsdell, 2013; Vosper, 2015; Eckermann et al., 2016). Dementsprechend ist dies, unter den geeigneten meteorologischen Bedingungen, auch bei den Südlichen Shetlandinseln möglich. Der Einfluss auf Spurengasmessungen und Mischungsprozesse wurde dabei nicht untersucht.

Im Zeitraum der beobachteten großskaligen Schwerewellen gibt es Anzeichen für Turbulenz, was besonders durch die Analyse der hochaufgelösten vertikalen Windgeschwindigkeit gezeigt werden konnte. Gleichzeitig zum Auftreten der orographischen Schwerewellen wurde ein Filament mit niedrigeren PV-Werten durchflogen, das oberhalb der Südlichen Shetlandinseln lag. Das Filament weist eine andere chemische Zusammensetzung als die Umgebung auf, was zu isentropen Gradienten entlang der Zeitreihen geführt hat.

Die Gebirgswellen und die damit verbundene Turbulenz beeinflussen besonders den Teil der O_3 - N_2O -Korrelation, in dem beide Spurengase positiv korreliert sind. So führt die Turbulenz zu Mischung, die in der O_3 - N_2O -Korrelation als Mischungslinie erscheint. Damit bildet die Mischungslinie einen Übergang zwischen einem Teil mit unkorrelierten Daten, die stark vom polaren Wirbel beeinflusst wurden und einem anti-korrelierten Teil der Daten, der hauptsächlich durch Luft aus den mittleren Breiten und nur schwach aus der Polarregion stammt. Eine positive O_3 - N_2O (oder O_3 - CH_4)-Korrelation kann in dieser Höhe nur durch Mischung erzeugt werden. Da Luftmassen innerhalb des Wirbels keine positive

5. Untersuchung von welleninduziertem Austausch am antarktischen polaren Wirbel

Korrelation bilden und die Mischungslinie in einer Region mit starken PV-Gradienten und Turbulenz liegen, kann ein Ozonabbau mit der Höhe als Grund für eine positive Korrelation ausgeschlossen werden. Solche positiven Korrelationen von $\text{O}_3\text{-N}_2\text{O}$ (und $\text{O}_3\text{-CH}_4$), die durch das Mischen von Luftmassen aus dem polaren Wirbel mit Luftmassen aus den mittleren Breiten entstehen, wurden am Rand des polaren Wirbels in den Analysen von Plumb et al. (2000); Müller et al. (2001, 2007); Hegglin und Shepherd (2007) beobachtet. Die dort durchgeführten in-situ Messungen fanden allerdings bei deutlich geringeren Mischungsverhältnissen und damit in größeren Höhen statt und konnten zudem keinem, durch Gebirgswellen induzierten Einzelereignis zugeordnet werden.

Innerhalb des untersuchten Flugabschnitts treten außerdem starke kinematische Vertikalflüsse bei allen Spurengasen auf, die überwiegend größer sind, als die in Abschnitt 3 berechneten Flüsse, die ebenfalls durch Gebirgswellen erzeugt wurden.

Insgesamt zeigt die Analyse, dass schwerewelleninduzierte Turbulenz zu einem Export von chemisch prozessierten Luftmassen am Wirbelrand, oder an einem Filament, in die mittleren Breiten führen kann.

6. Zusammenfassung und Ausblick

6.1. Zusammenfassung

Im Rahmen dieser Arbeit wurden drei Fallbeispiele für kleinskalige Mischungsprozesse in der UTLS-Region an dynamischen Transportgrenzen, bzw. über dynamische Transportgrenzen hinweg untersucht. Dazu wurde nicht-isentrope Mischung über den neuseeländischen Alpen während DEEPWAVE, Spurengasflüsse auf Mischungslinien an einer Tropopausenfalte an der Nordküste Norwegens während GW-LCYCLE II und Mischung am antarktischen polaren Wirbel über den Südlichen Shetlandinseln (Antarktische Halbinsel) während SouthTRAC analysiert. Für die Analysen wurden hauptsächlich flugzeuggetragene in-situ Messungen von Spurengasen und meteorologischen Größen verwendet. Zum einen wurden diese mit Diagnosen von Spurengasverteilungen, d.h. Spurengaskorrelationen, Spurengasflüssen und skalenabhängigen Korrelationsanalysen untersucht. Zum anderen kamen Wavelet-Analysen und spektrale Leistungsdichten, also Zeit-Frequenz-Analysemethoden, zum Einsatz. Die in-situ Messungen wurden durch numerischen Modelldaten vom ECMWF, CLaMS und GTG sowie Satellitenbeobachtungen ergänzt. Das Ziel der Untersuchungen war es einzelne Mischungsereignisse zu identifizieren und diese nach Möglichkeit zu quantifizieren.

Im Speziellen sollten dabei die folgenden drei Fragen beantwortet werden:

1. Kann gebirgswelleninduzierte Turbulenz die Zusammensetzung der UTLS nachhaltig beeinflussen?

Während eines Fluges der DEEPWAVE-Kampagne, in Kapitel 3, wurden während erhöhter Schwerewellenaktivität über den südlichen Alpen Messungen durchgeführt, bei denen Fluktuationen von bis zu 5 m s^{-1} bei der vertikalen Windgeschwindigkeit und 9 K bei der potentiellen Temperatur beobachtet werden konnten. Im gleichen Bereich schwankt das N_2O -Mischungsverhältnis um maximal 4 ppbv und das CO -Mischungsverhältnis um 20 ppbv . Die spektrale Leistungsdichte der in-situ gemessenen vertikalen Windgeschwindigkeit zeigt das Auftreten von Turbulenz über dem Gebirge in Verbindung mit Schwerewellen in der Tropopausenregion. Die Daten der GTG-Analyse bestätigen das Vorkommen von Turbulenz, mit Werten von $0,23 \text{ m}^{2/3} \text{ s}^{-1}$ und damit moderater Turbulenz, über dem Gebirgsrücken.

Durch die Verwendung von Profilen des quasi-inerten Spurengases N_2O , konnten zwei verschiedene Luftschichten identifiziert werden, die eine unterschiedliche chemische Zusammensetzung haben und auf verschiedenen Isentropen liegen. Die N_2O - CO -Korrelation konnte eindeutig zeigen, dass zwischen diesen beiden stratosphärischen Schichten irreversibles Mischen aufgetreten ist. Außerdem wurde eine signifikante Veränderung der N_2O -Profile gegen die potentielle Temperatur gefunden, bei der sich die Steigung von $-0,6 \text{ K ppbv}^{-1}$ im Luv, auf -2 K ppbv^{-1} im Lee der Südalpen änderte. Eine skalenabhängige Steigungsanalyse offenbarte, dass diese Steigungsänderungen in der Region mit den beobachteten Schwerewellen auftraten.

6. Zusammenfassung und Ausblick

Daraus konnte gefolgert werden, dass es zu einer irreversiblen Umverteilung von N_2O (und anderen Spurengasen) von Luv zum Lee gekommen sein muss. Diese Ergebnisse wurde auch durch die Wavelet-Analyse bestätigt, bei der es über dem Gebirge zum Zusammenbruch der Kohärenz und der Phasenbeziehung zwischen N_2O und potentieller Temperatur kommt.

Aus Wavelet-Kospektren von vertikaler Windgeschwindigkeit und Spurengasen, konnten vertikale Spurengasflüsse von $0,56 \text{ ppbv} \cdot \text{m s}^{-1} \text{ N}_2\text{O}$ und $10,1 \text{ ppbv} \cdot \text{m s}^{-1} \text{ O}_3$ im Bereich der Schwerewellen und der Mischungslinien berechnet werden.

Daher kann geschlussfolgert werden, dass nicht-isentrope Mischung von Spurengasen in der turbulenten Region von Schwerewellen zu irreversiblen, diabatischen Spurengasflüssen führen kann. Dies hat einen dauerhaften Einfluss auf die Zusammensetzung der Spurengase in der UTLS.

2. Gibt es einen Zusammenhang zwischen Mischung, Spurengasflüssen und Instabilitäten?

In Kapitel 4 wurden die Messdaten eines Fluges der GW-LCYCLE II Kampagne auf Austauschprozesse zwischen Troposphäre und Stratosphäre analysiert. Dazu wurde eine Tropopausenfalte auf sechs verschiedenen Flughöhen durchflogen und dabei in-situ Spurengasmessungen von N_2O , CO und O_3 durchgeführt. Auf mehreren Flughöhen sind sowohl troposphärische, als auch stratosphärische Spurengasmischungsverhältnisse mit großen horizontalen Gradienten gemessen worden. Zwischen den troposphärischen und den stratosphärischen Luftmassen sind in den Spurengaskorrelationen von N_2O - CO und O_3 - CO deutliche Mischungslinien an der Tropopausenfalte vorhanden. Die Analysen von Vorhersage-, Analyse- und Reanalysedaten zeigen erhöhte Scherung oberhalb und unterhalb des Strahlstroms. Die Richardson-Zahlen haben ein Minimum von 1,6 im Modell und lokal auch kleiner 0,25 bei den Messungen und somit unter dem Schwellwert für dynamische Instabilität.

Die Berechnung von kinematischen Spurengasflüssen hat ergeben, dass die Mischungslinien gemeinsames mit hohen lokalen, vertikalen Spurengasflüssen von bis zu $1,6 \text{ ppbv} \cdot \text{m s}^{-1} \text{ N}_2\text{O}$ und $25,8 \text{ ppbv} \cdot \text{m s}^{-1} \text{ O}_3$ auftreten und auf jeder Flughöhe am Übergang zwischen Troposphäre und Stratosphäre liegen. In diesen Übergangsbereichen sind die berechneten Spurengasflüsse 1,6 bis 8,9 Mal größer, als in den jeweiligen troposphärischen und stratosphärischen Bereichen. Mit zunehmender Entfernung zur Falte werden die Flüsse also kleiner. Im Mittel sind die Ozonflüsse außerdem negativ ($-0,07$ bis $-3,36 \text{ ppbv} \cdot \text{m s}^{-1}$), was einem abwärts gerichteten Fluss und damit einem Transport von der Stratosphäre in die Troposphäre entspricht.

Das Vorhandensein von Scherung und Turbulenz wird durch die Analyse der spektralen Leistungsdichten von N_2O , potentieller Temperatur und vertikaler Windgeschwindigkeit bestätigt, bei denen sich dieser Einfluss besonders bei kleinen Skalen ($< 2,1 \text{ km}$) zeigt. Auch die Wavelet-Analyse zeigt auf dem höchsten Flugabschnitt vor allem im Übergangsbereich erhöhte Leistung auf kleinen Skalen ($< 850 \text{ m}$) bei denen es einen abwärts gerichteten Fluss von maximal $1,1 \text{ ppbv} \cdot \text{m s}^{-1} \text{ O}_3$ und $0,1 \text{ ppbv} \cdot \text{m s}^{-1} \text{ N}_2\text{O}$ gibt.

Ein Vergleich von dynamischer Tropopause (aus dem Modell bestimmt) und chemischer Tropopause (aus den N_2O -Messungen bestimmt) ergibt stellenweise deutliche Unterschiede, was ein Hinweis auf Mischung ist. Dieser Hinweise wird durch die Spurengaskorrelationen bestätigt, bei denen die hohe Linearität und Kompaktheit

der Mischungslinien ein Hinweis darauf ist, dass die Mischung, bzw. der Mischungsprozess noch aktiv, oder nicht lange her ist. Scherung und Turbulenz tritt also auch in den Bereichen der Tropopausenfalte auf, in denen die Mischungslinien und die hohen Spurengasflüsse beobachtet werden konnten. Die Analysen stellen damit eine direkte Verbindung zwischen turbulenten Spurengasflüssen und Mischungslinien von Spurengaskorrelationen her.

3. Können orographisch erzeugte Schwerewellen zum Austausch von Luftmassen aus dem polaren Wirbel und den mittleren Breiten beitragen?

Bei den in Kapitel 5 durchgeführten Analysen wurde ein Flug der SouthTRAC-Kampagne ausgewertet, bei dem es zu einem welleninduzierten, nicht-isentropen Mischungsprozess am Rand des polaren Wirbels gekommen ist. Die Analyse von ECMWF-Vorhersagedaten hat gezeigt, dass durch die Südlichen Shetlandinseln orographische Schwerewellen angeregt wurden, die sich über die Tropopause bis in die Stratosphäre ausgebreitet haben. Diese von HALO durchflogenen Schwerewellen zeigen sich bei den in-situ Messung anhand von Vertikalgeschwindigkeiten bis zu $3,3 \text{ m s}^{-1}$, sowie Fluktuationen bei der potentiellen Temperatur (bis $4,6 \text{ K}$) der horizontalen Windgeschwindigkeit (bis $4,4 \text{ m s}^{-1}$), dem N_2O - (bis $19,1 \text{ ppbv}$) und dem O_3 -Mischungsverhältnis (bis $144,2 \text{ ppbv}$). Die Wavelet-Analyse der Daten der vertikalen Windgeschwindigkeit (100 Hz , entspricht $5,1 \text{ m}$) zeigt erhöhte Leistung auf kleinen Skalen und ist ein eindeutiger Hinweis auf Turbulenz in dem Flugabschnitt mit der Wellenaktivität über den Südlichen Shetlandinseln.

Aus den ECMWF-Modelldaten und der Satellitenmessung der Ozonsäule geht hervor, dass der polare Wirbel am Messtag nicht zentral über dem Südpol lag. Der Rand des Wirbels befand sich über der Antarktischen Halbinsel. Auf 380 K potentieller Temperatur und damit im unteren Bereich des Wirbels, sind mehrere Filamente vorhanden. Auf dieser Flughöhe wurde eines dieser Filamente, das über den Südlichen Shetlandinseln und damit im Gebiet der Schwerewellenaktivität und der Turbulenz lag, vom Flugweg gekreuzt. Dies zeigt sich in den ECMWF-Größen potentielle Wirbelstärke und Ozonmischungsverhältnis, aber auch im CLaMS-Modell, das Informationen über das Altersspektrum und die Luftmassenherkunft liefert.

Die O_3 - N_2O -Korrelation zeigt, dass ein Teil der Daten hauptsächlich durch Luftmassen aus den mittleren Breiten beeinflusst wurde. Ein Großteil der Daten wurde jedoch durch chemisch prozessierte Luft (Ozonabbau) aus dem Wirbel beeinflusst, bei denen die Mischungsverhältnisse von O_3 und N_2O nicht korrelieren. Zwischen den ozonabgebauten Luftmassen aus dem polaren Wirbel und den chemisch nicht-prozessierten Luftmassen aus den mittleren Breiten lässt sich aus der Korrelation Mischung diagnostizieren. Eine der vorhandenen Mischungslinien, die kompakte und positiv korreliert ist, liegt über den Südlichen Shetlandinseln und damit im Bereich der Schwerewellen. In diesem Flugabschnitt liegen die höchsten vertikalen Windgeschwindigkeiten ($3,3 \text{ m s}^{-1}$) des Messflugs. Die Messungen werden durch Simulationen von CLaMS bestätigt, bei dem der Anteil des Vortex-Tracers von einem höheren (0,2) zu einem niedrigen (0,1) Wert wechselt und damit den Luftmassenwechsel verdeutlicht. Die kinematischen Spurengasflüsse von N_2O und O_3 erreichen ihre Maximalwerte von $23,3 \text{ ppbv m s}^{-1}$, bzw. $205,4 \text{ ppbv m s}^{-1}$ ebenfalls in diesem Abschnitt.

Die Ergebnisse deuten damit darauf hin, dass durch schwerewelleninduziertes turbulentes Mischen dazu beitragen kann, dass chemisch prozessierte, ozonabgebaute

6. Zusammenfassung und Ausblick

Luftmassen aus dem Inneren des polaren Wirbels in die mittleren Breiten exportiert werden.

Die Resultate dieser Arbeit zeigen zum ersten Mal einen dauerhaften Einfluss von lokalen schwerewelleninduzierten diabatische Spurengasflüssen auf die Spurengaszusammensetzung, einen Nachweis von turbulenten Flüssen im Bereich von Mischungslinien von Spurengaskorrelationen an einer Tropopausenfalte und eine direkte Beobachtung von schwerewelleninduzierter Mischung über den Rand eines Filaments des polaren Wirbels. Durch die vorgelegten Analysen konnte das Verständnis von kleinskaligen Mischungsprozessen an den Transportgrenzen erweitern werden. Dies trägt zu einer besseren Abschätzung von diabatischen Prozessen am irreversiblen Austausch bei. Es zeigt sich aber auch, dass noch weitere Untersuchungen nötige sind um die ablaufenden Austauschprozesse in der UTLS zu verstehen.

6.2. Ausblick

Die Arbeit mit den Daten und die Resultate der einzelnen Studien haben auch weiteres Potenzial für zukünftige Analysen aufgezeigt. Hier sollen einige der offenen Enden kurz präsentiert werden und aufgezeigt werden, wie diese zukünftig adressiert werden können.

In Kapitel 3 sind, auf der in Abbildung 3.8 gezeigten N_2O -CO-Korrelation, zwischen den beiden stratosphärischen Luftmassen, die durch die separaten Äste in der Korrelation identifiziert werden können, noch weitere, in dieser Arbeit nicht untersuchten, Datenpunkte zu erkennen. Diese befinden sich an unterschiedlichen Orten entlang des Flugwegs, die teilweise auch im Luv des Gebirges liegen. Eine erste Analyse hat gezeigt, dass diese Luftmassen möglicherweise einen Bereich mit erhöhter Turbulenz, wie CAT (**C**lear **A**ir **T**urbulence), und Scherung durchquert haben und die Mischung somit durch einen anderen Prozess induziert wurde. Dabei bieten die WRF (**W**eather **R**esearch and **F**orecasting)-Modelldaten, die im Rahmen von DEEPWAVE für den Kampagnenzeitraum berechnet wurden, mit ihrer höheren horizontalen Auflösung (6 km), möglicherweise Vorteile beim Verständnis der zugrundeliegenden Prozesse.

Durch eine intensivere Analyse des 10. Messflugs der DEEPWAVE-Kampagne, bei dem der gleiche Flugweg ungefähr 5 Stunden später geflogen wurde, könnte eine Abschätzung des Spurengasaustauschs zwischen Troposphäre und Stratosphäre (Advektion der Mischungsschichten) durchgeführt werden. So ist zum Beispiel das N_2O -Profil von Flug 10 in der Stratosphäre nicht mehr so scharf und deutlich variabler als bei Flug 9. Der Vergleich von beiden Flügen ist in Abbildung 6.1 zu sehen. Dies könnte, zumindest teilweise, das Ergebnis des beobachteten Mischungsprozesses sein. Zum weiteren Verständnis könnten möglicherweise auch Trajektorien beitragen.

Abbildung 3.13 hat gezeigt, dass das Ozon aus dem ECMWF-Modell die Steigungsänderungen beim Überströmen des Gebirges teilweise widerspiegelt. Damit könnte versucht werden die Häufigkeit eines solchen Ereignisses abzuschätzen.

Die N_2O -CO- (Abbildung 4.15) und O_3 -CO-Korrelationen (Abbildung 4.16) von Kapitel 4 zeigen, dass die Mischungslinie der höchsten Flugfläche bei einem um 11 ppbv höheren troposphärischen CO-Mischungsverhältnis liegt, als auf den darunterliegenden Flugflächen.

