

Kompendium Theoretische Meteorologie

Max Henrik Balsmeier

© Max Henrik Balsmeier 2020
Entwurf - Weitergabe und Vervielfältigung jeglicher Art untersagt.

Inhaltsverzeichnis

1 EINLEITUNG		
1.1 Wichtige Literatur		9
1.2 Skalen		9
I Von der Physik zur Atmosphäre		13
2 PHYSIKALISCHE GRUNDLAGEN		
2.1 Klassische Mechanik		15
2.1.1 Newton'sche Mechanik		15
2.1.2 Lagrange-Formalismus		18
2.1.3 Hamilton-Formalismus		21
2.2 Elektrodynamik		22
2.2.1 Elektromagnetische Wellen		24
2.2.2 Energie des elektromagnetischen Feldes		25
2.2.2.1 Strahlungsgrößen		26
2.2.3 Spezielle Relativitätstheorie		27
2.2.4 Relativistische Behandlung des elektromagnetischen Feldes		30
2.3 Quantenmechanik		32
2.3.1 Freies Teilchen		33
2.3.2 Potentialtopf		34
2.3.3 Potentialstufe		35
2.3.4 Produktwellenfunktionen		36
2.3.5 Harmonischer Oszillator		37
2.3.6 Hilbert-Raum und Operatoren		39
2.3.6.1 Hilbert-Raum		39
2.3.6.2 Hermite'sche Operatoren		42
2.3.6.3 Kommutierende Operatoren		45
2.3.6.4 Leiteroperatoren		46
2.3.7 Unschärferelation		47
2.3.8 H-Atom		48
2.3.9 Drehimpuls		55
2.3.10 Spin		61
2.3.11 Störungstheorie		62
2.3.11.1 Zeitunabhängiger Fall		62
2.3.11.2 Spin-Bahn-Kopplung im H-Atom		65
2.3.11.3 Zeitabhängiger Fall		68
2.3.11.4 Übergänge im H-Atom		70
2.3.11.5 Relativistische Korrekturen im H-Atom		72
2.3.12 Mehrteilchensysteme		72
2.3.12.1 Molekülspektren		73
2.3.12.2 Chemische Reaktionen		73
2.4 Statistische Physik		73
2.4.1 Mikrokanonisches Ensemble		76
2.4.2 Kanonisches und großkanonisches Ensemble		80
2.4.3 Thermodynamische Potentiale		81
2.4.4 Ideales Gas		85
2.4.5 Klassische Systeme		89
2.4.5.1 Maxwell-Verteilung		90
2.4.5.2 Kinetisches Gasmodell		92
2.4.6 Phasenübergänge		93
2.4.7 Photonengas		95
3 HERRSCHENDE GLEICHUNGEN		101
3.1 Zustand der Atmosphäre		101
3.2 Forcings und Zeitableitungen		103
3.3 Kontinuitätsgleichungen		104
3.4 Impulsgleichung		107
3.4.1 Scheinkräfte		109
3.4.2 Reibung		109
3.4.3 Addition der Kräfte		111
3.4.4 Randbedingungen		112
3.4.5 Näherungen		112
3.4.5.1 Flachgeofluide		112
3.4.5.2 Streichen der vertikalen Coriolis-Beschleunigung		113

3.4.5.3	Vereinfachung der Krümmungsterme	113
3.4.5.4	Zusammenfassung der Vereinfachungen	113
3.4.5.5	Modifizierter Coriolis-Parameter	114
3.4.5.6	Flachwassergleichungen	115
3.4.5.6.1	Linearisierung	116
3.5	Generalisierte Vertikalkoordinaten	116
3.5.1	p-System	117
3.5.2	θ -System	118
3.5.3	σ_z -System	119
3.5.4	σ_p -System	120
3.6	Erster Hauptsatz in der Atmosphäre	120
3.6.1	Feuchte Luft	120
3.6.2	Kondensate	126
3.6.3	Virtuelle potentielle Temperatur	128
3.6.4	Pseudopotentielle Temperatur	128
3.7	Diabatie	128
3.7.1	Wärmeleitung	128
3.7.2	Phasenübergangswärme	128
3.7.3	Wärmeübergang	129
3.7.4	Dissipation	129
3.7.5	Strahlungsübertragungsgleichung	129
3.7.6	Randbedingungen	131
3.8	Integralrelationen einer einphasigen Atmosphäre	131
3.8.1	APE	134
3.9	Zusammenstellung der herrschenden Gleichungen	137

II Dynamik 139

4	WICHTIGE APPROXIMATIONEN	141
4.1	Hydrostatik	141
4.2	Barotropie	142
4.3	Geostrophie	143
4.4	Boussinesq-Approximation	144
4.5	Entwicklungen des Coriolis-Parameters in ebener Geometrie	145
4.5.1	f-Ebene	145
4.5.2	β -Ebene	146
4.6	Gradientenwind	146
4.7	Reibungswind	147
4.8	Euler-Wind	147
4.9	Zyklostrophischer Wind	147
5	VORTICITY UND DIVERGENZ	149
5.1	Vorticity	150
5.1.1	Scherungs- und Krümmungsvorticity	151
5.1.2	Zirkulationssatz	152
5.1.3	Vorticitygleichung	153
5.1.3.1	Vorticitygleichung im p-System	155
5.1.4	Barotrope potentielle Vorticity	156
5.2	Divergenz	157
5.2.1	Geschwindigkeits- und Richtungsdivergenz	157
5.2.2	Divergenzgleichung	157
5.2.2.1	Divergenzgleichung im p-System	158
5.3	Potentielle Vorticity	159
5.3.1	Ertel'scher Wirbelsatz	159
5.3.2	Definition und Eigenschaften der PV	161
6	WELLEN UND INSTABILITÄTEN	163
6.1	Kinematik	163
6.2	Begründung der Linearisierung	165
6.2.1	Beispiel: Schallwellen	166
6.3	Barotrope Wellen	167
6.3.1	Sub-Poincaré-Wellen	167
6.3.1.1	Stokes-Drift	168
6.3.2	Poincaré-Wellen	169
6.3.3	Kapillarwellen	170
6.3.4	Inertialwellen	172
6.3.5	Kelvin-Wellen	172