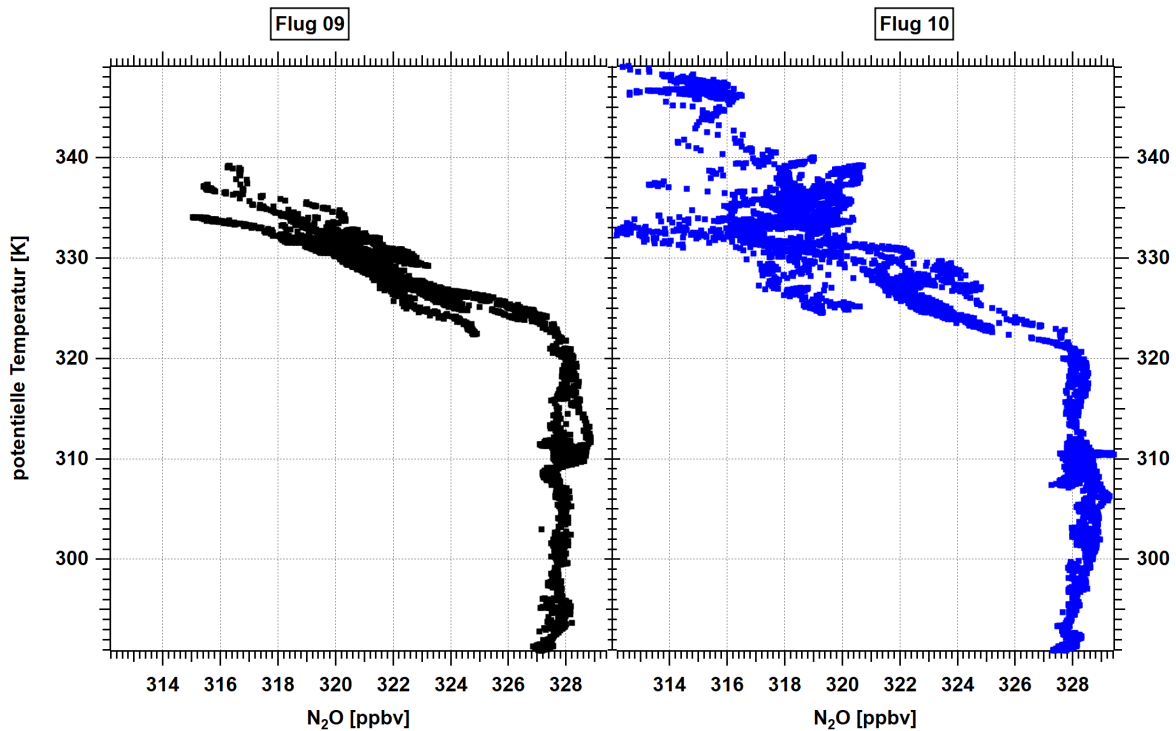


Abbildung 6.1.: Links: N₂O-Profil von Flug 9 (12.07.2014, 17:16 - 20:12 UTC). Rechts: N₂O-Profil von Flug 10 (12., 13.07.2014, 22:01 - 01:11 UTC).

Eine Analyse von Rückwärtstrajektorien könnte Informationen über die Luftmassenherkunft liefern und dabei den Unterschied erklären. Die O₃-CO-Korrelation deutet außerdem an, dass bei der Mischung auf der obersten Flugfläche mehr als zwei Luftmassen beteiligt sein könnten. Auch dies könnte damit untersucht werden.

Die Studie von Pan et al. (2006) hat gezeigt, dass es mit CLaMS möglich ist Mischung in der Nähe einer Tropopausenfalte zu charakterisieren. Damit, oder mit einem anderen hochauflösenden chemischen Modell, könnten Spurengasflüsse berechnet werden und somit die Dauer und die Menge des Spurengasaustauschs zu quantifizieren.

In Abschnitt 4.5 könnte die Verwendung von 10 Hz-Bordsensordaten einen genaueren Hinweis zum möglichen Auftreten von Turbulenz an der Tropopausenfalte bei der Analyse der spektralen Leistungsdichten und der Wavelet-Transformation liefern.

In Abschnitt 4.1.3 wurde eine Methode vorgestellt, wie das gemessene O₃-Mischungsverhältnis zur weiteren Nutzung bearbeitet wurde. Bei gemessenem N₂O (oder einem anderen langlebigen Spurengas) kann unter Verwendung dieser Methode auch das O₃ aus dem ECMWF-Modell bearbeitet werden, z.B. bei stratosphärischen Flugabschnitten bei denen keine Ozondaten gemessen wurden, bzw. zur Verfügung stehen. Wie in Abbildung 2.4 gezeigt wurde, kann es zwischen gemessenem Ozon und Ozon aus dem Modell einen systematischen Unterschied geben. Ein Beispiel für die Bearbeitung ist in Abbildung 6.2 für die Daten von GW-LCYCLE I gezeigt. Es ist zu erkennen, dass die Methode zu einer deutlichen Verbesserung führt. Während Abweichungen zwischen den originalen ECMWF-Daten und den Messdaten im Mittel 24,14 ppbv, bzw. 31,22% betragen, liegen sie nach der Bearbeitung im Mittel bei 7,01 ppbv, bzw. 9,88%.

Eine weitere Anwendungsmöglichkeit dieser Methode ist die Rekonstruktion von N₂O-

6. Zusammenfassung und Ausblick

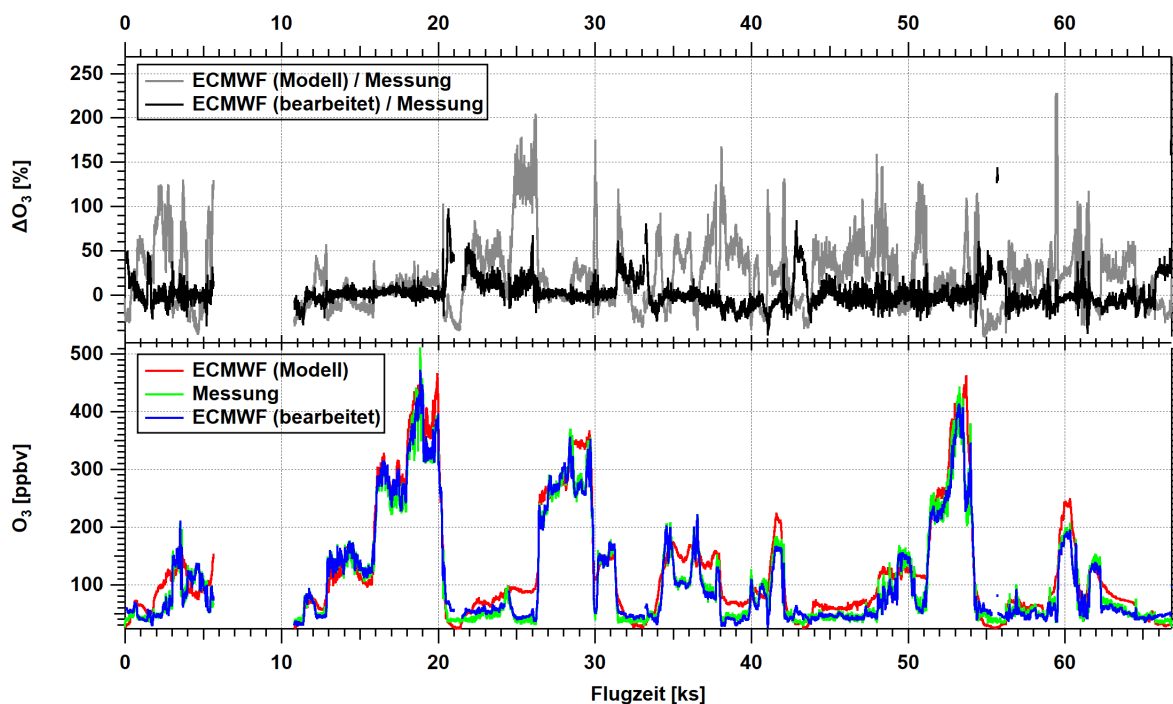


Abbildung 6.2.: Zeitreihen der GW-LCYCLE I Messkampagne. Unten: Die grüne Linie zeigt das gemessene O_3 -Mischungsverhältnis, die rote Linie das aus dem ECMWF-Modell auf den Flugweg interpolierte O_3 -Mischungsverhältnis und die blaue Linie das bearbeitete O_3 -Mischungsverhältnis aus dem ECMWF. Oben: Die relative Abweichung zwischen dem ECMWF- O_3 und dem gemessenen O_3 in grau, sowie dem bearbeiteten ECMWF- O_3 und dem gemessenen O_3 in schwarz.

Daten in Kalibrationslücken. Abbildung 6.3 zeigt ein Beispiel von Flug 9 aus der DE-EPWAVE-Kampagne. Da für die Berechnung der N_2O -Daten in der Kalibrationslücke jedoch noch einiges an Feinarbeit zu leisten ist, wurde dies vor allem aus Zeitgründen in der Arbeit nicht eingesetzt.

In Kapitel 5 wurde nur der südliche Flugabschnitt genauer untersucht. Die Zeitreihen (Abbildung 5.9) und die O_3 - N_2O -Korrelation (Abbildung 5.10) zeigen, dass noch weitere Abschnitte des Fluges analysiert werden könnten. Zum Beispiel können zwei Flugabschnitte auf einen möglichen Austausch, bzw. Mischung zwischen polaren Luftmassen und Luftmassen aus den mittleren Breiten, die durch CAT am Subtropen-Strahlstrom induziert wurde, untersucht werden. Abbildung 5.4 zeigt in diesem Bereich ein Filament des polaren Wirbels.

Am Ende des Fluges könnte ein weiteres Filament untersucht werden. Die O_3 - N_2O -Korrelation zeigt niedrige N_2O -Mischungsverhältnisse und eine Mischungslinie. Innerhalb von 40 Sekunden sinkt das N_2O -Mischungsverhältnis um mehr als 90 ppbv. Nach Andrews et al. (2001) entspricht das auf 11 km einem Altersgradienten von 2,3 Jahren und im CLaMS-Modell ändert sich das mittlere Alter in diesem Abschnitt um 6 Monate.

Die Analyse des südlichen Flugabschnitts könnte außerdem durch Radiosondendaten, z.B. der Marambio Station auf den Südlichen Shetlandinseln, zur Bestimmung von Stabilitätsparametern, oder von vertikalen O_3 -Flüssen, ergänzt werden.

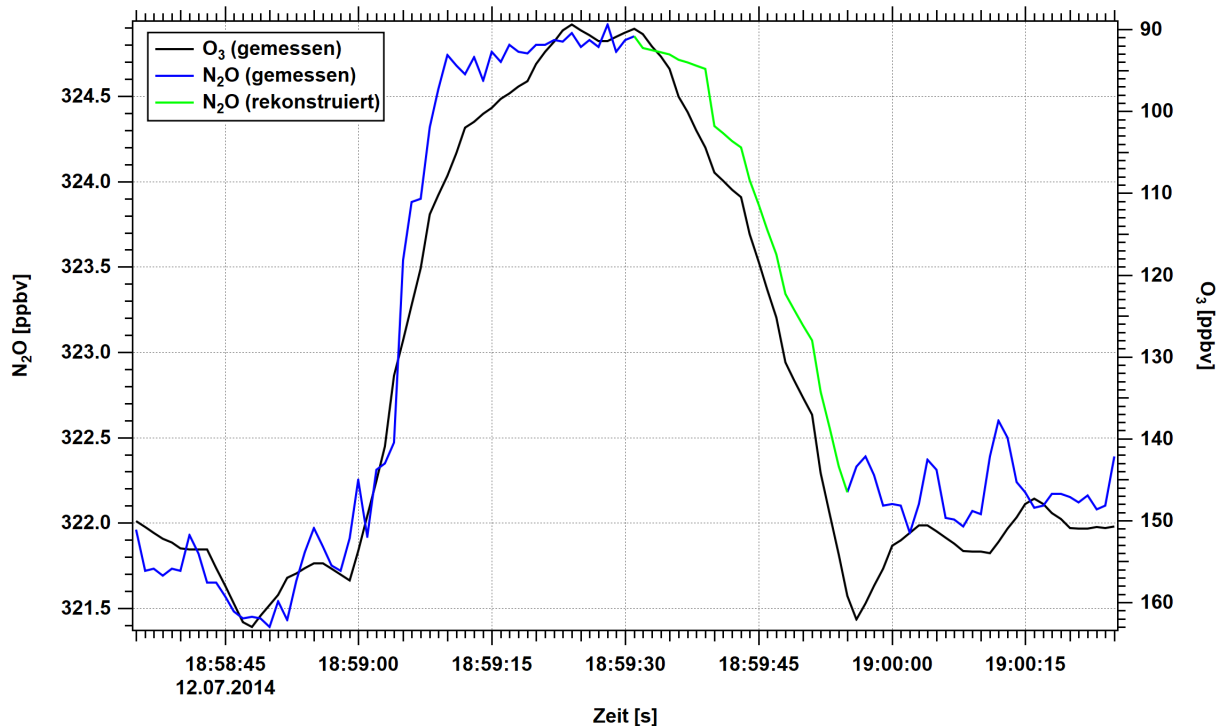


Abbildung 6.3.: Ausschnitt der gemessenen N_2O (blaue Linie) und O_3 (schwarze Linie) Zeitreihen von DEEPWAVE Flug 9. Die grüne Linie zeigt das aus dem O_3 -Mischungsverhältnis rekonstruierte N_2O für den Bereich der Kalibrationslücke.

Die Analysen der ECMWF-Daten in den Abbildung 5.4 und 5.7 habe gezeigt, dass sowohl die Schwerewellen, die durch die Südlichen Shetlandinseln hervorgerufen wurden, als auch die Position der PV-Filamente durch das Modell repräsentiert werden. Daher könnte untersucht werden, wie oft orographische Schwerewellen, von kleinen Inseln im Südpolarmeer, am Rand des Antarktischen polaren Wirbels, bzw. im Bereich von Filamentstrukturen auftreten. Dabei könnte auch die Möglichkeit untersucht werden einen Vertikalfluss zu bestimmen und so den Einfluss auf die chemische Zusammensetzung zu untersuchen.

Tabelle 5.1 zeigt eine Übersicht der lokalen Spurengasflüsse für die drei Fallbeispiele. Zur Abschätzung von irreversible Flüssen, d.h. über die Berechnung der Flussdivergenz, ist die gleichzeitige Messung von Spurengasen auf zwei nahe beieinanderliegenden Flugflächen nötig. Dies ist mit einem Messflugzeug nicht möglich, könnte aber durch koordinierte Flüge mit einem zweiten Messflugzeug erreicht werden.

Eine alternative Möglichkeit zur simultanen Messung wäre die Verwendung eines Schleppkörpers, ähnlich wie bei AIRTOSS-ICE (**AIR**craft **T**Owed **S**ensor **S**huttle - Inhomogeneous **C**irrus **E**xperiment) 2013, allerdings mit der Messung von Spurengasen.

Wenn nur ein Flugzeug an einer Kampagne beteiligt ist, wäre es bei künftigen Kampagnen hilfreich den räumlichen und zeitlichen Abstand zwischen den Flugabschnitten möglichst klein zu halten. Dabei wäre auch die Verwendung von Abwurfsonden von Nutzen. Diese würden es ermöglichen vertikale Impuls- und Wärmeflüsse zu berechnen und die atmosphärische Stabilität zu bestimmen.

Die drei Fallstudien verdeutlichen, dass es zur Analyse von kleinskaligen Prozessen vorteil-

6. Zusammenfassung und Ausblick

haft ist, wenn die Daten mit einer möglichst hohen zeitlichen Auflösung gemessen werden. Dies gilt sowohl für die meteorologischen Größen, als auch für die Spurengase und sollte bei zukünftigen Messkampagnen beibehalten, bzw. wieder umgesetzt werden.

Anhang

A. Ergänzungen zur Wavelet-Analyse

A.1. Einfluss der Wavelet-Frequenz

Die folgenden Abbildungen veranschaulichen den in Abschnitt 2.2.1 beschriebenen Einfluss von unterschiedlichen Wavelet-Frequenzen auf das Analyseergebnis.

Abbildung A.1 zeigt die Wavelet-Analyse einer Testfunktion mit der in dieser Arbeit ver-

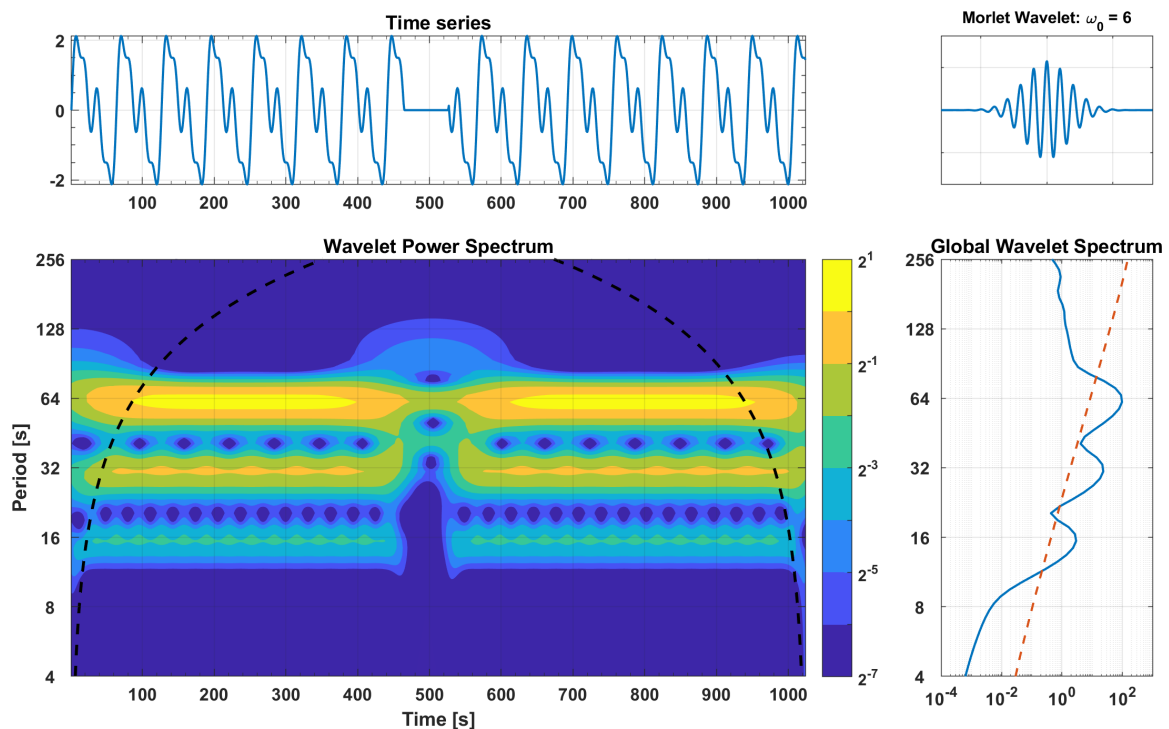


Abbildung A.1.: Oben links: Zeitreihe. Oben rechts: Realteil der Morlet-Wavelet mit $\omega_0 = 6$. Unten links: Wavelet-Leistungsspektrum, die gestrichelte schwarze Linie markiert den COI. Unten rechts: globales Wavelet-Spektrum, die gestrichelte orange Linie zeigt das Spektrum des roten Rauschens.

wendeten Wavelet-Frequenz $\omega_0 = 6$. Als Testfunktion dienen 3 Sinusfunktionen mit unterschiedlicher Amplitude und Wellenlänge: $f(x) = 1,5 \cdot \sin\left(\frac{x}{10}\right) + \sin\left(\frac{x}{5}\right) + 0,5 \cdot \sin\left(\frac{2 \cdot x}{5}\right)$.

Abbildung (A.2) zeigt die Wavelet-Analyse der Testfunktion mit einer kleineren Wavelet-Frequenz ($\omega_0 = 3$). Dadurch erhöht sich die Auflösung im Zeitbereich und verringert sich im Frequenzbereich.