6.3.6	Äquatoriale Kelvin-Wellen	174
6.3.7	Globale Moden	176
6.3.8	Rossby-Wellen	176
6.3.8.1	Anschauliches Verständnis	177
6.4	Barokline Wellen	178
6.4.1	Schichtungswellen	178
6.4.2	Vertikale Moden	180
6.4.3	Barokline Rossby-Wellen	181
6.4.4	Schwerewellen	187
6.5	Instabilitäten	187
6.5.1	Barotropé Instabilität	187
6.5.2	Barokline Instabilität	189
6.5.3	Kelvin-Helmholtz-Instabilität	190
6.5.3.1	In diskreter Schichtung	190
6.5.3.2	In kontinuierlicher Schichtung	193
6.5.4	Thermische Instabilität	196
6.5.4.1	Pseudopotentielle Temperatur	200
6.5.4.2	Reversibel-pseudopotentielle Temperatur	200
6.5.4.3	CAPE	200
7	SYNOPTIK UND MESO-α-SAKLA DER EXTRATROPEN	203
7.1	Quasigeostrophie	203
7.1.1	Tendenzgleichung	203
7.1.2	ω -Gleichung	204
7.2	Semigeostrophie	204
7.3	PV-Denken	204
8	TROPISCHE DYNAMIK	205
8.1	Skalenanalyse	205
8.2	Zyklogenese	205
9	TURBULENZ	207
9.1	Ekman-Transport	209
9.1.1	Spin-down	212
9.2	Konkrete Mittelungsoptatoren	212
9.2.1	Gleitendes Zeitmittel	212
9.2.2	Allgemeines gewichtetes Mittel	213
9.3	Herleitung von Parametrisierungen	213
9.3.1	Beispiel: skalare Diffusion	213
9.3.2	Beispiel: Phasenübergangsraten	213
9.4	Turbulenzspektren	213
9.4.1	Das -3-Spektrum	213
9.4.2	Das -5/3-Spektrum	213
9.5	Energiekaskade	213
10	KLIMATOLOGIE DER ATMOSPHÄRE	215
10.1	Zonal gemittelte Gleichungen	215
10.2	Frontalzonen und Jets	215
11	OZEANZIRKULATION	217
11.1	Tide	217
11.2	Windgetriebene Zirkulation	217
11.3	Thermohaline Zirkulation	218
11.4	Windsee	218
III	Strahlung und Wolkenmikrophysik	219
12	STRAHLUNGSTRANSFER	221
12.1	Zwei-Strom-Methode	221
12.2	Berechnung der Streu- und Absorptionskoeffizienten	221
12.3	Atmosphärische Optik	221
13	WOLKENMIKROPHYSIK	223
13.1	Mehr zum Sättigungsdampfdruck	223
13.1.1	Mehr-Stoff-Systeme	223
13.1.2	Kelvin-Formel	223
13.1.3	Köhler-Formel	223
13.2	Zirkulation um Kondensate	223
13.2.1	Stokes'sche Reibung	223

13.3 Zirkulation in Kondensaten	223
IV Numerik	225
14 NUMERISCHE GRUNDLAGEN	227
14.1 Allgemeines über Diskretisierungen	227
14.1.1 Finite Differenzen	227
14.1.2 Zeitschrittverfahren	228
14.1.2.1 Explizites Euler-Verfahren	229
14.1.2.2 Implizites Euler-Verfahren	229
14.1.2.3 Runge-Kutta-Verfahren	230
14.1.2.4 Multischrittverfahren	230
14.2 Probleme und Methoden der Geofluidsimulation	231
14.3 Festlegung auf das C-Gitter	232
14.3.1 Skalare Erhaltungseigenschaft	232
14.4 Festlegung auf das hexagonale Gitter	233
15 ENTWICKLUNG EINES GLOBALEN DYNAMISCHEN KERNS	235
15.1 Gitter	235
15.1.1 Konstanten des hexagonalen Gitters	235
15.1.2 Horizontales Gitter	236
15.1.2.1 Delaunay-Triangulation	236
15.1.2.2 Voronoi-Diagramme	236
15.1.2.3 Gittergenerierung auf der Einheitskugel	236
15.1.2.4 Berechnung von Längen und horizontalen Flächen	236
15.1.3 Vertikale Erweiterung	236
15.1.3.1 Berechnung von vertikalen Flächen und Volumina	237
15.2 Felder	237
15.2.1 Skalarfelder	237
15.2.2 Vektorfelder	237
15.2.3 Duale Vektorfelder	237
15.3 Operatoren	238
15.3.1 Multiplikation eines Skalarfeldes mit einem Vektorfeld	238
15.3.2 Skalarprodukt	239
15.3.3 Vektorprodukt	239
15.3.4 Gradient	239
15.3.5 Divergenz	239
15.3.6 Rotation	240
15.3.7 Duale Rotation	240
15.4 Zusammensetzung der prognostischen Gleichungen	240
15.4.1 Relaxation der SGA	241
15.4.1.1 Gitteroptimierung	242
15.4.2 Geländefolgende Koordinaten	242
15.4.3 Ankopplung eines Strahlungsmodells	242
15.4.4 Berücksichtigung von Zusatzkomponenten	242
15.4.5 Zeitschrittverfahren	242
15.5 JW Test	242
15.5.1 Stationärer Grundzustand	242
15.5.2 Störung	242

V Anhang	243
-----------------	------------

A MATHEMATISCHE GRUNDLAGEN	245
A.1 cgs-System	245
A.2 Summen und Reihen	245
A.3 Kombinatorik	246
A.4 Determinanten	248
A.5 Grundfunktionen	249
A.6 Deltadistribution	253
A.7 Integralformeln	253
A.7.1 Residuensatz	255
A.8 Vektorräume	255
A.8.1 Vektorprodukt	257
A.9 Konvention über Koordinatensysteme	259
A.9.1 Ruhende Koordinaten	259
A.9.2 Globale Koordinaten	259
A.9.3 Geographische Koordinaten	259
A.10 Mehrdimensionale Ableitungen	259
A.10.1 Krümmungsradius	261

A.10.2 Rechenregeln für Differenzialoperatoren	263
A.11 Differenzialoperatoren unter Koordinatentransformationen	266
A.11.1 Kugelkoordinaten	268
A.11.1.1 Transformation auf geographische Koordinaten	271
A.12 Mehrdimensionale Integralrechnung	272
A.13 Schwerkraftfeld der Erde	274
A.13.1 Eigenschaften von Ellipsen und Ellipsoiden	274
A.14 Orthogonale Funktionensysteme	275
A.14.1 Legendre-Polynome	275
A.14.2 Hermite-Polynome	283
A.14.3 Laguerre-Polynome	285
A.14.4 Kugelflächenfunktionen	288
A.14.5 Komplexe Exponentialfunktionen	290

1 EINLEITUNG

Es existieren viele gute Lehrbücher zu den unterschiedlichen Bereichen der Meteorologie, insbesondere in der Dynamik ist die Menge an Literatur groß und ständig wachsend. Aber auch in der Wolkenphysik und Strahlung gibt es umfangreiche Standardwerke und eine gewisse Anzahl inhaltlich etwas ausgedünnter, dafür aber didaktisch aufbereiteter Bücher. Wie es für Lehrbücher typisch ist, werden in ihnen jedoch manche Herleitungen, genau wie in vielen Vorlesungen, vereinfacht oder zumindest verkürzt dargestellt. Beim theoretisch interessierten Leser oder Hörer kann dies dazu führen, dass ein Gefühl eines gewissen Zweifels an der Korrektheit der Theorie zurückbleibt. Darüber hinaus existieren zahlreiche unterschiedliche Notationen der Größen, sodass eine Literaturrecherche, beispielsweise zu Herleitungen und Voraussetzungen gewisser Konzepte, gelegentlich keine Klarheit bringt. Diese Lücke soll mit diesem Buch geschlossen werden. Es ist weder als ein reines Lehrbuch zu verstehen, denn in einem solchen wären die sprachlichen Erläuterungen wohl etwas weniger kondensiert ausgefallen; andererseits ist es auch keine reine Formelsammlung, denn eine solche enthält keine Herleitungen. Der Leser soll Antworten finden auf Fragen wie

- Wie kommt man auf die verschiedenen Formen der Divergenzgleichung im p-System?
- Unter welchen Voraussetzungen ist die quasigeostrophische Theorie eine ergiebige Näherung?

und wird eine mathematisch rigorose, aber keine didaktisch heruntergebrochene Vorstellung der Inhalte vorfinden; alle Voraussetzungen und Beschränkungen eines Konzepts werden klar als solche benannt. Die Herleitungen sind so kleinschrittig, das für einen in der gymnasialen Schulmathematik souveränen Leser Nebenrechnungen nicht nötig sein sollten.

Abgedeckt werden Dynamik, Strahlung, Wolkenmikrophysik und Numerik. In Teil I werden die herrschenden Gleichungen aus den physikalischen Grundgleichungen abgeleitet. Die dabei entfaltete Theorie ist grundlegend für alle Prozesse in der Atmosphäre. In Teil II werden die Luftströmungen einer Planetenatmosphäre untersucht, was man als *Dynamik* bezeichnet. In Abgrenzung hierzu geht es in Teil III um die darüber hinausgehenden Bereiche Strahlung und Wolkenmikrophysik. *Numerische Probleme* werden im vierten Teil behandelt, dort wird auch ein globaler *dynamischer Kern* entwickelt. Im Anhang werden mathematische Grundlagen abgearbeitet.

Als Einheitensystem wird das SI-System verwendet, außer in der Elektrodynamik, dort wird das cgs-System verwendet. Bei qualitativen Betrachtungen bedeutet ein horizontaler Pfeil → neben einer Größe, dass diese konstant bleibt, ein nach oben gerichteter Pfeil ↑, dass diese wächst, ein nach unten gerichteter Pfeil ↓, dass die Größe sinkt.

1.1 Wichtige Literatur

Folgende Bücher sind maßgeblich in den unterschiedlichen Bereichen:

- mathematische Formelsammlung: *Abramowitz et al.* [1]
- Kanon der Theoretischen Physik: z. B. *Fließbach* [8], [7], [9], [10]
- Kanon der Theoretischen Meteorologie: *Bott et al.* [25], [26], [27]
- Strahlungstransport: *Chandrasekhar* [5]
- Wolkenmikrophysik: *Pruppacher und Klett* [16]
- mesoskalige Meteorologie: *Ray (ed.)* [22]
- Wasseroberflächenwellen: *Massel* [18]
- generelle Einführung in Begrifflichkeiten, auch des Ozeans (für Herleitungen allerdings nicht zu empfehlen): *Cushman-Roisin et al.* [6]

1.2 Skalen

Das Wort *Skalen* bezeichnet Größenordnungen. Ziel der Skalenanalyse ist es, Gleichungen zu vereinfachen. Unterschiedliche Skalen sind durch unterschiedliche Phänomene charakterisiert, die sich typischerweise auf ihnen abspielen. Tab. 1.3 liefert einen Überblick über in der Meteorologie typischerweise verwendete Zeit- und Längenskalen, deren Bezeichnungen und typischen Erscheinungen. In Tabelle 1.3 sind einige wichtige Größen der synoptischen Skala aufgelistet.