Bei der in Abbildung A.3 gezeigten Wavelet-Analyse der Testfunktion wurde Wavelet-

6. Zusammenfassung und Ausblick

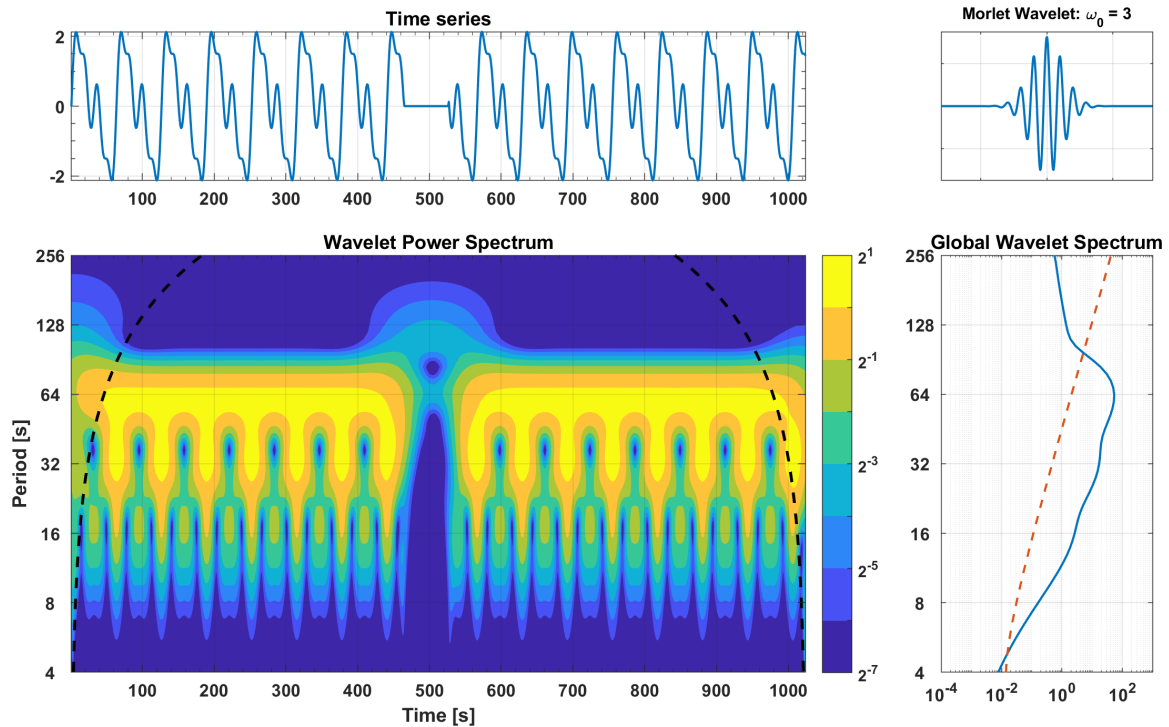


Abbildung A.2.: Oben links: Zeitreihe. Oben rechts: Realteil der Morlet-Wavelet mit $\omega_0 = 3$. Unten links: Wavelet-Leistungsspektrum, die gestrichelte schwarze Linie markiert den COI. Unten rechts: globales Wavelet-Spektrum, die gestrichelte orange Linie zeigt das Spektrum des roten Rauschens.

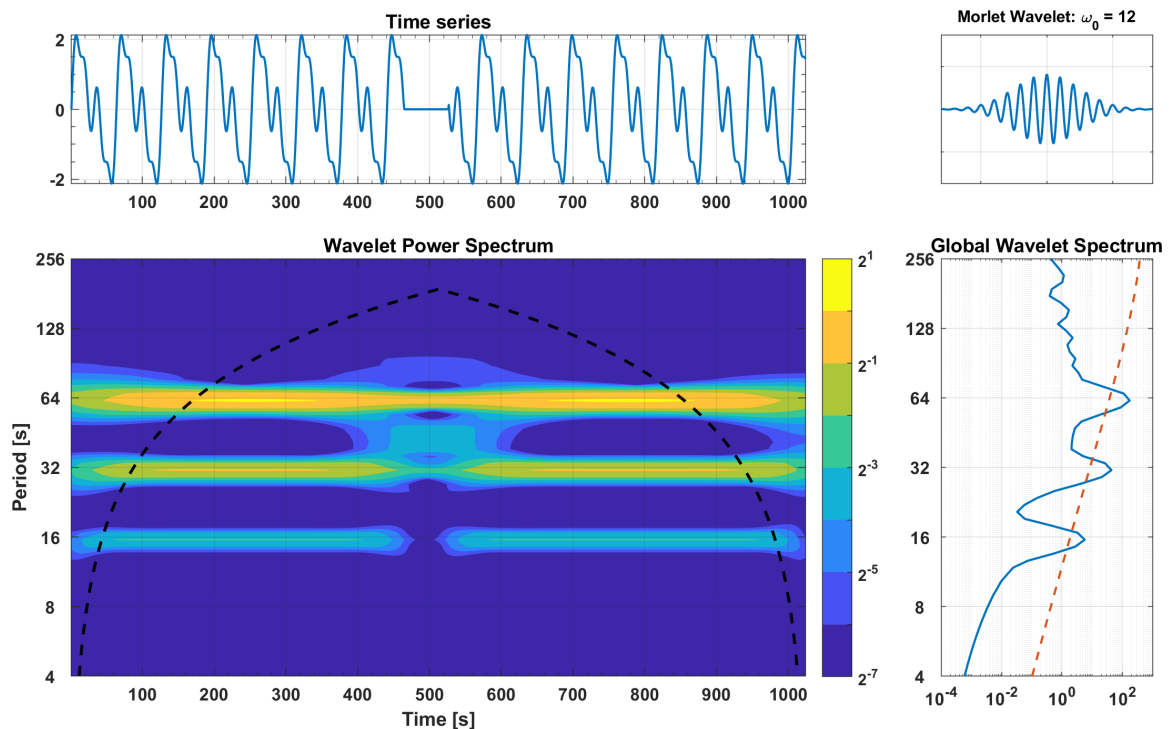


Abbildung A.3.: Oben links: Zeitreihe. Oben rechts: Realteil der Morlet-Wavelet mit $\omega_0 = 12$. Unten links: Wavelet-Leistungsspektrum, die gestrichelte schwarze Linie markiert den COI. Unten rechts: globales Wavelet-Spektrum, die gestrichelte orange Linie zeigt das Spektrum des roten Rauschens.

Frequenz vergrößert ($\omega_0 = 12$). Wie im globalen Wavelet-Spektrum zu erkennen ist, erhöht sich die Auflösung im Frequenzbereich auf Kosten der Auflösung im Zeitbereich.

A.2. Beispiele zur Wavelet-Kohärenz

Die Funktionsweise der Wavelet-Kohärenz wird in diesem Abschnitt anhand einiger einfachen Beispiele verdeutlicht.

Abbildung A.4a zeigt die Zeitreihen von zwei Sinus Schwingungen mit unterschiedlicher

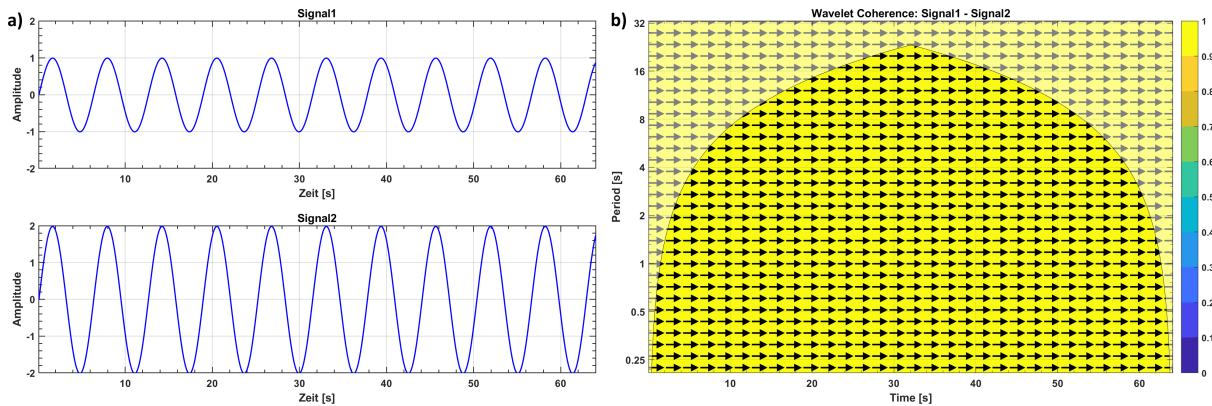


Abbildung A.4.: a) Zeitreihen zweier Sinusfunktion und b) Wavelet-Kohärenz. Die dünne schwarze Linie markiert den COI.

Amplitude ($1 \cdot \sin(x)$ und $2 \cdot \sin(x)$) und die Abbildung A.4b das Spektrum der Wavelet-Kohärenz. Die Kohärenz hat auf dem gesamten Bild den Wert 1, d.h. die beiden Zeitreihen kovariieren überall perfekt. Die Phasenpfeile zeigen alle nach links. Das bedeuten, dass die beiden Sinusfunktionen in Phase schwingen, was die Zeitreihen auch offensichtlich Zeigen. Bei Abbildung A.5 wurde das Vorzeichen der zweiten Sinusfunktion geändert ($1 \cdot \sin(x)$

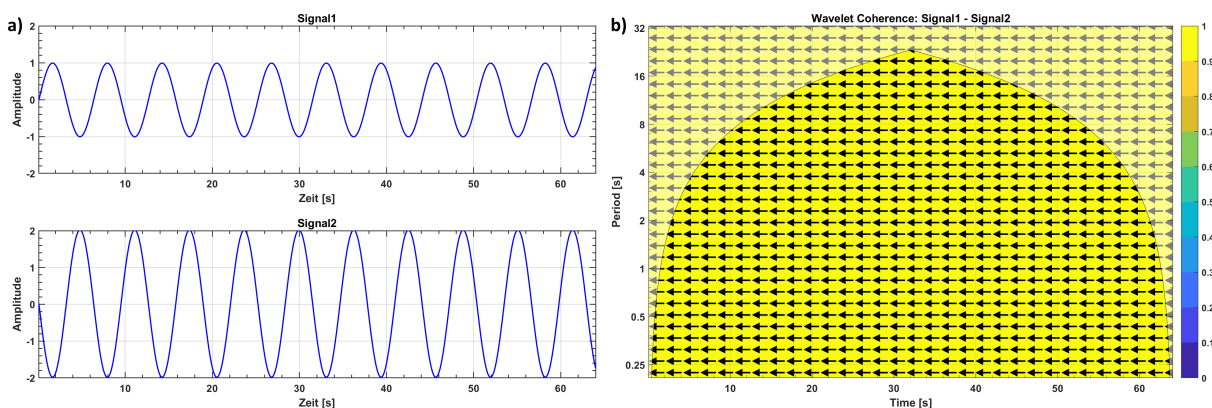


Abbildung A.5.: a) Zeitreihen zweier Sinusfunktion und b) Wavelet-Kohärenz. Die dünne schwarze Linie markiert den COI.

und $-2 \cdot \sin(x)$). Dadurch sind die Schwingungen gegenphasig und die Phasenpfeile der Wavelet-Kohärenz zeigen nach rechts. Auf den Wert der Kohärenz hat dies jedoch keinen Einfluss.

6. Zusammenfassung und Ausblick

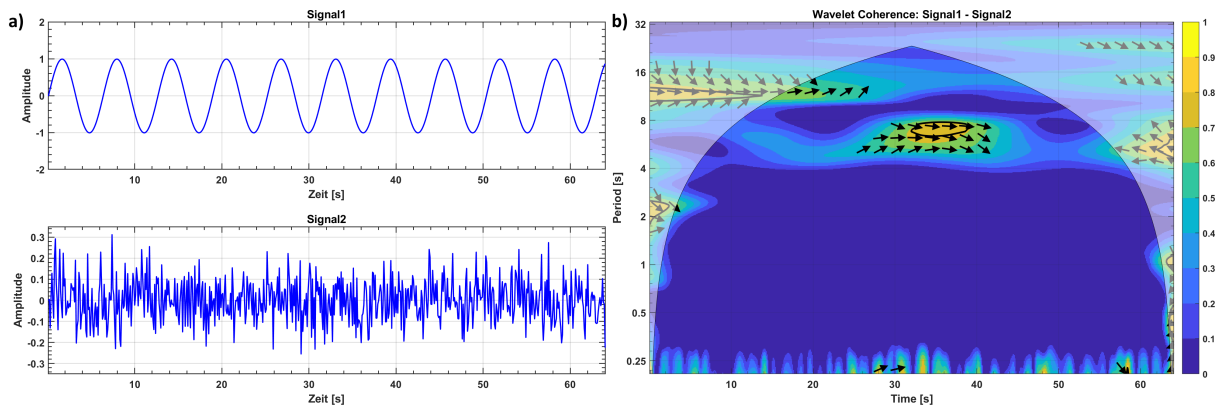


Abbildung A.6.: a) Zeitreihen einer Sinusfunktion und eines Rauschsignals und b) Wavelet-Kohärenz. Die dünne schwarze Linie markiert den COI.

Für die Analyse in Abbildung A.6 wurde die zweite Sinusfunktion durch ein normalverteiltes Rauschsignal ersetzt. Die Kohärenz zwischen den Zeitreihen ist zum größten Teil sehr klein, bzw. hat den Wert 0. Dementsprechend kovariieren beide Signale auch nicht. In Bereichen mit etwas höherer Kohärenz ändert sich die Richtung der Phasenpfeile, d.h. die Signale besitzen zudem auch keine feste Phasenbeziehung.

A.3. Weitere Möglichkeiten zur Anwendung der Wavelet-Transformation

Die Wavelet-Analyse kann auch herangezogen werden um periodisch auftretende Störungen in einem Messsignal zu identifizieren.

Ein Beispiel ist in Abbildung A.7 dargestellt. Sie zeigt die Wavelet-Analyse einer Methan-Zeitreihe (Rohdaten), die während der POLSTRACC-Kampagne in Kiruna (Schweden) während eines Instrumententests im Hangar am 01.12.2015 gemessen wurde. Für die Analyse wurde die Morlet-Wavelet mit $\omega_0 = 6$ verwendet. Neben dem starken Signal zwischen 3800 und 6100 s und das über ein großes Frequenzspektrum reicht, ist auf der Abbildung ebenfalls ein sich wiederholendes Signal mit erhöhter Leistung bei einer Wellenlänge, bzw. Periode um 256 Sekunden zu erkennen. Als mögliche Ursache für dieses Störsignal konnte eine Heizung identifiziert werden, die sich zu den entsprechenden Zeiten eingeschaltet und so die Messungen beeinflusst hat.

Ein zweites Beispiel kommt von einem Messflug der SouthTRAC-Kampagne. Abbildung A.8 zeigt das Rohsignal von Methan im offenen Strahlengang während Flug 19. Bis ungefähr 6000 Sekunden ist das Warmlaufen des Messgerätes auf dem Rollfeld von Buenos Aires (Argentinien) zu sehen. Ab 6000 bis zirka 36500 Sekunden war HALO in der Luft. Danach sind wiederum Bodenmessungen, diesmal auf Sal (Kap Verden) dargestellt. Dabei unterschieden sich die Messungen am Boden deutlich von denen in der Luft. Start und Landung, sowie der Höhenwechsel (um 24000 s) sind ebenfalls gut zu identifizieren. Bei den Intervallen mit wenig Leistung über viele Perioden (z.B. bei zirka 4800 s) handelt es sich um Kalibrationslücken. In der Luft und besonders bei den horizontalen Flugabschnitten sind drei Bereiche mit erhöhter Leistung zu erkennen. Der erste liegt bei Perioden kleiner 4 Sekunden, der zweite zwischen 8 und 32 Sekunden und der dritte zwischen 128 und 256

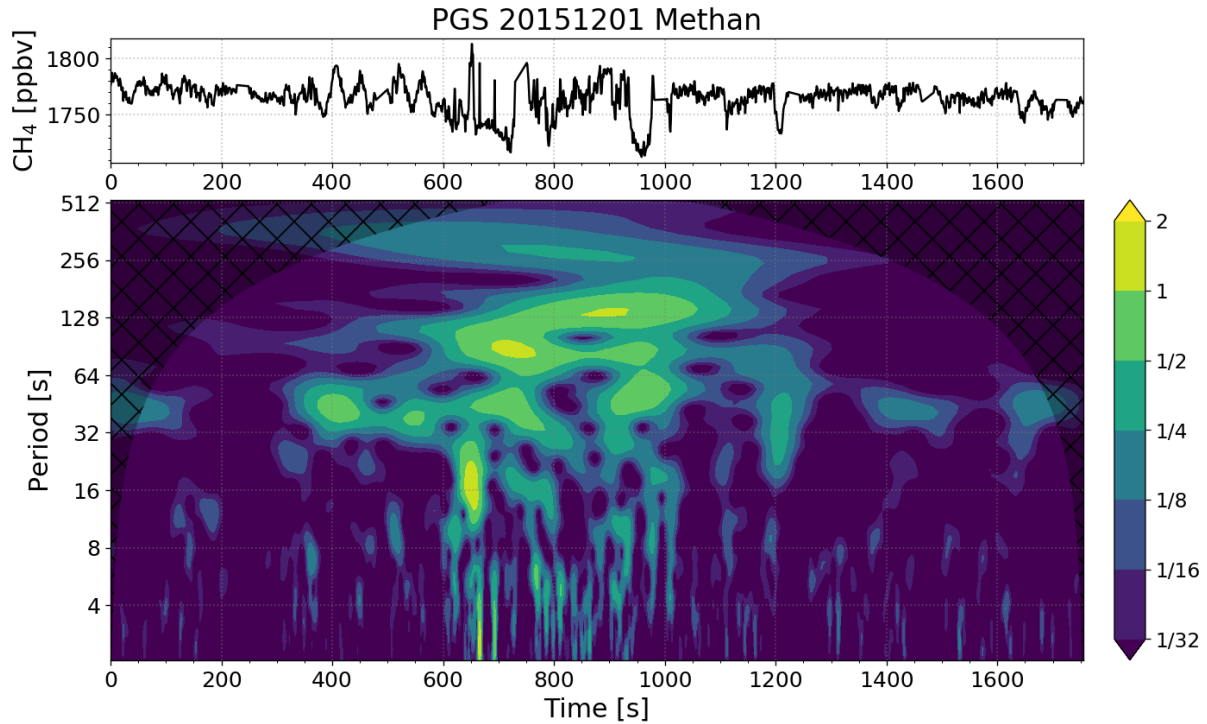


Abbildung A.7.: Bodenmessungen des Methanmischungsverhältnisses während POL-STRACC. Oben: CH₄ Zeitreihe mit einer zeitlichen Auflösung von 6 Sekunden. Unten: Wavelet-Leistungsspektrum. Der schattierte Bereich markiert den COI.