Symbol / Bezeichnung	Bedeutung	evtl. Wert
k_B	Boltzmann-Konstante	$1,380649 \cdot 10^{-23} \text{ JK}^{-1}$ [20]
N_A	Avogadro-Konstante	$6,0221409 \cdot 10^{23} \text{ mol}^{-1} = 1$ [20]
$R = k_B \cdot N_A$	universelle Gaskonstante	$8,314463 \text{ Jmol}^{-1}\text{K}^{-1}$
R_s	spezifische Gaskonstante	
$c^{(p)}$	isobare spezifische Wärmekapazität	
$c^{(v)}$	isochore spezifische Wärmekapazität	
Index d	Bezug auf trockene Luft	
Index v	Bezug auf Wasserdampf	
Index g	Bezug auf den gasförmigen Anteil der Luft	
M_d	molare Masse trockener Luft	$0,028964420 \text{ kg/mol}$ [17]
M_v	molare Masse von Wasser	$0,01801527 \text{ kg/mol}$ [21]
ϵ'	M_v/M_d	$0,62197931$
ω	Winkelgeschwindigkeit der Erdrotation	$7,292115 \cdot 10^{-5} \text{ 1/s}$ [19]
a	Erdradius am Äquator	$6378137,0 \text{ m}$ [14]
$1/\tilde{f}$	Abplattung	$298,257223563$ [14]
β	<i>Obliquität</i> der Erdachse	$23,439279^\circ$ [19]
S_o	Solarkonstante	1361 W/m^2 [2]
Ω	Winkelgeschwindigkeit der Erdrevolution	$1,99099 \cdot 10^{-7} \text{ s}^{-1}$ [2]
M	Masse der Erde	$5,9723 \cdot 10^{24} \text{ kg}$ [2]
spezifisch	pro Masse	

Table 1.1: Symbole mit gleichbleibender Bedeutung, solange dies nicht am jeweiligen Ort anders definiert wird.

Bezeichnung	alternative Bezeichnung	Längenskala / m	Zeitskala / s	typische Phänomene
synoptische Skala	große Skala	$> 1 \cdot 10^6$	$> 1 \cdot 10^5$	Rossby-Wellen, extratropische Tiefdruckgebiete
Meso- α -Skala		$2 \cdot 10^5 - 2 \cdot 10^6$	$2 \cdot 10^4 - 2 \cdot 10^5$	tropische Zyklonen, Fronten
Meso- β -Skala		$2 \cdot 10^4 - 2 \cdot 10^5$	$2 \cdot 10^3 - 2 \cdot 10^4$	Land-Seewind-Zirkulation
Meso- γ -Skala	Sturmskala, konvektive Skala	$2 \cdot 10^3 - 2 \cdot 10^4$	$2 \cdot 10^{-2} - 2 \cdot 10^3$	Konvektion, Leewellen, Kelvin-Helmholtz-Instabilität
Mikroskala		$2 \cdot 10^{-3} - 2 \cdot 10^3$	$2 \cdot 10^{-4} - 2 \cdot 10^2$	Turbulenz, Umströmung von Häusern und Bäumen etc.
molekulare Skala		$< 2 \cdot 10^{-3}$	$< 2 \cdot 10^{-4}$	Impuls- und Stoffdiffusion, Strahlung

Table 1.2: Definitionen typischer Skalen in der Meteorologie. Natürlich sind diese Längen und Zeiten nicht technisch zu verstehen und die aufgeführten Phänomene können in den meisten Fällen auch auf den jeweils benachbarten Skalen auftreten.

Größe	Größenordnung
synoptische Längenskala L	10^6 m
Horizontalwind u, v	10^1 ms $^{-1}$
Vertikalwind w	10^{-2} ms $^{-1}$
Schwere g	10^1 ms $^{-2}$
charakteristische Höhe H	10^4 m
Zeitskala $T = L/u$	10^5 s
Erdradius a	10^7 m
Dichte ρ	10^0 kgm $^{-3}$
Coriolis-Parameter f	10^{-4} s $^{-1}$
horizontale Druckschwankung δp	10^3 Pa
vertikale Druckschwankung δp	10^5 Pa
Rossby-Parameter β	10^{-11} m $^{-1}$ s $^{-1}$
relative Vorticity ζ	10^{-5} s $^{-1}$
Horizontaldivergenz δ	10^{-5} s $^{-1}$
p -Vertikalgeschwindigkeit ω	10^{-1} Pas $^{-1}$

Table 1.3: Größenordnungen der synoptischen Skala, vgl. [13].

Abk.	Aussprache	Bedeutung
P	peta	10^{15}
T	terra	10^{12}
G	giga	10^9
M	mega	10^6
k	kilo	10^3
h	hekt	10^2
da	deka	10^1
d	dezi	10^{-1}
c	zenti	10^{-2}
m	milli	10^{-3}
μ	mikro	10^{-6}
n	nano	10^{-9}
p	pi	10^{-12}
f	femto	10^{-15}
a	atto	10^{-18}

Table 1.4: Dezimale Vorsilben.

Teil I

Von der Physik zur Atmosphäre

2 PHYSIKALISCHE GRUNDLAGEN

2.1 Klassische Mechanik

Die klassische Mechanik behandelt Massenpunkte, also Massen ohne räumliche Ausdehnung, die sich mit Geschwindigkeiten $\ll c$ bewegen (Übergang zur Relativitätstheorie) und nicht zu leicht sind (Übergang zur Quantenmechanik).

2.1.1 Newton'sche Mechanik

Die klassische Mechanik baut auf Newtons Axiomen auf [8]. Das wichtigste Axiom ist das *Zweite Newton'sche Axiom*:

Sei eine Punktmasse m mit Impuls \mathbf{p} gegeben, auf die die Kraft \mathbf{F} wirkt, dann gilt

$$\frac{d\mathbf{p}}{dt} = \mathbf{F}. \quad (2.1)$$

Der Impuls ist dabei definiert durch

$$\mathbf{p} := m \frac{d\mathbf{r}}{dt}, \quad (2.2)$$

wobei $\mathbf{r} = \mathbf{r}(t)$ die Bahnkurve des Massenpunktes ist. Das Erste Axiom ist ein Spezialfall des zweiten und somit unbedeutend. Das Dritte Newton'sche Axiom lautet:

Seien zwei Massen m_1 und m_2 gegeben. Seien \mathbf{F}_1 und \mathbf{F}_2 die Kräfte auf die Massen aufgrund der paarweisen Wechselwirkung (WW). Dann gilt

$$\mathbf{F}_1 = -\mathbf{F}_2. \quad (2.3)$$

Um die Theorie zu vervollständigen, führt man weiterhin zwei *Zusätze* zu den Newton'schen Axiomen ein. Zunächst legt man fest, dass, wenn $N \geq 1$ Kräfte \mathbf{F}_j auf einen Massenpunkt wirken, in Glg. (2.1) die Summe dieser Kräfte einzusetzen ist:

$$m \frac{d^2\mathbf{r}}{dt^2} = \sum_{j=1}^N \mathbf{F}_j \quad (2.4)$$

Darüber hinaus geht man davon aus, dass die Kraft \mathbf{F}_1 parallel zur Verbindungsgeraden $\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2$ ist:

$$\mathbf{F}_1 \parallel \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2 \quad (2.5)$$