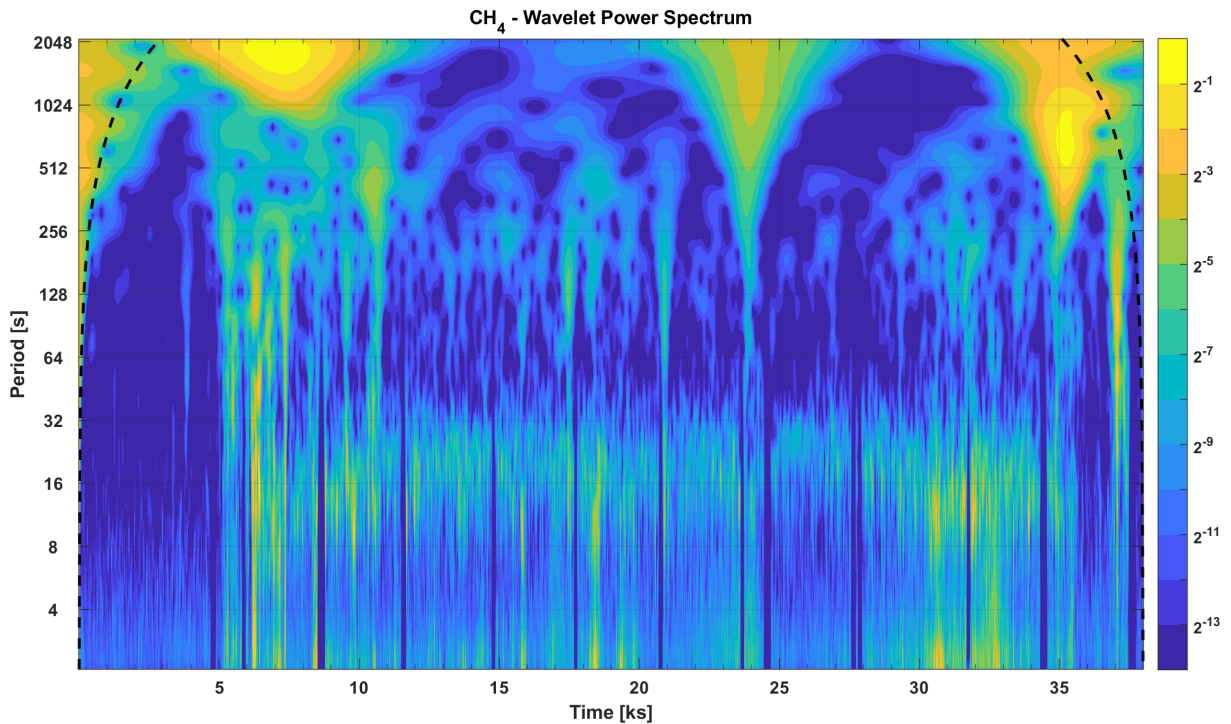


Abbildung A.8.: Wavelet-Analyse des Methansignals im offenen Strahlengang während SouthTRAC-Flug 19. Die gestrichelte Linie markiert den COI.

Sekunden. Alle Bereiche sind im Flug fast durchgängig vorhanden. Daher ist ein atmosphärisches Signal eher unwahrscheinlich. Da die erhöhte Leistung bei den Messungen am Boden aber verschwindet, bzw. deutlich schwächer ist, müssen die Signale durch etwas verursacht werden, das nur im Flug auftritt. Eine Möglichkeit für die Störungen könnte eine mechanische Schwingung in der Laseroptik sein. Außerdem könnten veränderte Druck- und Temperaturverhältnisse während des Fluges innerhalb der Flugzeugkabine das Messsignal, bzw. die Optik beeinflusst haben.

B. Skalenanalyse des O₃-Profils

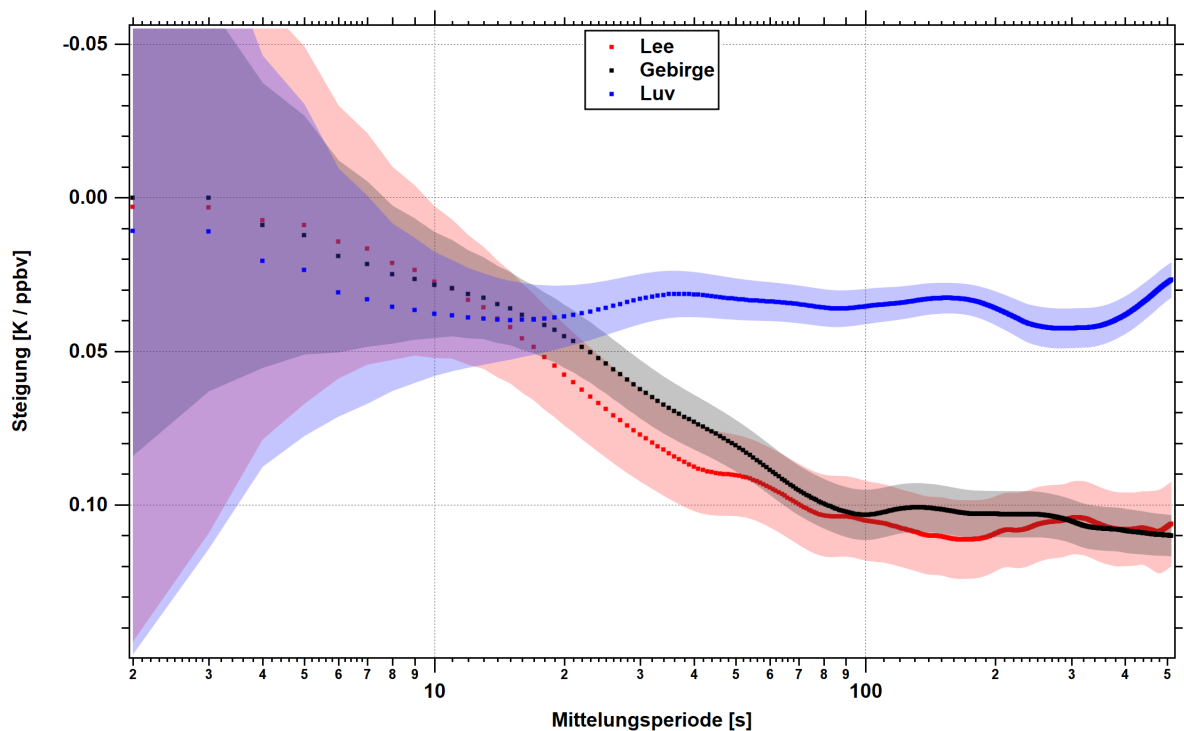


Abbildung B.1.: Steigungen von θ' und O_3' im Luv (blau), Lee (rot) und über dem Gebirge (schwarz) aufgetragen gegen die Mittelungsperiode. Zur besseren Vergleichbarkeit mit N_2O (Abbildung 3.15) wurde die y-Achse gespiegelt.

Abbildung B.1 zeigt die in Abschnitt 3.5.2 durchgeführte Analyse für Ozon. Im Luv und über dem Gebirge stimmen die Kurven von N_2O (Abbildung 3.15) und O_3 gut überein und die Steigung liegt bei ungefähr $0,03 \text{ K} \cdot \text{ppbv}^{-1}$. Im Lee ist allerdings ein Unterschied zwischen beiden Spurengasen zu erkennen. Während sich die Kurven im Lee und über dem Gebirge beim N_2O unterscheiden, ist der Verlauf beim O_3 in beiden Abschnitten sehr ähnlich. Möglicherweise liegt dies an einer unterschiedlichen Luftmassenherkunft beider Schichten. Eine der Luftmassen könnte beispielsweise Verschmutzung gesehen haben, vielleicht auch auf einer anderen Zeitskala. Da O_3 chemisch nicht inert ist, könnte sich so der Unterschied zum N_2O erklären lassen. Die modifizierte Steigung hat bei großen Skalen einen Wert von zirka $0,11 \text{ K} \cdot \text{ppbv}^{-1}$.

C. Berechnung lokaler N_2O -Flüsse

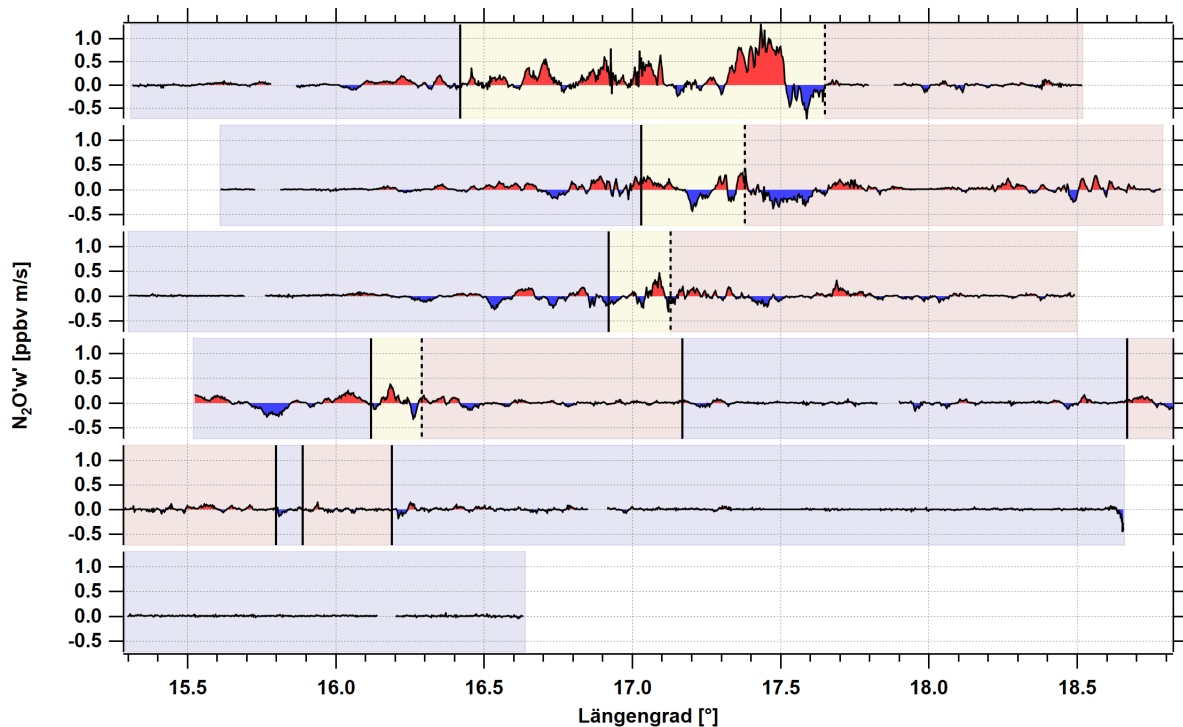


Abbildung C.1.: Vertikale N_2O -Flüsse der sechs horizontalen Flugabschnitte. Durchgezogene vertikale schwarze Linien unterteilen die Flugabschnitte in troposphärische (blau hinterlegt) und stratosphärische (rot hinterlegt) Abschnitte. Gestrichelte vertikale schwarze Linien zeigen Übergangsbereiche (gelb hinterlegt), mit stratosphärischen N_2O -Mischungsverhältnissen, zur Troposphäre.

In Abbildung C.1 sind die N_2O -Flüsse der sechs horizontalen Flugabschnitte dargestellt. Diese wurden analog zu den Ozonflüssen in Abschnitt 4.4 berechnet und unterteilt. Aufgrund des anti-korrelierten Zusammenhangs zwischen N_2O und O_3 ergibt sich ein sehr ähnliches Bild zu Abbildung 4.19, allerdings mit umgekehrten Vorzeichen. Die größten Flüsse treten auf der höchsten Flugfläche im Übergangsbereich auf und erreichen Werte zwischen $-0,73$ und $+1,30$ $\text{ppbv} \cdot \text{m s}^{-1}$.

D. Ergänzungen zur spektralen Leistungsdichte

Abbildung D.1 zeigt die spektrale Leistungsdichte der horizontalen Windgeschwindigkeit. Im Vergleich zu Abbildung 3.24 ist zwischen $0,3$ und $0,8$ Hz (271 bis 721 m) keine auffällige Leistungsspitze zu beobachten. In diesem Intervall ändert sich aber die Steigung der Kurve.

Die Zunahme der Leistungsdichte der vertikalen Windgeschwindigkeit (Abbildung 4.25) bei Frequenzen größer $0,25$ Hz ($< 8,5$ km) in allen drei Bereichen und besonders im Übergangsbereich der höchsten Flugfläche, tritt bei der Analyse der horizontalen Windgeschwindigkeit in Abbildung D.2 nicht auf.

6. Zusammenfassung und Ausblick

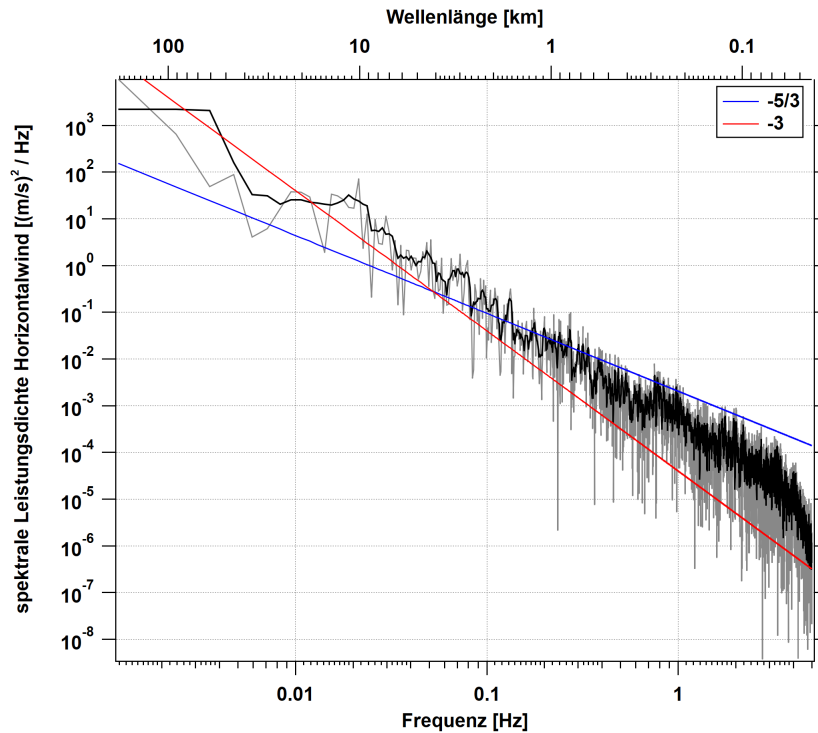


Abbildung D.1.: Spektrale Leistungsdichte der horizontalen Windgeschwindigkeit. Die schwarze Linie ist ein 5 s Mittel des Fourier-Spektrums (grau). Die blaue Linie zeigt eine Steigung von $-5/3$ und rote eine Steigung von -3 .

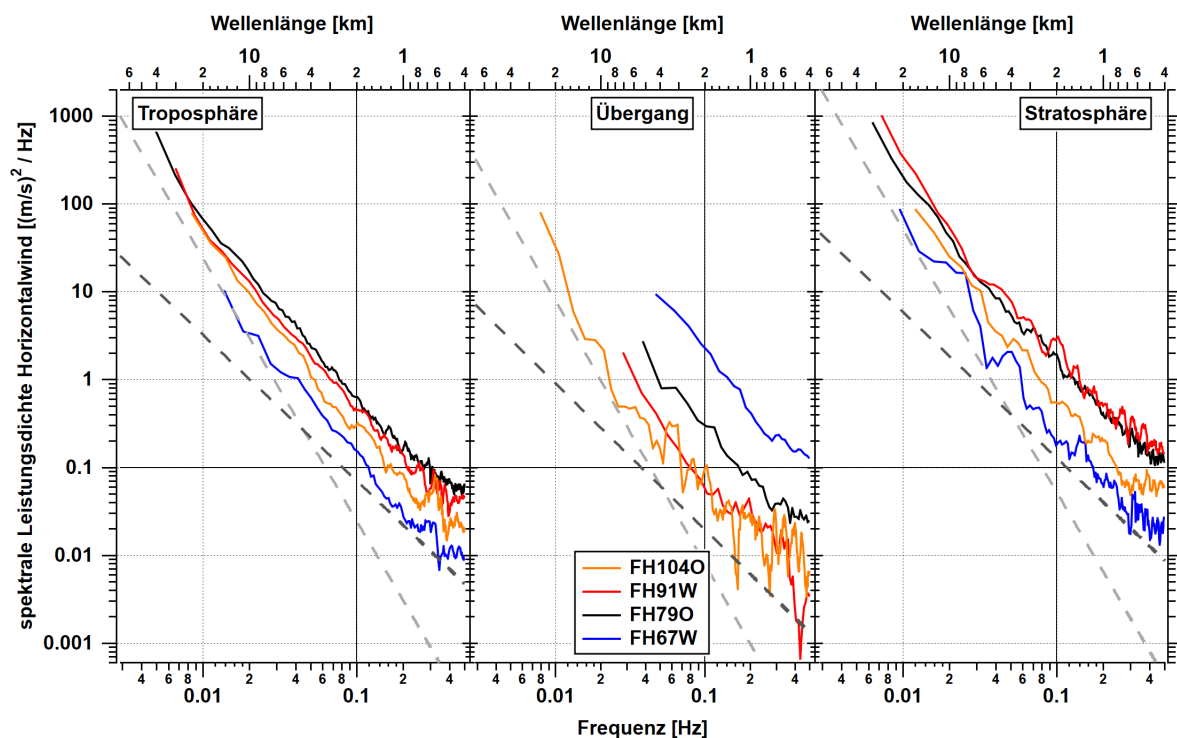


Abbildung D.2.: Spektrale Leistungsdichte der horizontalen Windgeschwindigkeit für die vier höchsten Flughöhen unterteilt in einen troposphärischen (links), stratosphärischen (rechts) und Übergangsbereich (Mitte). Die graue Linien zeigen eine Steigung von -3 und $-5/3$.

Abkürzungsverzeichnis

ACE-FTS	A tmospheric C hemistry E xperiment - F ourier T ransform S pectrometer
AIRTOSS-ICE	A IRcraft T Owed S ensor S huttle - I nhomogeneous C irrus E xperiment
BAHAMAS	B asic H alo M easurement A nd S ensor system
CAT	C lear A ir T urbulence
CHAMP	C HAllenging M inisatellite P ayload
CLaMS	C hemical L agrangian M odel of the S tratosphere
CMAM	C anadian M iddle A tmosphere M odel
COI	C one O f I nfluence
DEEPWAVE	D EEP P ropagating G ravity W AVE E xperiment over N ew Z ealand
DLR	D eutsche Z entrum für L uft- und R aumfahrt
ECMWF	E uropean C entre for M edium-range W eather F orecast
ERA5	E CMWF R e A nalysis v5
FAIRO	F ast A IRborne O zone instrument
GPS	G lobal P ositioning S ystem
GTG	G raphical T urbulence G uidance
GW-LCYCLE I	G ravity W ave - L ife C YCLE E xperiment I
GW-LCYCLE II	G ravity W ave - L ife C YCLE E xperiment II
HALO	H igh A ltitude and L ONG range research aircraft
HIAPER	H ighperformance I nstrumented A irborne P latform for E nvironmental R esearch
IFS	I ntegrated F orecasting S ystem
KIT	K arlsruhe I nstitute of T echnology
KNMI	K öniglich N iederländisches M eteorologisches I nstitut
Lidar	L ight d etection and r anging
LMS	L ower M ost S tratosphere
LS	L ower S tratosphere
MLS	M icrowave L imb S ounder
MTSAT-2	M ultifunctional T ransport S ATellites-2
NASA	N ational A eronautics and S pace A dministration
NCAR	N ational C enter for A tmospheric R esearch
NOAA	N ational O ceanic and A tmospheric A dministration
NSF	N ational S cience F oundation
POLSTAR	P OLar S TARatospheric aerosol experiment
POLSTRACC	P OLar S TARatosphere in a C hanging C limate
QCL	Q uanten C ascade L aser
SALSA	S easonality of A ir mass transport and origin in the L owermost S tratosphere using the H ALO A ircraft
SouthTRAC	S outhern hemisphere - T RANsport C omposition dynamics

Abkürzungsverzeichnis

SRTM15+	S huttle R adar T opography M ission 15+
STE	S tratosphere- T roposphere- E xchange
STJ	S ub T ropical J et
STT	S tratosphere- T roposphere- T ransport
TE49	T hermo E nvironmental I nstruments M odel 49
TRIHOP	T Racer I n-situ quantum cascade laser absorption spectrometer / H ydrogen and O rganic P eroxide monitor
TST	T roposphere- S tratosphere- T ransport
TTL	T ropical T ropopause L ayer
UMAQS	U niversity of M ainz A irborne Q CL-based S pectrometer
UTC	U niversal T ime C oordinated
UTLS	U pper T roposphere and L ower S tratosphere
WMO	W orld M eteorological O rganization
WRF	W eather R esearch and F orecasting

Abbildungsverzeichnis

1.1.	Schematischer Querschnitt des zonalen Mittels der oberen Troposphäre und unteren Stratosphäre im nordhemisphärischen Sommer.	1
1.2.	Vertikaler Querschnitt einer Tropopausenfalte.	5
1.3.	Schematisches Diagramm von Transport und Mischung in der winterlichen Stratosphäre.	6
1.4.	Querschnitt der statischen Stabilität.	11
1.5.	Auftrittshäufigkeitsverteilung für starke vertikale Windscherung auf der nördlichen Hemisphäre.	13
1.6.	Zonal gemittelte N ₂ O-Verteilungen.	14
1.7.	Zonal gemittelte CO-Verteilungen.	15
1.8.	Zonal gemittelte O ₃ -Verteilungen.	16
2.1.	Schemazeichnung der O ₃ -CO-Korrelation.	25
2.2.	Zeitreihen der (PV) aus verschiedenen ECMWF-Datensätzen und mit verschiedenen Interpolationen.	33
2.3.	Zeitreihen von PV und Luftdruck.	33
2.4.	Gemessene und aus den Modellen interpolierte Zeitreihen von Temperatur, zonaler Windgeschwindigkeit, meridionaler Windgeschwindigkeit und O ₃	34
2.5.	Zeitreihen und Korrelation von PV und N ₂ O.	35
3.1.	Messflüge der DEEPWAVE 2014 Kampagne.	38
3.2.	Horizontalschnitte der horizontalen Windgeschwindigkeit.	39
3.3.	Satellitenbild im sichtbaren Wellenlängenbereich und Vertikalschnitt des Wolkeneiswassergehalts.	40
3.4.	Vertikalschnitt und Horizontalschnitt der Divergenz.	41
3.5.	Vertikalschnitt und Horizontalschnitt der PV.	41
3.6.	Vertikalschnitte von statischer Stabilität, vertikaler Windscherung und Richardson-Zahl.	42
3.7.	Zeitreihen des 9. Messflugs.	44
3.8.	N ₂ O-CO-Korrelation von Flug 9.	45
3.9.	Potentielle Temperatur und N ₂ O des südwestlichen Flugabschnitts.	46
3.10.	Flugpfad des südwestlichen Abschnitts.	47
3.11.	Hypothetische Entwicklung des N ₂ O-Profiles an der Tropopause unter dem Einfluss von Gebirgswellen.	48
3.12.	Gemessenes N ₂ O-Profil.	49
3.13.	Vertikale Ozonprofile aus den ECMWF-Daten.	50
3.14.	Korrelation von θ' -N ₂ O' mit einem gleitenden Mittel von 35 Sekunden und 200 Sekunden.	51
3.15.	Steigungen von θ' /N ₂ O' aufgetragen gegen die Mittelungsperiode.	52
3.16.	Wavelet-Kohärenz von N ₂ O und potentieller Temperatur.	53

3.17. Wavelet-Transformationen von N_2O , vertikaler Windgeschwindigkeit und potentieller Temperatur.	55
3.18. Kospektrum von N_2O und Vertikalwind.	56
3.19. Kospektrum von O_3 und Vertikalwind.	56
3.20. Korrelation von O_3 und N_2O	57
3.21. Lokale Spurengasflüsse von N_2O und vertikaler Windgeschwindigkeit.	58
3.22. Gemittelte Spurengasflüsse von N_2O und vertikaler Windgeschwindigkeit.	58
3.23. Spurengasflüsse von N_2O und vertikaler Windgeschwindigkeit mit variablem Mittel.	59
3.24. Spektrale Leistungsdichte der vertikalen Windgeschwindigkeit.	61
3.25. Spektrale Leistungsdichte der potentiellen Temperatur.	62
3.26. Spektrale Leistungsdichte des N_2O -Mischungsverhältnisses.	62
3.27. Gebirgswellenturbulenz entlang des Flugwegs.	64
4.1. Flugstrecken der Lokalflüge während der GW-LCYCLE II-Kampagne.	68
4.2. Verschiedene O_3 -Korrelationen mit den unbearbeiteten Daten.	70
4.3. O_3 -Korrelationen mit den bearbeiteten Daten.	71
4.4. O_3 - N_2O -Korrelation der GW-LCYCLE I Kampagne.	72
4.5. Unten: Zeitreihen der gemessenen und rekonstruierten O_3 Daten. Oben: Relative und absolute Abweichung.	73
4.6. Häufigkeitsverteilungen von relativer und absoluter Abweichung.	74
4.7. Häufigkeitsverteilungen der O_3 -Mischungsverhältnisse der POLSTRACC-Hintergrunddaten, GW-LCYCLE II-Messdaten und der korrigierten Daten.	75
4.8. Horizontalschnitt der PV.	76
4.9. Querschnitt der PV.	77
4.10. Zeitreihen des Messflugs.	77
4.11. Zeitliche Entwicklung der Tropopausenfalte.	79
4.12. Vertikalschnitt der Richardson-Zahl.	80
4.13. Zeitreihen von Richardson-Zahl, Scherung und Druckhöhe sowie eingeteilte troposphärische und stratosphärische Flugabschnitte.	81
4.14. Vertikalprofile der Richardson-Zahl und der Windscherung.	82
4.15. N_2O -CO-Korrelation von Flug 8.	84
4.16. O_3 -CO-Korrelation von Flug 8.	84
4.17. Die O_3 -CO-Korrelation der höchsten Flugfläche wurde mit der potentiellen Temperatur eingefärbt.	85
4.18. Zeitreihe des N_2O -Mischungsverhältnisses und des N_2O -Gradienten.	86
4.19. Vertikale Ozonflüsse der sechs horizontalen Flugabschnitte.	87
4.20. Querschnitt der PV mit eingeteilten horizontalen Flugabschnitten.	88
4.21. Korrelationen mit lokalem Ozonfluss.	89
4.22. Vertikalschnitte von Windscherung und Richardson-Zahl.	90
4.23. Spektrale Leistungsdichten von N_2O	91
4.24. Spektrale Leistungsdichten der potentiellen Temperatur.	93
4.25. Spektrale Leistungsdichte der vertikalen Windgeschwindigkeit.	93
4.26. Wavelet-Transformationen von N_2O und vertikaler Windgeschwindigkeit.	95
4.27. Kospektren von N_2O , bzw. O_3 und vertikaler Windgeschwindigkeit.	96
5.1. Ozonsäule vom Flugtag.	100
5.2. Horizontalschnitte der PV.	101

5.3.	Vertikalschnitt der PV.	102
5.4.	Horizontalschnitte von O_3	103
5.5.	O_3 - N_2O -Korrelation.	104
5.6.	Querschnitt und Horizontalschnitt der horizontalen Windgeschwindigkeit.	105
5.7.	Querschnitt und Horizontalschnitt der Divergenz.	106
5.8.	Querschnitt und Horizontalschnitt der vertikalen Windgeschwindigkeit.	107
5.9.	Zeitreihen des Messflugs.	108
5.10.	O_3 - N_2O -Korrelation in Abhängigkeit der potentiellen Temperatur.	110
5.11.	O_3 - N_2O -Korrelation in Abhängigkeit eines Wirbeltracers.	111
5.12.	Wavelet-Analyse der vertikalen Windgeschwindigkeit.	112
5.13.	Ausschnitt der O_3 - N_2O -Korrelation, in Abhängigkeit der vertikalen Windgeschwindigkeit.	113
5.14.	3-dimensionale Darstellung des südlichen Flugabschnitts über der Antarktischen Halbinsel.	114
5.15.	Vertikaler kinematischer N_2O -Fluss.	115
6.1.	N_2O -Profile von Flug 9 und 10.	123
6.2.	Zeitreihen der GW-LCYCLE I Messkampagne.	124
6.3.	Ausschnitt der gemessenen N_2O und O_3 Zeitreihen.	125
A.1.	Wavelet-Analyse eines Testsignals mit $\omega_0 = 6$	127
A.2.	Wavelet-Analyse eines Testsignals mit $\omega_0 = 3$	128
A.3.	Wavelet-Analyse eines Testsignals mit $\omega_0 = 12$	128
A.4.	Wavelet-Kohärenz zweier Sinusfunktion.	129
A.5.	Wavelet-Kohärenz zweier Sinusfunktion mit unterschiedlicher Phase.	129
A.6.	Wavelet-Kohärenz einer Sinusfunktion und eines Rauschsignals.	130
A.7.	Bodenmessungen des Methanmischungsverhältnisses während POLSTRACC.	131
A.8.	Wavelet-Analyse des Methansignals im offenen Strahlengang während South-TRAC.	131
B.1.	Steigungen von θ' und O_3' aufgetragen gegen die Mittelungsperiode.	132
C.1.	Vertikale N_2O -Flüsse der sechs horizontalen Flugabschnitte.	133
D.1.	Spektrale Leistungsdichte der horizontalen Windgeschwindigkeit.	134
D.2.	Spektrale Leistungsdichten der horizontalen Windgeschwindigkeit.	134

Tabellenverzeichnis

2.1. Übersicht der Verwendeten ECMWF-Felder.	32
4.1. Die Betragsmittelwerte der vertikalen O ₃ -Flüsse.	89
5.1. Vergleich der größten kinematischen Spurengasflüsse.	116

Literaturverzeichnis

- Aguiar-Conraria, L., and M. J. Soares, 2014: The continuous wavelet transform: Moving beyond uni- and bivariate analysis. *Journal of Economic Surveys*, **28** (2), 344–375, doi:10.1111/joes.12012.
- Alexander, M. J., and A. W. Grimsdell, 2013: Seasonal cycle of orographic gravity wave occurrence above small islands in the Southern Hemisphere: Implications for effects on the general circulation. *Journal of Geophysical Research Atmospheres*, **118** (20), 11,589–11,599, doi:10.1002/2013JD020526.
- Andrews, A. E., K. A. Boering, B. C. Daube, S. C. Wofsy, M. Loewenstein, H. Jost, J. R. Podolske, C. R. Webster, R. L. Herman, D. C. Scott, G. J. Flesch, E. J. Moyer, J. W. Elkins, G. S. Dutton, D. F. Hurst, F. L. Moore, E. A. Ray, P. A. Romashkin, and S. E. Strahan, 2001: Mean ages of stratospheric air derived from in situ observations of CO₂, CH₄, and N₂O. *Journal of Geophysical Research Atmospheres*, **106** (D23), 32 295–32 314, doi:10.1029/2001JD000465.
- Appenzeller, C., and J. R. Holton, 1997: Tracer lamination in the stratosphere: A global climatology. *Journal of Geophysical Research: Atmospheres*, **102** (D12), 13 555–13 569, doi:10.1029/97JD00066.
- Assonov, S. S., C. A. M. Brenninkmeijer, T. Schuck, and T. Umezawa, 2013: N₂O as a tracer of mixing stratospheric and tropospheric air based on CARIBIC data with applications for CO₂. *Atmospheric Environment*, **79**, 769–779, doi:10.1016/j.atmosenv.2013.07.035.
- Bacmeister, J. T., 1996: Stratospheric horizontal wavenumber spectra of winds, potential temperature, and atmospheric tracers observed by high-altitude aircraft. *Journal of Geophysical Research Atmospheres*, **101** (D5), 9441–9470, doi:10.1029/95JD03835.
- Bethan, S., G. Vaughan, and S. J. Reid, 1996: A comparison of ozone and thermal tropopause heights and the impact of tropopause definition on quantifying the ozone content of the troposphere. *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society*, **122** (532), 929–944, doi:10.1256/smsqj.53206.
- Birner, T., 2006: Fine-scale structure of the extratropical tropopause region. *Journal of Geophysical Research Atmospheres*, **111** (4), D04 104, doi:10.1029/2005JD006301.
- Bögel, W., and R. Baumann, 1991: Test and Calibration of the DLR Falcon Wind Measuring System by Maneuvers. *Journal of Atmospheric and Oceanic Technology*, **8** (1), 5–18, doi:10.1175/1520-0426(1991)008<0005:TACOTD>2.0.CO;2.
- Bönisch, H., A. Engel, T. Birner, P. Hoor, D. W. Tarasick, and E. A. Ray, 2011: On the structural changes in the Brewer-Dobson circulation after 2000. *Atmospheric Chemistry and Physics*, **11** (8), 3937–3948, doi:10.5194/acp-11-3937-2011.

- Bönisch, H., A. Engel, J. Curtius, T. Birner, and P. Hoor, 2009: Quantifying transport into the lowermost stratosphere using simultaneous in-situ measurements of SF₆ and CO₂. *Atmospheric Chemistry and Physics*, **9** (16), 5905–5919, doi:10.5194/acp-9-5905-2009.
- Boothe, A. C., and C. R. Homeyer, 2017: Global large-scale stratosphere-troposphere exchange in modern reanalyses. *Atmospheric Chemistry and Physics*, **17** (9), 5537–5559, doi:10.5194/acp-17-5537-2017.
- Bourqui, M. S., 2006: Stratosphere-troposphere exchange from the Lagrangian perspective: A case study and method sensitivities. *Atmospheric Chemistry and Physics*, **6** (9), 2651–2670, doi:10.5194/acp-6-2651-2006.
- Bramberger, M., A. Dörnbrack, H. Wilms, F. Ewald, and R. D. Sharman, 2020: Mountain-wave turbulence encounter of the research aircraft HALO above iceland. *Journal of Applied Meteorology and Climatology*, **59** (3), 567–588, doi:10.1175/JAMC-D-19-0079.1.
- Bramberger, M., A. Dörnbrack, K. Bossert, B. Ehard, D. C. Fritts, B. Kaifler, C. Mal-laun, A. Orr, P. D. Pautet, M. Rapp, M. J. Taylor, S. B. Vosper, B. P. Williams, and B. Witschas, 2017: Does Strong Tropospheric Forcing Cause Large-Amplitude Mesospheric Gravity Waves? A DEEPWAVE Case Study. *Journal of Geophysical Research: Atmospheres*, **122** (21), 11,422–11,443, doi:10.1002/2017JD027371.
- Brioude, J., J. P. Cammas, and O. R. Cooper, 2006: Stratosphere-troposphere exchange in a summertime extratropical low: Analysis. *Atmospheric Chemistry and Physics*, **6** (8), 2337–2353, doi:10.5194/acp-6-2337-2006.
- Butchart, N., 2014: Reviews of Geophysics The Brewer-Dobson circulation. *Rev. Geophys*, **52**, 157–184, doi:10.1002/2013RG000448.One.
- Chapman, S., 1930: A Theory of Atmospheric Ozone. *Royal Meteorological Society Memoirs*, **3**, 103–125.
- Chen, P., and W. A. Robinson, 1992: Propagation of Planetary Waves between the Troposphere and Stratosphere. *Journal of the Atmospheric Sciences*, **49** (24), 2533–2545, doi:10.1175/1520-0469(1992)049<2533:popwbt>2.0.co;2.
- Cho, J. Y., R. E. Newell, T. P. Bui, E. V. Browell, M. A. Fenn, M. J. Mahoney, G. L. Gregory, G. W. Sachse, S. A. Vay, T. L. Kucsera, and A. M. Thompson, 1999: Observations of convective and dynamical instabilities in tropopause folds and their contribution to stratosphere-troposphere exchange. *Journal of Geophysical Research Atmospheres*, **104** (D17), 21 549–21 568, doi:10.1029/1999JD900430.
- Cooper, O. R., A. Stohl, G. Hübler, E. Y. Hsie, D. D. Parrish, A. F. Tuck, G. N. Kiladis, S. J. Oltmans, B. J. Johnson, M. A. Shapiro, J. L. Moody, and A. S. Lefohn, 2005: Direct transport of midlatitude stratospheric ozone into the lower troposphere and marine boundary layer of the tropical Pacific Ocean. *Journal of Geophysical Research Atmospheres*, **110** (23), 1–15, doi:10.1029/2005JD005783.
- Crosson, E. R., 2008: A cavity ring-down analyzer for measuring atmospheric levels of methane, carbon dioxide, and water vapor. *Applied Physics B: Lasers and Optics*, **92** (3 SPECIAL ISSUE), 403–408, doi:10.1007/s00340-008-3135-y.
- Danielsen, E. F., 1968: Stratospheric-Tropospheric Exchange Based on Radioactivity, Ozone and Potential Vorticity. *Journal of the Atmospheric Sciences*, **25** (3), 502–518, doi:10.1175/1520-0469(1968)025<0502:stebor>2.0.co;2.

- Danielsen, E. F., R. S. Hipskind, W. L. Starr, J. F. Vedder, S. E. Gaines, D. Kley, and K. K. Kelly, 1991: Irreversible transport in the stratosphere by internal waves of short vertical wavelength. *Journal of Geophysical Research*, **96 (D9)**, 17 433, doi:10.1029/91JD01362.
- Eckermann, S. D., J. Ma, and D. Broutman, 2015: Effects of horizontal geometrical spreading on the parameterization of orographic gravity wave drag. Part I: Numerical transform solutions. *Journal of the Atmospheric Sciences*, **72 (6)**, 2330–2347, doi:10.1175/JAS-D-14-0147.1.
- Eckermann, S. D., D. Broutman, J. Ma, J. D. Doyle, P. D. Pautet, M. J. Taylor, K. Bossert, B. P. Williams, D. C. Fritts, and R. B. Smith, 2016: Dynamics of orographic gravity waves observed in the mesosphere over the auckland islands during the deep propagating gravity wave experiment (DEEPWAVE). *Journal of the Atmospheric Sciences*, **73 (10)**, 3855–3876, doi:10.1175/JAS-D-16-0059.1.
- Ehard, B., B. Kaifler, A. Dörnbrack, P. Preusse, S. D. Eckermann, M. Bramberger, S. Gisinger, N. Kaifler, B. Liley, J. S. Wagner, and M. Rapp, 2017: Horizontal propagation of large-amplitude mountain waves into the polar night jet. *Journal of Geophysical Research*, **122 (3)**, 1423–1436, doi:10.1002/2016JD025621.
- Ehhalt, D., M. Prather, F. Dentener, R. Derwent, E. Dlugokencky, E. Holland, I. Isaksen, J. Katima, V. Kirchhoff, P. Matson, P. Midgley, and M. Wang, 2001: Atmospheric Chemistry and Greenhouse Gases. Climate Change 2001: The Scientific Basis. Contribution of Working Group I to the Third Assessment Report of the Intergovernmental Panel on Climate Change. Tech. rep., 239–287 pp.
- Eibern, H., J. Hendricks, and A. Ebel, 1998: A climatology of tropopause folds by global analyses. *Theoretical and Applied Climatology*, **59 (3-4)**, 181–200, doi:10.1007/s007040050023.
- Engel, A., M. Strunk, M. Müller, H. P. Haase, C. Poss, I. Levin, and U. Schmidt, 2002: Temporal development of total chlorine in the high-latitude stratosphere based on reference distributions of mean age derived from CO₂ and SF₆. *Journal of Geophysical Research: Atmospheres*, **107 (12)**, 4136, doi:10.1029/2001jd000584.
- Ertel, H., 1942: Ein neuer hydrodynamischer Erhaltungssatz. *Die Naturwissenschaften*, **30 (36)**, 543–544, doi:10.1007/BF01475602.
- Fischer, H., F. G. Wienhold, P. Hoor, O. Bujok, C. Schiller, P. Siegmund, M. H. P. Ambaum, H. A. Scheeren, and J. Lelieveld, 2000: Tracer correlations in the northern high latitude lowermost stratosphere: Influence of cross-tropopause mass exchange. *Geophysical Research Letters*, **27 (1)**, 97–100, doi:10.1029/1999GL010879.
- Flocke, F., R. L. Herman, R. J. Salawitch, E. Atlas, C. R. Webster, S. M. Schauffler, R. A. Lueb, R. D. May, E. J. Moyer, K. H. Rosenlof, D. C. Scott, D. R. Blake, and T. P. Bui, 1999: An examination of chemistry and transport processes in the tropical lower stratosphere using observations of long-lived and short-lived compounds obtained during STRAT and POLARIS. *Journal of Geophysical Research: Atmospheres*, **104 (D21)**, 26 625–26 642, doi:10.1029/1999JD900504.
- Foken, T., 2016: *Angewandte Meteorologie*. Springer Berlin Heidelberg, Berlin, Heidelberg, 223–234 pp., doi:10.1007/978-3-642-25525-0.