Seien zwei Punktmassen m_1, m_2 an den Orten $\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2$ gegeben. Man definiert den *Schwerpunkt* \mathbf{R} durch

$$\mathbf{R} := \frac{m_1 \mathbf{r}_1 + m_2 \mathbf{r}_2}{M} \quad (2.6)$$

mit der Gesamtmasse

$$M := m_1 + m_2. \quad (2.7)$$

Für die Beschleunigung des Schwerpunktes gilt nach dem Zweiten Newton'schen Axiom

$$\frac{d^2\mathbf{R}}{dt^2} = \frac{m_1 \frac{d^2\mathbf{r}_1}{dt^2} + m_2 \frac{d^2\mathbf{r}_2}{dt^2}}{M} = \frac{1}{M} (\mathbf{F}_1 + \mathbf{F}_2), \quad (2.8)$$

wobei \mathbf{F}_1 die auf m_1 wirkende und \mathbf{F}_2 die auf m_2 wirkende Gesamtkraft darstellt. Diese kann man jeweils aufteilen in eine interne und in eine externe Kraft:

$$\mathbf{F}_1 = \mathbf{F}_1^{(\text{int})} + \mathbf{F}_1^{(\text{ext})} \quad (2.9)$$

$$\mathbf{F}_2 = \mathbf{F}_2^{(\text{int})} + \mathbf{F}_2^{(\text{ext})} \quad (2.10)$$

Die interne Kraft entsteht dabei durch Wechselwirkungen innerhalb des Systems. Aufgrund des Dritten Newton'schen Axioms gilt

$$\mathbf{F}_1^{(\text{int})} = -\mathbf{F}_2^{(\text{int})}. \quad (2.11)$$

Man erhält also

$$\frac{d^2 \mathbf{R}}{dt^2} = \frac{1}{M} \left(\mathbf{F}_1^{(\text{ext})} + \mathbf{F}_2^{(\text{ext})} \right). \quad (2.12)$$

Es gilt also eine Art Zweites Newton'sches Axiom

$$M \frac{d^2 \mathbf{R}}{dt^2} = \sum_i \mathbf{F}_i^{(\text{ext})} \quad (2.13)$$

für die Bewegung der Schwerpunktkoordinate. Man führt analog die Relativkoordinate

$$\mathbf{r} := \mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1 \quad (2.14)$$

ein. Diese erfüllt die Bewegungsgleichung

$$\frac{d^2 \mathbf{r}}{dt^2} = \frac{d^2 \mathbf{r}_2}{dt^2} - \frac{d^2 \mathbf{r}_1}{dt^2} = \frac{\mathbf{F}_1}{m_1} - \frac{\mathbf{F}_2}{m_2} \Leftrightarrow \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2} \frac{d^2 \mathbf{r}}{dt^2} = \frac{m_2}{m_1 + m_2} \mathbf{F}_1 - \frac{m_1}{m_1 + m_2} \mathbf{F}_2. \quad (2.15)$$

Nimmt man nun ausschließlich interne WW an, erhält man

$$\mu \frac{d^2 \mathbf{r}}{dt^2} = \mathbf{F}_1^{(\text{int})}. \quad (2.16)$$

Hierbei wurde die reduzierte Masse

$$\mu := \frac{m_1 m_2}{M} \quad (2.17)$$

eingeführt. Bei verschwindenden externen Kräften bewegt sich also effektiv eine Masse μ im Kraftfeld der paarweise WW, ihr Ortsvektor ist \mathbf{r} . Einige der Ergebnisse gelten auch bei $N \in \mathbb{N}$ mit $N \geq 1$ Teilchen. Es lassen sich zunächst eine Gesamtmasse

$$M := \sum_{i=1}^N m_i \quad (2.18)$$

sowie eine Schwerpunktkoordinate

$$\mathbf{R} := \frac{\sum_{i=1}^N m_i \mathbf{r}_i}{M} \quad (2.19)$$

definieren. Man leitet dies zweimal zeitlich ab und erhält

$$M \frac{d^2}{dt^2} \mathbf{R} = \sum_{i=1}^N m_i \frac{d^2}{dt^2} \mathbf{r}_i = \sum_{i=1}^N \mathbf{F}_i. \quad (2.20)$$

Es gilt wieder

$$\mathbf{F}_i = \mathbf{F}_i^{(\text{int})} + \mathbf{F}_i^{(\text{ext})} = \sum_{\substack{j=1, \\ j \neq i}}^N \mathbf{F}_i^{(j)} + \mathbf{F}_i^{(\text{ext})}. \quad (2.21)$$

Hierbei ist $\mathbf{F}_i^{(j)}$ die Kraft, die das j -te Teilchen auf das i -te Teilchen ausübt. Somit erhält man

$$\sum_{i=1}^N \mathbf{F}_i = \sum_{\substack{i,j=1, \\ i \neq j}}^N \mathbf{F}_i^{(j)} + \sum_{i=1}^N \mathbf{F}_i^{(\text{ext})} = \sum_{\substack{i,j=1, \\ i > j}}^N \mathbf{F}_i^{(j)} + \mathbf{F}_j^{(i)} + \sum_{i=1}^N \mathbf{F}_i^{(\text{ext})} = \sum_{\substack{i,j=1, \\ i > j}}^N \mathbf{F}_i^{(j)} - \mathbf{F}_i^{(j)} + \sum_{i=1}^N \mathbf{F}_i^{(\text{ext})} = \sum_{i=1}^N \mathbf{F}_i^{(\text{ext})}. \quad (2.22)$$

Hierbei wurde das Dritte Newton'sche Axiom

$$\mathbf{F}_i^{(j)} = -\mathbf{F}_j^{(i)} \quad (2.23)$$

eingesetzt. Dies bedeutet: Die internen WWen haben keinen Einfluss auf die Trajektorie des Schwerpunktes. Wirken keine externen Kräfte, ist der Gesamtimpuls konstant, man spricht vom *Impulserhaltungssatz*.