- Forster, P. M. d. F., and K. P. Shine, 1997: Radiative forcing and temperature trends from stratospheric ozone changes. *Journal of Geophysical Research Atmospheres*, **102** (9), 10 841–10 855, doi:10.1029/96jd03510.
- Forster, P. M. d. F., and K. P. Shine, 2002: Assessing the climate impact of trends in stratospheric water vapor. *Geophysical Research Letters*, **29** (6), 10–1–10–4, doi:10.1029/2001gl013909.
- Fritts, D. C., and M. J. Alexander, 2003: Gravity wave dynamics and effects in the middle atmosphere. *Reviews of Geophysics*, **41** (1), 1003, doi:10.1029/2001RG000106.
- Fritts, D. C., R. B. Smith, M. J. Taylor, J. D. Doyle, S. D. Eckermann, A. Dörnbrack, M. Rapp, B. P. Williams, P. D. Pautet, K. Bossert, N. R. Criddle, C. A. Reynolds, P. A. Reinecke, M. Uddstrom, M. J. Revell, R. Turner, B. Kaifler, J. S. Wagner, T. Mixa, C. G. Kruse, A. D. Nugent, C. D. Watson, S. Gisinger, S. M. Smith, R. S. Lieberman, B. Laughman, J. J. Moore, W. O. Brown, J. A. Haggerty, A. Rockwell, G. J. Stossmeister, S. F. Williams, G. Hernandez, D. J. Murphy, A. R. Klekociuk, I. M. Reid, and J. Ma, 2016: The deep propagating gravity wave experiment (deepwave): An airborne and ground-based exploration of gravity wave propagation and effects from their sources throughout the lower and middle atmosphere. *Bulletin of the American Meteorological Society*, **97** (3), 425–453, doi:10.1175/BAMS-D-14-00269.1.
- Fueglistaler, S., A. E. Dessler, T. J. Dunkerton, I. Folkins, Q. Fu, and P. W. Mote, 2009: Tropical tropopause layer. *Reviews of Geophysics*, **47** (1), RG1004, doi:10.1029/2008RG000267.
- Gage, K. S., 1979: Evidence for a K-5/3 Law Inertial Range in Mesoscale Two-Dimensional Turbulence. *Journal of the Atmospheric Sciences*, **36** (10), 1950–1954, doi:10.1175/1520-0469(1979)036<1950:EFALIR>2.0.CO;2.
- Gage, K. S., and G. D. Nastrom, 1986: Theoretical interpretation of atmospheric wave-number spectra of wind and temperature observed by commercial aircraft during GASP. *Journal of the Atmospheric Sciences*, **43** (7), 729–740, doi:10.1175/1520-0469(1986)043<0729:TIOAWS>2.0.CO;2.
- Galperin, B., S. Sukoriansky, and P. S. Anderson, 2007: On the critical Richardson number in stably stratified turbulence. *Atmospheric Science Letters*, **8** (3), 65–69, doi:10.1002/asl.153.
- Geller, M. A., M. J. Alexander, P. T. Love, J. T. Bacmeister, M. Ern, A. Hertzog, E. Manzini, P. Preusse, K. Sato, A. A. Scaife, and T. Zhou, 2013: A comparison between gravity wave momentum fluxes in observations and climate models. *Journal of Climate*, **26** (17), 6383–6405, doi:10.1175/JCLI-D-12-00545.1.
- Gettelman, A., P. Hoor, L. L. Pan, W. J. Randel, M. I. Hegglin, and T. Birner, 2011: The extratropical upper troposphere and lower stratosphere. *Reviews of Geophysics*, **49** (3), RG3003, doi:10.1029/2011RG000355.
- Gisinger, S., A. Dörnbrack, V. Matthias, J. D. Doyle, S. D. Eckermann, B. Ehard, L. Hoffmann, B. Kaifler, C. G. Kruse, and M. Rapp, 2017: Atmospheric conditions during the deep propagating gravity wave experiment (DEEPWAVE). *Monthly Weather Review*, **145** (10), 4249–4275, doi:10.1175/MWR-D-16-0435.1.

- Greenblatt, J. B., 2002: Tracer-based determination of vortex descent in the 1999/2000 Arctic winter. *Journal of Geophysical Research*, **107** (D20), 8279, doi:10.1029/2001jd000937.
- Grinsted, A., J. C. Moore, and S. Jevrejeva, 2004: Application of the cross wavelet transform and wavelet coherence to geophysical time series. *Nonlinear Processes in Geophysics*, **11** (5/6), 561–566, doi:10.5194/npg-11-561-2004.
- Grise, K. M., D. W. Thompson, and T. Birner, 2010: A global survey of static stability in the stratosphere and upper troposphere. *Journal of Climate*, **23** (9), 2275–2292, doi:10.1175/2009JCLI3369.1.
- Guarino, M. V., M. A. C. Teixeira, and M. H. P. Ambaum, 2016: Turbulence generation by mountain wave breaking in flows with directional wind shear. *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society*, **142** (700), 2715–2726, doi:10.1002/qj.2862.
- Günther, G., R. Müller, M. Von Hobe, F. Stroh, P. Konopka, and C. M. Volk, 2008: Quantification of transport across the boundary of the lower stratospheric vortex during Arctic winter 2002/2003. *Atmospheric Chemistry and Physics*, **8** (13), 3655–3670, doi:10.5194/acp-8-3655-2008.
- Hartmann, D. L., K. R. Chan, B. L. Gary, M. R. Schoeberl, P. A. Newman, R. L. Martin, M. Loewenstein, J. R. Podolske, and S. E. Strahan, 1989: Potential vorticity and mixing in the south polar vortex during spring. *Journal of Geophysical Research*, **94** (D9), 11 625, doi:10.1029/JD094iD09p11625.
- Hegglin, M. I., and T. G. Shepherd, 2007: O₃-N₂O correlations from the Atmospheric Chemistry Experiment: Revisiting a diagnostic of transport and chemistry in the stratosphere. *Journal of Geophysical Research Atmospheres*, **112** (19), D19 301, doi:10.1029/2006JD008281.
- Heinzel, G., A. Rudiger, and R. Schilling, 2002: Spectrum and spectral density estimation by the Discrete Fourier transform (DFT), including a comprehensive list of window functions and some new flat-top windows. *Max Planck Inst*, **12**, doi:10.22027/395068.
- Held, A., 2014: Spectral Analysis of Turbulent Aerosol Fluxes by Fourier Transform, Wavelet Analysis, and Multiresolution Decomposition. *Boundary-Layer Meteorology*, **151** (1), 79–94, doi:10.1007/s10546-013-9889-8.
- Heller, R., 2018: Einfluss von Gebirgswellen auf die Wasserdampfverteilung in der oberen Troposphäre und unteren Stratosphäre. phdthesis, Ludwig-Maximilians-Universität München, doi:10.5282/edoc.23745.
- Heller, R., C. Voigt, S. Beaton, A. Dörnbrack, A. Giez, S. Kaufmann, C. Mallaun, H. Schlager, J. S. Wagner, K. Young, and M. Rapp, 2017: Mountain waves modulate the water vapor distribution in the UTLS. *Atmospheric Chemistry and Physics*, **17** (24), 14 853–14 869, doi:10.5194/acp-17-14853-2017.
- Hersbach, H., B. Bell, P. Berrisford, S. Hirahara, A. Horányi, J. Muñoz-Sabater, J. Nicolas, C. Peubey, R. Radu, D. Schepers, A. Simmons, C. Soci, S. Abdalla, X. Abellan, G. Balsamo, P. Bechtold, G. Biavati, J. Bidlot, M. Bonavita, G. De Chiara, P. Dahlgren, D. Dee, M. Diamantakis, R. Dragani, J. Flemming, R. Forbes, M. Fuentes, A. Geer, L. Haimberger, S. Healy, R. J. Hogan, E. Hólm, M. Janisková, S. Keeley, P. Laloyaux, P. Lopez, C. Lupu, G. Radnoti, P. de Rosnay, I. Rozum, F. Vamborg, S. Villaume,

- and J. N. Thépaut, 2020: The ERA5 global reanalysis. *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society*, **146** (730), 1999–2049, doi:10.1002/qj.3803.
- Highwood, E. J., and B. J. Hoskins, 1998: The tropical tropopause. *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society*, **124** (549), 1579–1604, doi:10.1002/qj.49712454911.
- Hints, E. J., K. A. Boering, E. M. Weinstock, J. G. Anderson, B. L. Gary, L. Pfister, B. C. Daube, S. C. Wofsy, M. Loewenstein, J. R. Podolske, J. J. Margitan, and T. P. Bui, 1998: Troposphere-to-stratosphere transport in the lowermost stratosphere from measurements of H₂O, CO₂, N₂O and O₃. *Geophysical Research Letters*, **25** (14), 2655–2658, doi:10.1029/98GL01797.
- Hoffmann, L., X. Xue, and M. J. Alexander, 2013: A global view of stratospheric gravity wave hotspots located with atmospheric infrared sounder observations. *Journal of Geophysical Research Atmospheres*, **118** (2), 416–434, doi:10.1029/2012JD018658.
- Holton, J. R., and G. J. Hakim, 2013: *An Introduction to Dynamic Meteorology*, An Introduction to Dynamic Meteorology, Vol. 9780123848. Elsevier, 1–532 pp., doi:10.1016/C2009-0-63394-8.
- Holton, J. R., P. H. Haynes, M. E. McIntyre, A. R. Douglass, R. B. Rood, and L. Pfister, 1995: Stratosphere-troposphere exchange. 403–439 pp., doi:10.1029/95RG02097.
- Homeyer, C. R., K. P. Bowman, L. L. Pan, M. A. Zondlo, and J. F. Bresch, 2011: Convective injection into stratospheric intrusions. *Journal of Geophysical Research Atmospheres*, **116** (23), doi:10.1029/2011JD016724.
- Hoor, P., H. Fischer, L. Lange, J. Lelieveld, and D. Brunner, 2002: Seasonal variations of a mixing layer in the lowermost stratosphere as identified by the CO–O₃ correlation from in situ measurements. *Journal of Geophysical Research Atmospheres*, **107** (5–6), ACL 1–1–ACL 1–11, doi:10.1029/2000jd000289.
- Hoor, P., C. Gurk, D. Brunner, M. I. Hegglin, H. Wernli, and H. Fischer, 2004: Seasonality and extent of extratropical TST derived from in-situ CO measurements during SPURT. *Atmospheric Chemistry and Physics*, **4** (5), 1427–1442, doi:10.5194/acp-4-1427-2004.
- Hoskins, B. J., 1991: Towards a PV- θ view of the general circulation. *Tellus A: Dynamic Meteorology and Oceanography*, **43** (4), 27–36, doi:10.3402/tellusa.v43i4.11936.
- Hoskins, B. J., M. E. McIntyre, and A. W. Robertson, 1985: On the use and significance of isentropic potential vorticity maps. *The Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society*, **111** (466), 877–946, doi:10.1002/qj.49711146602.
- Hudgins, L., C. A. Friehe, and M. E. Mayer, 1993: Wavelet transforms and atmospheric turbulence. *Physical Review Letters*, **71** (20), 3279–3282, doi:10.1103/PhysRevLett.71.3279.
- Huntrieser, H., M. Lichtenstern, M. Scheibe, H. Aufmhoff, H. Schlager, T. Pucik, A. Minikin, B. Weinzierl, K. Heimerl, D. Fütterer, B. Rappenglück, L. Ackermann, K. E. Pickering, K. A. Cummings, M. I. Biggerstaff, D. P. Betten, S. Honomichl, and M. C. Barth, 2016: On the origin of pronounced O₃ gradients in the thunderstorm outflow region during DC3. *Journal of Geophysical Research: Atmospheres*, **121** (11), 6600–6637, doi:10.1002/2015JD024279.
- Jesswein, M., H. Bozem, H.-C. Lachnitt, P. Hoor, T. Wagenhäuser, T. Keber, T. Schuck, and A. Engel, 2021: Comparison of Inorganic Chlorine in the Southern Hemispheric

- lowermost stratosphere during Late Winter 2019. *Atmospheric Chemistry and Physics Discussions*, 1–27, doi:10.5194/acp-2021-356.
- Jevrejeva, S., J. C. Moore, and A. Grinsted, 2003: Influence of the Arctic Oscillation and El Niño-Southern Oscillation (ENSO) on ice conditions in the Baltic Sea: The wavelet approach. *Journal of Geophysical Research: Atmospheres*, **108** (21), 4677, doi:10.1029/2003jd003417.
- Kaifler, B., N. Kaifler, B. Ehard, A. Dörnbrack, M. Rapp, and D. C. Fritts, 2015: Influences of source conditions on mountain wave penetration into the stratosphere and mesosphere. *Geophysical Research Letters*, **42** (21), 9488–9494, doi:10.1002/2015GL066465.
- Kaimal, J. C., and J. J. Finnigan, 1995: *Atmospheric boundary layer flows: Their structure and measurement*, Vol. 57. Oxford University Press, 1357 pp., doi:10.1016/0021-9169(95)90002-0.
- Kalicinsky, C., J. U. Grooß, G. Günther, J. Ungermann, J. Blank, S. Höfer, L. Hoffmann, P. Knieling, F. Olschewski, R. Spang, F. Stroh, and M. Riese, 2013: Observations of filamentary structures near the vortex edge in the Arctic winter lower stratosphere. *Atmospheric Chemistry and Physics*, **13** (21), 10 859–10 871, doi:10.5194/acp-13-10859-2013.
- Kaluza, T., D. Kunkel, and P. Hoor, 2018: Composite analysis of the tropopause inversion layer in extratropical baroclinic waves. *Atmospheric Chemistry and Physics Discussions*, 1–22, doi:10.5194/acp-2018-1100.
- Kaluza, T., D. Kunkel, and P. Hoor, 2021: On the occurrence of strong vertical wind shear in the tropopause region: a 10-year ERA5 northern hemispheric study. *Weather and Climate Dynamics*, **2** (3), 631–651, doi:10.5194/wcd-2-631-2021.
- Kennedy, P. J., and M. A. Shapiro, 1975: The Energy Budget in a Clear Air Turbulence Zone as Observed by Aircraft. *Monthly Weather Review*, **103** (7), 650–654, doi:10.1175/1520-0493(1975)103<0650:tebiac>2.0.co;2.
- Keyser, D., and M. A. Shapiro, 1986: A review of the structure and dynamics of upper-level frontal zones. *Monthly Weather Review*, **114** (2), 452–499, doi:10.1175/1520-0493(1986)114<0452:AROTSA>2.0.CO;2.
- Kim, Y., S. D. Eckermann, and H. Chun, 2003: An overview of the past, present and future of gravity-wave drag parametrization for numerical climate and weather prediction models. *Atmosphere-Ocean*, **41** (1), 65–98, doi:10.3137/ao.410105.
- Knudsen, B. M., and J. U. Grooß, 2000: Northern midlatitude stratospheric ozone dilution in spring modeled with simulated mixing. *Journal of Geophysical Research Atmospheres*, **105** (D5), 6885–6890, doi:10.1029/1999JD901076.
- Ko, M. K. W., P. A. Newman, S. Reimann, and S. E. Strahan, 2013: SPARC Report on Lifetimes of Stratospheric Ozone-Depleting Substances, Their Replacements, and Related Species. Tech. rep., SPARC, 256 pp. pp.
- Koch, S. E., B. D. Jamison, C. Lu, T. L. Smith, E. I. Tollerud, C. Girz, N. Wang, T. P. Lane, M. A. Shapiro, D. D. Parrish, and O. R. Cooper, 2005: Turbulence and gravity waves within an upper-level front. *Journal of the Atmospheric Sciences*, **62** (11), 3885–3908, doi:10.1175/JAS3574.1.
- Konopka, P., and L. L. Pan, 2012: On the mixing-driven formation of the Extratropical Transition Layer (ExTL). *Journal of Geophysical Research Atmospheres*, **117** (17), 1–9, doi:10.1029/2012JD017876.

- Konopka, P., H. M. Steinhorst, J. U. Grooß, G. Günther, R. Müller, J. W. Elkins, H.-J. Jost, E. Richard, U. Schmidt, G. C. Toon, and D. S. McKenna, 2004: Mixing and ozone loss in the 1999-2000 Arctic vortex: Simulations with the three-dimensional Chemical Lagrangian Model of the Stratosphere (CLaMS). *Journal of Geophysical Research: Atmospheres*, **109** (2), D02 315, doi:10.1029/2003jd003792.
- Kraus, H., 2004: *Die Atmosphäre der Erde*. Springer Berlin Heidelberg, doi:10.1007/3-540-35017-9.
- Krause, J., P. Hoor, A. Engel, F. Plöger, J. U. Grooß, H. Bönisch, T. Keber, B.-M. Sinnhuber, W. Woiwode, and H. Oelhaf, 2018: Mixing and ageing in the polar lower stratosphere in winter 2015-2016. *Atmospheric Chemistry and Physics*, **18** (8), 6057–6073, doi:10.5194/acp-18-6057-2018.
- Krautstrunk, M., and A. Giez, 2012: The Transition From FALCON to HALO Era Airborne Atmospheric Research. *Atmospheric Physics: Background - Methods - Trends*, U. Schuman, Ed., Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 609–624, doi:10.1007/978-3-642-30183-4_37.
- Kruse, C. G., and R. B. Smith, 2015: Gravity wave diagnostics and characteristics in mesoscale fields. *Journal of the Atmospheric Sciences*, **72** (11), 4372–4392, doi:10.1175/JAS-D-15-0079.1.
- Kunkel, D., P. Hoor, and V. Wirth, 2014: Can inertia-gravity waves persistently alter the tropopause inversion layer? *Geophysical Research Letters*, **41** (22), 7822–7829, doi:10.1002/2014GL061970.
- Kunkel, D., P. Hoor, and V. Wirth, 2016: The tropopause inversion layer in baroclinic life-cycle experiments: The role of diabatic processes. *Atmospheric Chemistry and Physics*, **16** (2), 541–560, doi:10.5194/acp-16-541-2016.
- Kunkel, D., P. Hoor, T. Kaluza, J. Ungermann, B. Kluschat, A. Giez, H.-C. Lachnitt, M. Kaufmann, and M. Riese, 2019: Evidence of small-scale quasi-isentropic mixing in ridges of extratropical baroclinic waves. *Atmospheric Chemistry and Physics*, **19** (19), 12 607–12 630, doi:10.5194/acp-19-12607-2019.
- Kunz, A., P. Konopka, R. Müller, and L. L. Pan, 2011: Dynamical tropopause based on isentropic potential vorticity gradients. *Journal of Geophysical Research Atmospheres*, **116** (1), doi:10.1029/2010JD014343.
- Lamarque, J. F., A. O. Langford, and M. H. Proffitt, 1996: Cross-tropopause mixing of ozone through gravity wave breaking: Observation and modeling. *Journal of Geophysical Research Atmospheres*, **101** (17), 22 969–22 976, doi:10.1029/96jd02442.
- Lane, T. P., J. D. Doyle, R. Plougonven, M. A. Shapiro, and R. D. Sharman, 2004: Observations and numerical simulations of inertia-gravity waves and shearing instabilities in the vicinity of a jet stream. *Journal of the Atmospheric Sciences*, **61** (22), 2692–2706, doi:10.1175/JAS3305.1.
- Lane, T. P., and R. D. Sharman, 2006: Gravity wave breaking, secondary wave generation, and mixing above deep convection in a three-dimensional cloud model. *Geophysical Research Letters*, **33** (23), 1–5, doi:10.1029/2006GL027988.
- Langford, A. O., M. H. Proffitt, T. E. VanZandt, and J. F. Lamarque, 1996: Modulation of tropospheric ozone by a propagating gravity wave. *Journal of Geophysical Research Atmospheres*, **101** (21), 26 605–26 613, doi:10.1029/96jd02424.