Es existiert eine Formulierung der Newton'schen Mechanik für Rotationen (Drehbewegungen). Der *Drehimpuls* \mathbf{L} eines Teilchens wird definiert durch

$$\mathbf{L} := \mathbf{r} \times \mathbf{p}. \quad (2.24)$$

Das *Drehmoment* \mathbf{F} ist

$$\mathbf{D} := \mathbf{r} \times \mathbf{F}. \quad (2.25)$$

Durch Ableiten von Glg. (2.24) folgt

$$\frac{d}{dt} \mathbf{L} = \frac{d\mathbf{r}}{dt} \times \mathbf{p} + \mathbf{r} \times \frac{d\mathbf{p}}{dt} = \mathbf{r} \times \mathbf{F} = \mathbf{D}. \quad (2.26)$$

Dies bezeichnet man auch als *Zweites Newton'sches Axiom der Rotation*, \mathbf{D} ist das Drehmoment. Für $N \in \mathbb{N}$ mit $N \geq 1$ Teilchen erhält man einen Gesamtdrehimpuls von

$$\mathbf{L} = \sum_{i=1}^N \mathbf{L}_i = \sum_{i=1}^m \mathbf{r}_i \times \mathbf{p}_i. \quad (2.27)$$

Für diesen gilt

$$\begin{aligned} \frac{d\mathbf{L}}{dt} &= \sum_{i=1}^N \mathbf{r}_i \times (\mathbf{F}_i^{(\text{int})} + \mathbf{F}_i^{(\text{ext})}) = \sum_{\substack{i,j=1, \\ i \neq j}}^N \mathbf{r}_i \times \mathbf{F}_i^{(j)} + \sum_{i=1}^N \mathbf{r}_i \times \mathbf{F}_i^{(\text{ext})} \\ &= \sum_{\substack{i,j=1, \\ i > j}}^N \mathbf{r}_i \times \mathbf{F}_i^{(j)} + \mathbf{r}_j \times \mathbf{F}_j^{(i)} + \sum_{i=1}^N \mathbf{r}_i \times \mathbf{F}_i^{(\text{ext})} = \sum_{\substack{i,j=1, \\ i > j}}^N \mathbf{F}_i^{(j)} \times (\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j) + \sum_{i=1}^N \mathbf{r}_i \times \mathbf{F}_i^{(\text{ext})} \\ &= \sum_{i=1}^N \mathbf{r}_i \times \mathbf{F}_i^{(\text{ext})}. \end{aligned} \quad (2.28)$$

Es wurde wieder das Dritte Newton'sche Axiom eingesetzt sowie die Zusatzaussage, dass die Kraft zwischen zwei Teilchen entlang der Verbindungsgeraden zwischen diesen wirkt. Wirken keine externen Kräfte, ist der Drehimpuls also erhalten, man spricht vom *Drehimpulserhaltungssatz*.

Es soll noch das Konzept der *Energie* eingeführt werden. Ein Kraftfeld ist eine Funktion $\mathbf{F} = \mathbf{F}(\mathbf{r})$, die jedem Punkt \mathbf{r} eine dort wirkende Kraft $\mathbf{F}(\mathbf{r})$ zuordnet. Ein Massenpunkt bewege sich entlang der Trajektorie $\mathbf{r} = \mathbf{r}(t)$. Dann definiert man die *Arbeit* W , die das Kraftfeld im Zeitintervall $[t_1, t_2]$ am Massenpunkt leistet, durch

$$W := \int_{t_1}^{t_2} \mathbf{F}(\mathbf{r}(t)) \cdot \frac{d\mathbf{r}}{dt} dt. \quad (2.29)$$

Mit dem Zweiten Newton'schen Axiom und partieller Integration folgt

$$\begin{aligned} W &= \int_{t_1}^{t_2} m \frac{d^2 \mathbf{r}}{dt^2} \cdot \frac{d\mathbf{r}}{dt} dt = \left[m \frac{d\mathbf{r}}{dt} \cdot \frac{d\mathbf{r}}{dt} \right]_{t_1}^{t_2} - \int_{t_1}^{t_2} m \frac{d\mathbf{r}}{dt} \cdot \frac{d^2 \mathbf{r}}{dt^2} dt \\ \Leftrightarrow W &= \frac{1}{2} m \mathbf{v}(t_2)^2 - \frac{1}{2} m \mathbf{v}(t_1)^2. \end{aligned} \quad (2.30)$$

Definiert man die *kinetische Energie* E_{kin} durch

$$E_{\text{kin}} := \frac{\mathbf{I}}{2} m \mathbf{v}^2, \quad (2.31)$$

folgt

$$W = \Delta E_{\text{kin}}. \quad (2.32)$$

Die vom Feld geleistet Arbeit wird also zu kinetischer Energie. Weiterhin nennt man ein Kraftfeld *konservativ*, wenn ein *Potential* $U = U(\mathbf{r})$ existiert mit

$$\mathbf{F} = -\nabla U. \quad (2.33)$$

In diesem Fall gilt nach Glg. (A.224)

$$\nabla \times \mathbf{F} = \mathbf{o}, \quad (2.34)$$

somit folgt mit dem Stokes'schen Satz Glg. (5.28)

$$\int_{\partial A} \mathbf{F} \cdot d\mathbf{s} = \mathbf{o} \quad (2.35)$$

für jede Fläche A , sodass die geleistete Arbeit vom Weg unabhängig ist. Definiert man die Gesamtenergie des Teilchens durch

$$E := E_{\text{kin}} + U, \quad (2.36)$$

so ist diese Größe erhalten:

$$\begin{aligned} \frac{dE}{dt} &= \frac{dE_{\text{kin}}}{dt} + \frac{dU}{dt} = \frac{\mathbf{I}}{2} m \frac{d\mathbf{r}}{dt} \cdot \frac{d^2\mathbf{r}}{dt^2} + \nabla U \cdot \frac{d\mathbf{r}}{dt} \\ &= \left(m \frac{d^2\mathbf{r}}{dt^2} + \nabla U \right) \cdot \frac{d\mathbf{r}}{dt} = (\mathbf{F} + \nabla U) \cdot \frac{d\mathbf{r}}{dt} = (-\nabla U + \nabla U) \cdot \frac{d\mathbf{r}}{dt} = \mathbf{o} \end{aligned} \quad (2.37)$$

$$\Rightarrow \frac{dE}{dt} = \mathbf{o} \quad (2.38)$$

Die Energie eines Teilchens, welches sich unter der Wirkung einer konservativen Kraft bewegt, ist also konstant.

Es existieren zwei weitere Formulierungen der klassischen Mechanik, der *Lagrange-Formalismus* sowie der *Hamilton-Formalismus*. Beide lassen sich aus den Newton'schen Axiomen herleiten.

2.1.2 Lagrange-Formalismus

Die Newton'sche Mechanik ist praktisch bei umherfliegenden Massenpunkten (Atome in einem Gas, Planeten in einem Sonnensystem) oder starren Körpern (Schiffe, Flugzeuge). Diese können sich prinzipiell frei in jede Richtung bewegen. Häufig sind jedoch solche Situationen, in denen ein Massenpunkt in seiner Bewegungsfreiheit eingeschränkt ist, beispielsweise eine Murmel in einer Murmelbahn, eine Billardkugel auf einem Tisch oder ein Zug in einem Gleis. Solche Systeme unterliegen *Zwangbedingungen*. Besteht das System aus genau einem Teilchen mit der Trajektorie $\mathbf{r} = \mathbf{r}(t)$, so kann man eine Zwangbedingung in der Form

$$g(\mathbf{r}, t) = \mathbf{o} \quad (2.39)$$

schreiben. g ist dabei irgendein Skalarfeld. Die Bedingung $g = \mathbf{o}$ kann man sich als eine Fläche vorstellen. Diese Fläche kann auch explizit zeitabhängig sein wie zum Beispiel ein vertikal beschleunigter Billardtisch. Glg. (2.39) bezeichnet man als *holonome Zwangbedingung*, alle anderen Zwangbedingungen heißen nichtholonom. Dies wäre zum Beispiel der Fall, wenn g eine Funktion von $\frac{d\mathbf{r}}{dt}$ wäre. Explizit zeitabhängige Zwangbedingungen heißen *rheonom*, während zeitunabhängige Zwangbedingungen *skleronom* genannt werden. Allgemein hat man N Teilchen, in diesem Fall kann man R Zwangbedingungen aufstellen

$$g_a(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N, t) = \mathbf{o} \quad (2.40)$$

mit $1 \leq a \leq R$ und $R \leq 3N - 1$. Bei $R = 3N$ könnte keine Bewegung mehr stattfinden, da jede Zwangsbedingung einen Freiheitsgrad eliminiert.

Die Einhaltung der Zwangsbedingungen wird durch die sogenannten Zwangskräfte sichergestellt. Diese sind senkrecht auf der durch die Zwangsbedingung vorgegebenen Fläche - dies kann man sich beispielsweise bei einer Bewegung auf einem Tisch leicht klarmachen. Die Reibungskraft wirkt zwar tangential zum Tisch, jedoch hat die Reibungskraft nichts mit der Einhaltung der Zwangsbedingung zu tun und ist daher auch keine Zwangskraft. Für eine Zwangskraft \mathbf{Z} kann man also ansetzen

$$\mathbf{Z}(\mathbf{r}, t) = \lambda(t) \nabla g(\mathbf{r}, t). \quad (2.41)$$

Der Multiplikator λ ist zeitabhängig, da die Zwangskraft von der zeitabhängigen Trajektorie abhängt. Man kann nun als Bewegungsgleichung notieren

$$m \frac{d^2}{dt^2} \mathbf{r} = \mathbf{F} + \lambda(t) \nabla g(\mathbf{r}, t), \quad (2.42)$$

hierbei ist \mathbf{F} die Summe aller Nicht-Zwangskräfte (Schwerkraft, Reibungskraft etc.). Hat man zwei Zwangsbedingungen gegeben, kann man dies verallgemeinern zu

$$m \frac{d^2}{dt^2} \mathbf{r} = \mathbf{F} + \sum_{a=1}^2 \lambda_a(t) \nabla g_a(\mathbf{r}, t). \quad (2.43)$$

Dies ist plausibel: $g_1 = 0$ und $g_2 = 0$ definieren zwei Flächen, in denen die Trajektorie verläuft. ∇g_1 und ∇g_2 stehen jeweils senkrecht auf der entsprechenden Fläche und somit auch auf der Trajektorie, außerdem sind sie linear unabhängig. Daher ist $\sum_{a=1}^2 \lambda_a(t) \nabla g_a(\mathbf{r}, t)$ ein allgemeiner Ansatz für eine Kraft senkrecht zur Trajektorie, also für eine allgemeine Zwangskraft. Man hat nun zusammen mit $g_1(\mathbf{r}, t) = g_2(\mathbf{r}, t) = 0$ fünf Gleichungen für die fünf unbekannten Funktionen $x(t), y(t), z(t), \lambda_1(t), \lambda_2(t)$. Es besteht also die Chance auf Lösbarkeit. Im Allgemeinen hat man N Teilchen mit den kartesischen Koordinaten x_n mit $1 \leq n \leq 3N$ gegeben, hierbei sind x_1, x_2, x_3 die Koordinaten des ersten Teilchens x_4, x_5, x_6 diejenigen des zweiten usw. Hat man $R \leq 3N - 1$ holonome Zwangsbedingungen $g_j(\mathbf{r}, t) = 0$ gegeben, kann man als Bewegungsgleichungen notieren

$$m_n \frac{d^2 x_n}{dt^2} = F_n + \sum_{a=1}^R \lambda_a(t) \frac{\partial g_a(x_1, \dots, x_{3N}, t)}{\partial x_n}. \quad (2.44)$$

Hierbei ist $m_1 = m_2 = m_3$ die Masse des ersten Teilchens usw. Zusammen mit den Zwangsbedingungen erhält man $3N + R$ Gleichungen an die $3N + R$ zu bestimmenden Funktionen $x_n(t), \lambda_a(t)$. Diese $3N + R$ Gleichungen bezeichnet man als *Lagrange-Gleichungen 1. Art*. Ist man an der Berechnung der Zwangskräfte nicht interessiert, bietet sich deren Eliminierung an. Dies wird nun durchgeführt.