- Lin, Y.-L., 2007: *Mesoscale Dynamics*, Vol. 9780521808. Cambridge University Press, Cambridge, 1–630 pp., doi:10.1017/CBO9780511619649.
- Liu, Y., X. S. Liang, and R. H. Weisberg, 2007: Rectification of the bias in the wavelet power spectrum. *Journal of Atmospheric and Oceanic Technology*, **24** (12), 2093–2102, doi:10.1175/2007JTECHO511.1.
- Malinowski, S. P., H. Gerber, I. Jen-La Plante, M. K. Kopec, W. Kumala, K. Nurowska, P. Y. Chuang, D. Khelif, and K. E. Haman, 2013: Physics of Stratocumulus Top (POST): Turbulent mixing across capping inversion. *Atmospheric Chemistry and Physics*, **13** (24), 12 171–12 186, doi:10.5194/acp-13-12171-2013.
- Mallaun, C., A. Giez, and R. Baumann, 2015: Calibration of 3-D wind measurements on a single-engine research aircraft. *Atmospheric Measurement Techniques*, **8** (8), 3177–3196, doi:10.5194/amt-8-3177-2015.
- Manney, G. L., K. Krüger, J. L. Sabutis, S. A. Sena, and S. Pawson, 2005: The remarkable 2003–2004 winter and other recent warm winters in the Arctic stratosphere since the late 1990s. *Journal of Geophysical Research D: Atmospheres*, **110** (4), 1–14, doi:10.1029/2004JD005367.
- Manney, G. L., W. H. Daffer, J. M. Zawodny, P. F. Bernath, K. W. Hoppel, K. A. Walker, B. W. Knosp, C. D. Boone, E. E. Remsberg, M. L. Santee, V. L. Harvey, S. Pawson, D. R. Jackson, L. Deaver, C. T. McElroy, C. A. McLinden, J. R. Drummond, H. C. Pumphrey, A. Lambert, M. J. Schwartz, L. Froidevaux, S. McLeod, L. L. Takacs, M. J. Suarez, C. R. Trepte, D. C. Cuddy, N. J. Livesey, R. S. Harwood, and J. W. Waters, 2007: Solar occultation satellite data and derived meteorological products: Sampling issues and comparisons with Aura microwave limb sounder. *Journal of Geophysical Research Atmospheres*, **112** (24), 1–27, doi:10.1029/2007JD008709.
- Mauder, M., R. L. Desjardins, and I. MacPherson, 2007: Scale analysis of airborne flux measurements over heterogeneous terrain in a boreal ecosystem. *Journal of Geophysical Research Atmospheres*, **112** (13), D13 112, doi:10.1029/2006JD008133.
- McKenna, D. S., J. U. Grooß, G. Günther, P. Konopka, R. Müller, G. Carver, and Y. Sasano, 2002a: A new Chemical Lagrangian Model of the Stratosphere (CLaMS) 2. Formulation of chemistry scheme and initialization. *Journal of Geophysical Research Atmospheres*, **107** (15), ACH 4–1–ACH 4–14, doi:10.1029/2000JD000113.
- McKenna, D. S., P. Konopka, J. U. Grooß, G. Günther, R. Müller, R. Spang, D. Offermann, and Y. Orsolini, 2002b: A new Chemical Lagrangian Model of the Stratosphere (CLaMS) 1. Formulation of advection and mixing. *Journal of Geophysical Research*, **107** (D16), 4309, doi:10.1029/2000jd000114.
- McLandress, C., and T. G. Shepherd, 2009: Impact of climate change on stratospheric sudden warmings as simulated by the Canadian Middle Atmosphere model. *Journal of Climate*, **22** (20), 5449–5463, doi:10.1175/2009JCLI3069.1.
- Moustaoui, M., A. Mahalov, H. Teitelbaum, and V. Grubišić, 2010: Nonlinear modulation of O₃ and CO induced by mountain waves in the upper troposphere and lower stratosphere during terrain-induced rotor experiment. *Journal of Geophysical Research Atmospheres*, **115** (19), D19 103, doi:10.1029/2009JD013789.

- Mullendore, G. L., D. R. Durran, and J. R. Holton, 2005: Cross-tropopause tracer transport in midlatitude convection. *Journal of Geophysical Research D: Atmospheres*, **110** (6), 1–14, doi:10.1029/2004JD005059.
- Müller, R., U. Schmidt, A. Engel, and D. S. McKenna, 2001: The O₃-N₂O relation from balloon-borne observations as a measure of Arctic ozone loss in 1991/92. *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society*, **127** (574), 1389–1412, doi:10.1256/smsqj.57414.
- Müller, R., S. Tilmes, P. Konopka, J. U. Groöß, and H.-J. Jost, 2005: Impact of mixing and chemical change on ozone-tracer relations in the polar vortex. *Atmospheric Chemistry and Physics*, **5** (11), 3139–3151, doi:10.5194/acp-5-3139-2005.
- Müller, R., S. Tilmes, J. U. Groöß, A. Engel, H. Oelhaf, G. Wetzels, N. Huret, M. Pirre, V. Catoire, G. C. Toon, and H. Nakajima, 2007: Impact of mesospheric intrusions on ozone-tracer relations in the stratospheric polar vortex. *Journal of Geophysical Research Atmospheres*, **112** (23), 1–12, doi:10.1029/2006JD008315.
- Müller, S., 2015: Untersuchung von Mischungs- und Transportprozessen in der oberen Troposphäre / unteren Stratosphäre basierend auf in-situ Spurengasmessungen. Ph.D. thesis, Johannes Gutenberg Universität Mainz, doi:10.25358/openscience-1807.
- Müller, S., P. Hoor, F. Berkes, H. Bozem, M. Klingebiel, P. Reutter, H. G. J. Smit, M. Wendisch, P. Spichtinger, and S. Borrmann, 2015: In situ detection of stratosphere-troposphere exchange of cirrus particles in the midlatitudes. *Geophysical Research Letters*, **42** (3), 949–955, doi:10.1002/2014GL062556.
- Müller, S., P. Hoor, H. Bozem, E. Gute, B. Vogel, A. Zahn, H. Bönisch, T. Keber, M. Krämer, C. Rolf, M. Riese, H. Schlager, and A. Engel, 2016: Impact of the Asian monsoon on the extratropical lower stratosphere: Trace gas observations during TACTS over Europe 2012. *Atmospheric Chemistry and Physics*, **16** (16), 10 573–10 589, doi:10.5194/acp-16-10573-2016.
- Murphy, D. M., and D. W. Fahey, 1994: An estimate of the flux of stratospheric reactive nitrogen and ozone into the troposphere. *Journal of Geophysical Research*, **99** (D3), 5325–5332, doi:10.1029/93JD03558.
- Nappo, C. J., 2012: *An Introduction to Atmospheric Gravity Waves*. International Geophysics, Elsevier Science, 400 pp.
- Nastrom, G. D., and K. S. Gage, 1985: A climatology of atmospheric wavenumber spectra of wind and temperature observed by commercial aircraft. *Journal of the Atmospheric Sciences*, **42** (9), 950–960, doi:10.1175/1520-0469(1985)042<0950:ACOAWS>2.0.CO;2.
- National Environmental Satellite, Data, and Information Service (NESDIS), N., 2015: MTSAT-2 Satellite Data. Version 1.0. UCAR/NCAR - Earth Observing Laboratory. doi:https://doi.org/10.26023/38T5-DWM5-RF0X.
- Pan, L. L., P. Konopka, and E. V. Browell, 2006: Observations and model simulations of mixing near the extratropical tropopause. *Journal of Geophysical Research Atmospheres*, **111** (5), D05 106, doi:10.1029/2005JD006480.
- Pan, L. L., W. J. Randel, B. L. Gary, M. J. Mahoney, and E. J. Hints, 2004: Definitions and sharpness of the extratropical tropopause: A trace gas perspective. *Journal of Geophysical Research D: Atmospheres*, **109** (23), 1–11, doi:10.1029/2004JD004982.

- Pan, L. L., K. P. Bowman, M. A. Shapiro, W. J. Randel, R.-S. Gao, T. Campos, C. Davis, S. M. Schauffler, B. A. Ridley, J. C. Wei, and C. Barnet, 2007: Chemical behavior of the tropopause observed during the Stratosphere-Troposphere Analyses of Regional Transport experiment. *Journal of Geophysical Research Atmospheres*, **112** (18), 1–13, doi:10.1029/2007JD008645.
- Pavelin, E. G., J. A. Whiteway, R. Busen, and J. Hacker, 2002: Airborne observations of turbulence, mixing, and gravity waves in the tropopause region. *Journal of Geophysical Research: Atmospheres*, **107** (9-10), ACL 8–1–ACL 8–6, doi:10.1029/2001jd000775.
- Pavelin, E. G., J. A. Whiteway, and G. Vaughan, 2001: Observation of gravity wave generation and breaking in the lowermost stratosphere. *Journal of Geophysical Research Atmospheres*, **106** (D6), 5173–5179, doi:10.1029/2000JD900480.
- Pfister, G., G. Pétron, L. K. Emmons, J. C. Gille, D. P. Edwards, J. F. Lamarque, J. L. Attie, C. Granier, and P. C. Novelli, 2004: Evaluation of CO simulations and the analysis of the CO budget for Europe. *Journal of Geophysical Research D: Atmospheres*, **109** (19), D19 304, doi:10.1029/2004JD004691.
- Plöger, F., M. Riese, F. Haenel, P. Konopka, R. Müller, and G. Stiller, 2015: Variability of stratospheric mean age of air and of the local effects of residual circulation and eddy mixing. *Journal of Geophysical Research*, **120** (2), 716–733, doi:10.1002/2014JD022468.
- Plougonven, R., and F. Zhang, 2014: Internal gravity waves from atmospheric jets and fronts. *Reviews of Geophysics*, **52** (1), 33–76, doi:10.1002/2012RG000419.
- Plumb, R. A., 1994: Intrusions into the lower stratospheric Arctic vortex during the winter of 1991-1992. *Journal of Geophysical Research*, **99** (D1), 1089–1105, doi:10.1029/93JD02557.
- Plumb, R. A., 2002: Stratospheric transport. *Journal of the Meteorological Society of Japan*, **80** (4 B), 793–809, doi:10.2151/jmsj.80.793.
- Plumb, R. A., 2007: Tracer interrelationships in the stratosphere. *Reviews of Geophysics*, **45** (4), doi:10.1029/2005RG000179.
- Plumb, R. A., and M. K. W. Ko, 1992: Interrelationships between mixing ratios of long-lived stratospheric constituents. *Journal of Geophysical Research*, **97** (D9), 10 145–10 156, doi:10.1029/92jd00450.
- Plumb, R. A., D. W. Waugh, and M. P. Chipperfield, 2000: The effects of mixing on tracer relationships in the polar vortices. *Journal of Geophysical Research Atmospheres*, **105** (D8), 10 047–10 062, doi:10.1029/1999JD901023.
- Podglajen, A., T. P. Bui, J. M. Dean-Day, L. Pfister, E. J. Jensen, M. J. Alexander, A. Hertzog, B. Kärcher, R. Plougonven, and W. J. Randel, 2017: Small-scale wind fluctuations in the tropical tropopause layer from aircraft measurements: Occurrence, nature, and impact on vertical mixing. *Journal of the Atmospheric Sciences*, **74** (11), 3847–3869, doi:10.1175/JAS-D-17-0010.1.
- Polvani, L. M., A. H. Sobel, and D. W. Waugh, Eds., 2010: *The Stratosphere: Dynamics, Transport, and Chemistry*, Geophysical Monograph Series, Vol. 190. American Geophysical Union, Washington, D. C., doi:10.1029/GM190.
- Polvani, L. M., D. W. Waugh, G. J. Correa, and S. W. Son, 2011: Stratospheric ozone depletion: The main driver of twentieth-century atmospheric circulation changes in the

- Southern Hemisphere. *Journal of Climate*, **24** (3), 795–812, doi:10.1175/2010JCLI3772.1.
- Portele, T. C., A. Dörnbrack, J. S. Wagner, S. Gisinger, B. Ehard, P. D. Pautet, and M. Rapp, 2018: Mountain-wave propagation under transient tropospheric forcing: A DEEPWAVE case study. *Monthly Weather Review*, **146** (6), 1861–1888, doi:10.1175/MWR-D-17-0080.1.
- Poularikas, A., Ed., 2010: *Transforms and Applications Handbook*, Electrical Engineering Handbook, Vol. 43. Third edit ed., CRC Press, 911 pp., doi:10.1201/9781420066531.
- Press, W. H., S. A. Teukolsky, W. T. Vetterling, and B. P. Flannery, 1987: *Numerical Recipes: The Art of Scientific Computing*, Vol. 56. Cambridge University Press, 374 pp., doi:10.2307/4830.
- Proffitt, M. H., K. Aikin, A. F. Tuck, J. J. Margitan, C. R. Webster, G. C. Toon, and J. W. Elkins, 2003: Seasonally averaged ozone and nitrous oxide in the Northern Hemisphere lower stratosphere. *Journal of Geophysical Research D: Atmospheres*, **108** (3), doi:10.1029/2002jd002657.
- Proffitt, M. H., J. J. Margitan, K. K. Kelly, M. Loewenstein, J. R. Podolske, and K. R. Chan, 1990: Ozone loss in the Arctic polar vortex inferred from high-altitude aircraft measurements. *Nature*, **347** (6288), 31–36, doi:10.1038/347031a0.
- Proffitt, M. H., S. Solomon, and M. Loewenstein, 1992: Comparison of 2-D model simulations of ozone and nitrous oxide at high latitudes with stratospheric measurements. *Journal of Geophysical Research*, **97** (D1), 939–944, doi:10.1029/91JD02756.
- Rapp, M., B. Kaifler, A. Dörnbrack, S. Gisinger, T. Mixa, R. Reichert, N. Kaifler, S. Knobloch, R. Eckert, N. Wildmann, A. Giez, L. Krasauskas, P. Preusse, M. Geldenhuys, M. Riese, W. Woiwode, F. Friedl-Vallon, B.-M. Sinnhuber, A. De la Torre, P. Alexander, J. L. Hormaechea, D. Janches, M. Garhammer, J. L. Chau, J. Federico Conte, P. Hoor, and A. Engel, 2021: SOUTHTRAC-GW: An airborne field campaign to explore gravity wave dynamics at the world’s strongest hotspot. *Bulletin of the American Meteorological Society*, **102** (4), E871–E893, doi:10.1175/BAMS-D-20-0034.1.
- Reed, R. J., 1955: a Study of a Characteristic Type of Upper-Level Frontogenesis. *Journal of Meteorology*, **12** (3), 226–237, doi:10.1175/1520-0469(1955)012<0226:asoact>2.0.co;2.
- Reed, R. J., and E. F. Danielsen, 1958: Fronts in the vicinity of the tropopause. *Archiv für Meteorologie, Geophysik und Bioklimatologie Serie A*, **11** (1), 1–17, doi:10.1007/BF02247637.
- Reutter, P., B. Škerlak, M. Sprenger, and H. Wernli, 2015: Stratosphere-troposphere exchange (STE) in the vicinity of North Atlantic cyclones. *Atmospheric Chemistry and Physics*, **15** (19), 10 939–10 953, doi:10.5194/acp-15-10939-2015.
- Riese, M., F. Plöger, A. Rap, B. Vogel, P. Konopka, M. Dameris, and P. M. d. F. Forster, 2012: Impact of uncertainties in atmospheric mixing on simulated UTLS composition and related radiative effects. *Journal of Geophysical Research Atmospheres*, **117** (16), D16 305, doi:10.1029/2012JD017751.
- Riese, M., H. Oelhaf, P. Preusse, J. Blank, M. Ern, F. Friedl-Vallon, H. Fischer, T. Guggenmoser, M. Höpfner, P. Hoor, M. Kaufmann, J. Orphal, F. Plöger, R. Spang,

- O. Suminska-Ebersoldt, J. Ungermann, B. Vogel, and W. Woiwode, 2014: Gimballed Limb Observer for Radiance Imaging of the Atmosphere (GLORIA) scientific objectives. *Atmospheric Measurement Techniques*, **7** (7), 1915–1928, doi:10.5194/amt-7-1915-2014.
- Roedel, W., and T. Wagner, 2017: *Physik unserer Umwelt: Die Atmosphäre*. 5th ed., SpringerLink : Bücher, Springer Spektrum, Berlin, Heidelberg, Online-Ressource (XV, 597 S. 222 Abb., 7 Abb. in F pp.), doi:10.1007/978-3-662-54258-3.
- Roesch, A., and H. Schmidbauer, 2014: WaveletComp : A guided tour through the R-package. 1–38.
- Román-Cascón, C., C. Yagüe, L. Mahrt, M. Sastre, G. J. Steeneveld, E. Pardyjak, A. Van De Boer, and O. Hartogensis, 2015: Interactions among drainage flows, gravity waves and turbulence: A BLLAST case study. *Atmospheric Chemistry and Physics*, **15** (15), 9031–9047, doi:10.5194/acp-15-9031-2015.
- Sala, S., H. Bönisch, T. Keber, D. E. Oram, G. Mills, and A. Engel, 2014: Deriving an atmospheric budget of total organic bromine using airborne in situ measurements from the western Pacific area during SHIVA. *Atmospheric Chemistry and Physics*, **14** (13), 6903–6923, doi:10.5194/acp-14-6903-2014.
- Sankey, D., and T. G. Shepherd, 2003: Correlations of long-lived chemical species in a middle atmosphere general circulation model. *Journal of Geophysical Research: Atmospheres*, **108** (16), ACH 3–1–ACH 3–18, doi:10.1029/2002jd002799.
- Schilling, T., 1999: Flugzeuggetragene TDLAS-Spuren-gasmessungen in Leewellen über Nordskandinavien während der POLSTAR-Wintermeßkampagnen. Ph.D. thesis, Universität Bonn.
- Schilling, T., F. J. Lübken, F. G. Wienhold, P. Hoor, and H. Fischer, 1999: TDLAS trace gas measurements within mountain waves over Northern Scandinavia during the POLSTAR campaign in early 1997. *Geophysical Research Letters*, **26** (3), 303–306, doi:10.1029/1998GL900314.
- Schoeberl, M. R., B. N. Duncan, A. R. Douglass, J. W. Waters, N. J. Livesey, W. Read, and M. Filipiak, 2006: The carbon monoxide tape recorder. *Geophysical Research Letters*, **33** (12), L12811, doi:10.1029/2006GL026178.
- Schoeberl, M. R., and D. L. Hartmann, 1991: The dynamics of the stratospheric polar vortex and its relation to springtime ozone depletions. *Science*, **251** (4989), 46–52, doi:10.1126/science.251.4989.46.
- Schumann, U., 2019: The horizontal spectrum of vertical velocities near the tropopause from global to gravity wave scales. *Journal of the Atmospheric Sciences*, **76** (12), 3847–3862, doi:10.1175/JAS-D-19-0160.1.
- Schumann, U., B. Weinzierl, O. Reitebuch, H. Schlager, A. Minikin, C. Forster, R. Baumann, T. Sailer, K. Graf, H. Mannstein, C. Voigt, S. Rahm, R. Simmet, M. Scheibe, M. Lichtenstern, P. Stock, H. Rüba, D. Schäuble, A. Tafferner, M. Rautenhaus, T. Gerz, H. Ziereis, M. Krautstrunk, C. Mallaun, J.-F. Gayet, K. Lieke, K. Kandler, M. Ebert, S. Weinbruch, A. Stohl, J. Gasteiger, S. Groß, V. Freudenthaler, M. Wiegner, A. Ansmann, M. Tesche, H. Olafsson, and K. Sturm, 2011: Airborne observations of the Eyjafjalla volcano ash cloud over Europe during air space closure in April and May 2010. *Atmospheric Chemistry and Physics*, **11** (5), 2245–2279, doi:10.5194/acp-11-2245-2011.

- Seinfeld, J. H., and S. N. Pandis, 2016: *Atmospheric Chemistry and Physics: From Air Pollution to Climate Change*. 3rd ed., John Wiley and Sons, 1152 pp.
- Serafimovich, A., 2006: Investigation of inertia-gravity waves in the upper troposphere/lower stratosphere over northern Germany observed with collocated VHF/UHF radars. phdthesis, Universität Rostock.
- Setz, T., 2011: Wavelet Analysis on Stochastic Time Series. 1–63 pp.
- Shapiro, M. A., 1976: The Role of Turbulent Heat Flux in the Generation of Potential Vorticity in the Vicinity of Upper-Level Jet Stream Systems. *Monthly Weather Review*, **104** (7), 892–906, doi:10.1175/1520-0493(1976)104<0892:trothf>2.0.co;2.
- Shapiro, M. A., 1978: Further Evidence of the Mesoscale and Turbulent Structure of Upper Level Jet Stream–Frontal Zone Systems. *Monthly Weather Review*, **106** (8), 1100–1111, doi:10.1175/1520-0493(1978)106<1100:feotma>2.0.co;2.
- Shapiro, M. A., 1980: Turbulent Mixing within Tropopause Folds as a Mechanism for the Exchange of Chemical Constituents between the Stratosphere and Troposphere. *Journal of the Atmospheric Sciences*, **37** (5), 994–1004, doi:10.1175/1520-0469(1980)037<0994:tmwtfa>2.0.co;2.
- Shapiro, M. A., E. R. Reiter, R. D. Cadle, and W. A. Sedlacek, 1980: Vertical mass- and trace constituent transports in the vicinity of jet streams. *Archiv für Meteorologie, Geophysik und Bioklimatologie Serie B*, **28** (3), 193–206, doi:10.1007/BF02245351.
- Sharman, R. D., L. B. Cornman, G. Meymaris, J. M. Pearson, and T. Farrar, 2014: Description and derived climatologies of automated in situ eddy-dissipation-rate reports of atmospheric turbulence. *Journal of Applied Meteorology and Climatology*, **53** (6), 1416–1432, doi:10.1175/JAMC-D-13-0329.1.
- Sharman, R. D., and J. M. Pearson, 2017: Prediction of energy dissipation rates for aviation turbulence. Part I: Forecasting nonconvective turbulence. *Journal of Applied Meteorology and Climatology*, **56** (2), 317–337, doi:10.1175/JAMC-D-16-0205.1.
- Sharman, R. D., C. Tebaldi, G. Wiener, and J. Wolff, 2006: An integrated approach to mid- and upper-level turbulence forecasting. *Weather and Forecasting*, **21** (3), 268–287, doi:10.1175/WAF924.1.
- Sharman, R. D., S. B. Trier, T. P. Lane, and J. D. Doyle, 2012: Sources and dynamics of turbulence in the upper troposphere and lower stratosphere: A review. *Geophysical Research Letters*, **39** (12), 1–9, doi:10.1029/2012GL051996.
- Shepherd, T. G., 2007: Transport in the middle atmosphere. *Journal of the Meteorological Society of Japan*, **85** B, 165–191, doi:10.2151/jmsj.85B.165.
- Skamarock, W. C., S. H. Park, J. B. Klemp, and C. Snyder, 2014: Atmospheric kinetic energy spectra from global high-resolution nonhydrostatic simulations. *Journal of the Atmospheric Sciences*, **71** (11), 4369–4381, doi:10.1175/JAS-D-14-0114.1.
- Škerlak, B., M. Sprenger, S. Pfahl, E. Tyrlis, and H. Wernli, 2015: Tropopause folds in ERA-interim: Global climatology and relation to extreme weather events. *Journal of Geophysical Research*, **120** (10), 4860–4877, doi:10.1002/2014JD022787.
- Smith, R. B., B. K. Woods, J. Jensen, W. A. Cooper, J. D. Doyle, Q. Jiang, and V. Grubišić, 2008: Mountain waves entering the stratosphere. *Journal of the Atmospheric Sciences*, **65** (8), 2543–2562, doi:10.1175/2007JAS2598.1.

- Smith, R. B., A. D. Nugent, C. G. Kruse, D. C. Fritts, J. D. Doyle, S. D. Eckermann, M. J. Taylor, A. Dörnbrack, M. Uddstrom, W. A. Cooper, P. Romashkin, J. Jensen, and S. Beaton, 2016: Stratospheric gravity wave fluxes and scales during DEEPWAVE. *Journal of the Atmospheric Sciences*, **73** (7), 2851–2869, doi:10.1175/JAS-D-15-0324.1.
- Söder, J., C. Zülicke, M. Gerding, and F. J. Lübken, 2021: High-Resolution Observations of Turbulence Distributions Across Tropopause Folds. *Journal of Geophysical Research: Atmospheres*, **126** (6), 1–20, doi:10.1029/2020JD033857.
- Solomon, S., 1999: Stratospheric ozone depletion: A review of concepts and history. *Reviews of Geophysics*, **37** (3), 275–316, doi:10.1029/1999RG900008.
- Son, S. W., E. P. Gerber, J. Perlwitz, L. M. Polvani, N. P. Gillett, K. H. Seo, V. Eyring, T. G. Shepherd, D. W. Waugh, H. Akiyoshi, J. Austin, A. Baumgaertner, S. Bekki, P. Braesicke, C. Brühl, N. Butchart, M. P. Chipperfield, D. Cugnet, M. Dameris, S. Dhomse, S. Frith, H. Garny, R. Garcia, S. C. Hardiman, P. Jöckel, J. F. Lamarque, E. Mancini, M. Marchand, M. Michou, T. Nakamura, O. Morgenstern, G. Pitari, D. A. Plummer, J. A. Pyle, E. Rozanov, J. F. Scinocca, K. Shibata, D. Smale, H. Teyssdre, W. Tian, and Y. Yamashita, 2010: Impact of stratospheric ozone on Southern Hemisphere circulation change: A multimodel assessment. *Journal of Geophysical Research Atmospheres*, **115** (19), D00M07, doi:10.1029/2010JD014271.
- Spreitzer, E., R. Attinger, M. Boettcher, R. Forbes, H. Wernli, and H. Joos, 2019: Modification of potential vorticity near the tropopause by nonconservative processes in the ECMWF model. *Journal of the Atmospheric Sciences*, **76** (6), 1709–1726, doi:10.1175/JAS-D-18-0295.1.
- Sprenger, M., M. C. Maspoli, and H. Wernli, 2003: Tropopause folds and cross-tropopause exchange: A global investigation based upon ECMWF analyses for the time period March 2000 to February 2001. *Journal of Geophysical Research Atmospheres*, **108** (12), 8518, doi:10.1029/2002jd002587.
- Sprenger, M., H. Wernli, and M. Bourqui, 2007: Stratosphere-troposphere exchange and its relation to potential vorticity streamers and cutoffs near the extratropical tropopause. *Journal of the Atmospheric Sciences*, **64** (5), 1587–1602, doi:10.1175/JAS3911.1.
- Stohl, A., P. Bonasoni, P. Cristofanelli, W. Collins, J. Feichter, A. Frank, C. Forster, E. Gerasopoulos, H. Gäggeler, P. James, T. Kentarchos, H. Kromp-Kolb, B. Krüger, C. Land, J. Meloen, A. Papayannis, A. Priller, P. Seibert, M. Sprenger, G. J. Roelofs, H. E. Scheel, C. Schnabel, P. Siegmund, L. Tobler, T. Trickl, H. Wernli, V. Wirth, P. Zanis, and C. Zerefos, 2003: Stratosphere-troposphere exchange: A review, and what we have learned from STACCATO. *Journal of Geophysical Research Atmospheres*, **108** (12), 8516, doi:10.1029/2002jd002490.
- Strahan, S. E., M. Loewenstein, and J. R. Podolske, 1999: Climatology and small-scale structure of lower stratospheric N₂O based on in situ observations. *Journal of Geophysical Research Atmospheres*, **104** (D2), 2195–2208, doi:10.1029/1998JD200075.
- Strahan, S. E., M. Loewenstein, J. R. Podolske, W. L. Starr, K. R. Chan, M. H. Proffitt, and K. K. Kelly, 1989: Correlation of N₂O and ozone in the southern polar vortex during the Airborne Antarctic Ozone Experiment. *Journal of Geophysical Research*, **94** (D14), 16 749, doi:10.1029/JD094iD14p16749.

- Strunin, M. A., and T. Hiyama, 2004: Applying wavelet transforms to analyse aircraft-measured turbulence and turbulent fluxes in the atmospheric boundary layer over eastern Siberia. *Hydrological Processes*, **18** (16), 3081–3098, doi:10.1002/hyp.5750.
- Stull, R. B., 1988: *An introduction to boundary layer meteorology*. Atmospheric and Oceanographic Sciences Library, Springer Netherlands, doi:10.1007/978-94-009-3027-8.
- Tao, M., P. Konopka, F. Plöger, J. U. Grooß, R. Müller, C. M. Volk, K. A. Walker, and M. Riese, 2015: Impact of the 2009 major sudden stratospheric warming on the composition of the stratosphere. *Atmospheric Chemistry and Physics*, **15** (15), 8695–8715, doi:10.5194/acp-15-8695-2015.
- Teitelbaum, H., M. Moustou, J. Ovarlez, and H. Kelder, 1996: The role of atmospheric waves in the laminated structure of ozone profiles at high latitude. *Tellus, Series A: Dynamic Meteorology and Oceanography*, **48** (3), 442–455, doi:10.3402/tellusa.v48i3.12070.
- Tomikawa, Y., K. Sato, K. Kita, M. Fujiwara, M. Yamamori, and T. Sano, 2002: Formation of an ozone lamina due to differential advection revealed by intensive observations. *Journal of Geophysical Research: Atmospheres*, **107** (9-10), ACL 12–1–ACL 12–10, doi:10.1029/2001jd000386.
- Torrence, C., and G. P. Compo, 1998: A Practical Guide to Wavelet Analysis. *Bulletin of the American Meteorological Society*, **79** (1), 61–78, doi:10.1175/1520-0477(1998)079<0061:APGTWA>2.0.CO;2.
- Tozer, B., D. T. Sandwell, W. H. F. Smith, C. Olson, J. R. Beale, and P. Wessel, 2019: Global Bathymetry and Topography at 15 Arc Sec: SRTM15+. *Earth and Space Science*, **6** (10), 1847–1864, doi:10.1029/2019EA000658.
- Tuck, A. F., D. Baumgardner, K. R. Chan, J. E. Dye, J. W. Elkins, S. J. Hovde, K. K. Kelly, M. Loewenstein, J. J. Margitan, R. D. May, J. R. Podolske, M. H. Proffitt, K. H. Rosenlof, W. L. Smith, C. R. Webster, and J. C. Wilson, 1997: The Brewer-Dobson circulation in the light of high altitude in situ aircraft observations. *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society*, **123** (537), 1–69, doi:10.1256/smsqj.53701.
- Tung, K. K., and W. W. Orlando, 2003: The k-3 and k-5/3 energy spectrum of atmospheric turbulence: Quasigeostrophic two-level model simulation. *Journal of the Atmospheric Sciences*, **60** (6), 824–835, doi:10.1175/1520-0469(2003)060<0824:TKAKES>2.0.CO;2.
- Ungermann, J., L. L. Pan, C. Kalicinsky, F. Olschewski, P. Knieling, J. Blank, K. Weigel, T. Guggenmoser, F. Stroh, L. Hoffmann, and M. Riese, 2013: Filamentary structure in chemical tracer distributions near the subtropical jet following a wave breaking event. *Atmospheric Chemistry and Physics*, **13** (20), 10 517–10 534, doi:10.5194/acp-13-10517-2013.
- Vallis, G. K., 2017: *Atmospheric and oceanic fluid dynamics: Fundamentals and large-scale circulation, second edition*. 2nd ed., Cambridge University Press, 1–946 pp., doi:10.1017/9781107588417.
- van den Kroonenberg, A., and J. Bange, 2007: Turbulent flux calculation in the polar stable boundary layer: Multiresolution flux decomposition and wavelet analysis. *Journal of Geophysical Research Atmospheres*, **112** (6), doi:10.1029/2006JD007819.

- Van Der A, R. J., M. A. Allaart, and H. J. Eskes, 2015: Extended and refined multi sensor reanalysis of total ozone for the period 1970-2012. *Atmospheric Measurement Techniques*, **8** (7), 3021–3035, doi:10.5194/amt-8-3021-2015.
- Volk, C. M., J. W. Elkins, D. W. Fahey, G. S. Dutton, J. M. Gilligan, M. Loewenstein, J. R. Podolske, K. R. Chan, and M. R. Gunson, 1997: Evaluation of source gas lifetimes from stratospheric observations. *Journal of Geophysical Research Atmospheres*, **102** (21), 25 543–25 564, doi:10.1029/97jd02215.
- Vosper, S. B., 2015: Mountain waves and wakes generated by South Georgia: Implications for drag parametrization. *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society*, **141** (692), 2813–2827, doi:10.1002/qj.2566.
- Wagner, J. S., A. Dörnbrack, M. Rapp, S. Gisinger, B. Ehard, M. Bramberger, B. Witschas, F. Chouza, S. Rahm, C. Mallaun, G. Baumgarten, and P. Hoor, 2017: Observed versus simulated mountain waves over Scandinavia - improvement of vertical winds, energy and momentum fluxes by enhanced model resolution? *Atmospheric Chemistry and Physics*, **17** (6), 4031–4052, doi:10.5194/acp-17-4031-2017.
- Wallace, J. M., and P. V. Hobbs, 2006: *Atmospheric Science: An Introductory Survey: Second Edition*. International Geophysics, Elsevier Science, 1–488 pp., doi:10.1016/C2009-0-00034-8.
- Wang, P. K., 2003: Moisture plumes above thunderstorm anvils and their contributions to cross-tropopause transport of water vapor in midlatitudes. *Journal of Geophysical Research: Atmospheres*, **108** (D6), 2002JD002 581, doi:10.1029/2002JD002581.
- Waugh, D. W., R. A. Plumb, R. J. Atkinson, M. R. Schoeberl, L. R. Lait, P. A. Newman, M. Loewenstein, D. W. Toohey, L. M. Avallone, C. R. Webster, and R. D. May, 1994: Transport out of the lower stratospheric Arctic vortex by Rossby wave breaking. *Journal of Geophysical Research*, **99** (D1), 1071, doi:10.1029/93JD02556.
- Waugh, D. W., R. A. Plumb, J. W. Elkins, D. W. Fahey, K. A. Boering, G. S. Dutton, C. M. Volk, E. Keim, R.-S. Gao, B. C. Daube, S. C. Wofsy, M. Loewenstein, J. R. Podolske, K. R. Chan, M. H. Proffitt, K. K. Kelly, P. A. Newman, and L. R. Lait, 1997: Mixing of polar vortex air into middle latitudes as revealed by tracer-tracer scatterplots. *Journal of Geophysical Research: Atmospheres*, **102** (D11), 13 119–13 134, doi:10.1029/96JD03715.
- Whiteway, J. A., E. G. Pavelin, R. Busen, J. Hacker, and S. B. Vosper, 2003: Airborne measurements of gravity wave breaking at the tropopause. *Geophysical Research Letters*, **30** (20), 2–6, doi:10.1029/2003GL018207.
- Wilms, H., M. Bramberger, and A. Dörnbrack, 2020: Observation and simulation of mountain wave turbulence above Iceland: Turbulence intensification due to wave interference. *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society*, **146** (732), 3326–3346, doi:10.1002/qj.3848.
- WMO (World Meteorological Organization), 1957: Meteorology - A Three-Dimensional Science. Tech. Rep. 4, 134–138 pp.
- WMO (World Meteorological Organization), 2021: The State of Greenhouse Gases in the Atmosphere Based on Global Observations through 2020. Tech. rep.

- Woiwode, W., A. Dörnbrack, M. Bramberger, F. Friedl-Vallon, F. Haedel, M. Höpfner, S. Johansson, E. Kretschmer, I. Krisch, T. Latzko, H. Oelhaf, J. Orphal, P. Preusse, B.-M. Sinnhuber, and J. Ungermann, 2018: Mesoscale fine structure of a tropopause fold over mountains. *Atmospheric Chemistry and Physics Discussions*, 1–43, doi:10.5194/acp-2018-625.
- Woods, B. K., and R. B. Smith, 2010: Energy flux and wavelet diagnostics of secondary mountain waves. *Journal of the Atmospheric Sciences*, **67** (11), 3721–3738, doi:10.1175/2009JAS3285.1.
- Wright, C. J., N. P. Hindley, A. C. Moss, and N. J. Mitchell, 2016: Multi-instrument gravity-wave measurements over Tierra del Fuego and the Drake Passage-Part 1: Potential energies and vertical wavelengths from AIRS, COSMIC, HIRDLS, MLS-Aura, SAAMER, SABER and radiosondes. *Atmospheric Measurement Techniques*, **9** (3), 877–908, doi:10.5194/amt-9-877-2016.
- Zahn, A., J. Weppner, H. Widmann, K. Schlote-Holubek, B. Burger, T. Kühner, and H. Franke, 2012: A fast and precise chemiluminescence ozone detector for eddy flux and airborne application. *Atmospheric Measurement Techniques*, **5** (2), 363–375, doi:10.5194/amt-5-363-2012.
- Zahn, A., C. A. M. Brenninkmeijer, M. Maiss, D. H. Scharffe, P. J. Crutzen, M. Hermann, J. Heintzenberg, A. Wiedensohler, H. Güsten, G. Heinrich, H. Fischer, J. W. Cuijpers, and P. F. Van Velthoven, 2000: Identification of extratropical two-way troposphere-stratosphere mixing based on CARIBIC measurements of O₃, CO, and ultrafine particles. *Journal of Geophysical Research Atmospheres*, **105** (D1), 1527–1535, doi:10.1029/1999JD900759.
- Zängl, G., and V. Wirth, 2002: Synoptic-scale variability of the polar and subpolar tropopause: Data analysis and idealized PV inversions. *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society*, **128** (585), 2301–2315, doi:10.1256/qj.01.76.
- Zhang, F., J. Wei, M. Zhang, K. P. Bowman, L. L. Pan, E. Atlas, and S. C. Wofsy, 2015: Aircraft measurements of gravity waves in the upper troposphere and lower stratosphere during the START08 field experiment. *Atmospheric Chemistry and Physics*, **15** (13), 7667–7684, doi:10.5194/acp-15-7667-2015.
- Zierl, B., and V. Wirth, 1997: The influence of radiation on tropopause behavior and stratosphere-troposphere exchange in an upper tropospheric anticyclone. *Journal of Geophysical Research Atmospheres*, **102** (20), 23 883–23 894, doi:10.1029/97jd01667.

Danksagung

Aus Gründen des Datenschutzes ist die persönliche Danksagung in der digitalen Version nicht enthalten. Allen Personen, die sich angesprochen fühlen und mich während meiner Promotionszeit unterstützt haben, möchte ich herzlich danken!