Wie bereits angemerkt, eliminiert jede der Zwangsbedingungen g_a einen Freiheitsgrad. Die Anzahl der Freiheitsgrade

$$f = 3N - R \quad (2.45)$$

ist hier die Anzahl der Zahlen, die notwendig ist, um den Ort aller N Teilchen festzulegen. Diese Zahlen bezeichnet man als *generalisierte Koordinaten* q_1, \dots, q_f . Sie müssen zwei Bedingungen erfüllen:

1. Sie müssen die kartesischen Koordinaten festlegen, $x_n = x_n(q_1, \dots, q_f, t)$ für alle $1 \leq n \leq 3N$.
2. Sie müssen die Zwangsbedingungen berücksichtigen: $g_a(q_1, \dots, q_f, t) = 0$ für $1 \leq a \leq R$ und alle möglichen q_i .

Die zweite Bedingung lässt sich formal ausdrücken durch

$$\frac{dg_a}{dq_k} = \sum_{n=1}^{3N} \frac{\partial g_a}{\partial x_n} \frac{\partial x_n}{\partial q_k} = 0. \quad (2.46)$$

Multipliziert man Glg. (2.44) mit $\frac{\partial x_n}{\partial q_k}$, erhält man

$$m_n \frac{d^2 x_n}{dt^2} \frac{\partial x_n}{\partial q_k} = F_n \frac{\partial x_n}{\partial q_k} + \sum_{a=1}^R \lambda_a(t) \frac{\partial g_a(x_1, \dots, x_{3N}, t)}{\partial x_n} \frac{\partial x_n}{\partial q_k}. \quad (2.47)$$

Summiert man dies über n , folgt

$$\sum_{n=1}^{3N} m_n \frac{d^2 x_n}{dt^2} \frac{\partial x_n}{\partial q_k} = \sum_{n=1}^{3N} F_n \frac{\partial x_n}{\partial q_k}. \quad (2.48)$$

Diese Gleichung gilt für alle $1 \leq k \leq f$. Zwangskräfte treten hier nicht mehr auf. Man führt die folgenden Schreibweisen ein:

$$x := (x_1, \dots, x_n) \quad (2.49)$$

$$\dot{x} := (\dot{x}_1, \dots, \dot{x}_n) \quad (2.50)$$

$$q := (q_1, \dots, q_n) \quad (2.51)$$

$$\dot{q} := (\dot{q}_1, \dots, \dot{q}_n) \quad (2.52)$$

Die \dot{q}_i bezeichnet man auch als *generalisierte Geschwindigkeiten*. Man leitet nun die Transformationsgleichung

$$x_n = x_n(q, t) \quad (2.53)$$

total nach der Zeit ab:

$$\dot{x}_n = \frac{d}{dt} x_n(q, t) = \sum_{k=1}^f \frac{\partial x_n}{\partial q_k} \dot{q}_k + \frac{\partial x_n}{\partial t} = \dot{x}_n(q, \dot{q}, t) \quad (2.54)$$

Es folgt

$$\frac{\partial \dot{x}_n}{\partial \dot{q}_k} = \frac{\partial x_n}{\partial q_k}. \quad (2.55)$$

Für die kinetische Energie T gilt

$$T = T(\dot{x}) = \sum_{n=1}^{3N} \frac{1}{2} m_n \dot{x}_n^2. \quad (2.56)$$

Hier setzt man Glg. (2.54) ein:

$$T = T(q, \dot{q}, t) = \sum_{i,k=1}^f m_{i,k}(q, t) \dot{q}_i \dot{q}_k + \sum_{k=1}^f b_k(q, t) \dot{q}_k + c(q, t) \quad (2.57)$$

Aus Glg. (2.56) folgt

$$\frac{\partial T(q, \dot{q}, t)}{\partial q_k} = \sum_{n=1}^{3N} m_n \dot{x}_n \frac{\partial \dot{x}_n}{\partial q_k}. \quad (2.58)$$

Weiterhin gilt

$$\frac{\partial T(q, \dot{q}, t)}{\partial \dot{q}_k} = \sum_{n=1}^{3N} m_n \dot{x}_n \frac{\partial \dot{x}_n}{\partial \dot{q}_k} = \sum_{n=1}^{3N} m_n \dot{x}_n \frac{\partial x_n}{\partial q_k}. \quad (2.59)$$

Leitet man dies total nach der Zeit ab, erhält man

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial T}{\partial \dot{q}_k} = \sum_{n=1}^{3N} m_n \frac{d^2 x_n}{dt^2} \frac{\partial x_n}{\partial q_k} + \sum_{n=1}^{3N} m_n \dot{x}_n \frac{\partial \dot{x}_n}{\partial q_k}. \quad (2.60)$$

Im letztem Term wurde die folgende Identität ausgenutzt:

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial x_n}{\partial q_k} = \sum_{l=1}^f \frac{\partial^2 x_n}{\partial q_l \partial q_k} \dot{q}_l + \frac{\partial^2 x_n}{\partial t \partial q_k} = \frac{\partial}{\partial q_k} \left(\sum_{l=1}^f \frac{\partial x_n}{\partial q_l} \dot{q}_l + \frac{\partial x_n}{\partial t} \right) = \frac{\partial}{\partial q_k} \frac{dx_n}{dt} \quad (2.61)$$

Man definiert nun *verallgemeinerte Kräfte*:

$$Q_k := \sum_{n=1}^{3N} F_n \frac{\partial x_n}{\partial q_k} \quad (2.62)$$

Diese Definition setzt man zusammen mit Glg. (2.60) und Glg. (2.58) in Glg. (2.48) ein:

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial T}{\partial \dot{q}_k} \right) - \frac{\partial T}{\partial q_k} = Q_k \quad (2.63)$$

Man setzt für die Kräfte

$$F_n = -\frac{\partial U(x, \dot{x}, t)}{\partial x_n} + \frac{d}{dt} \frac{\partial U(x, \dot{x}, t)}{\partial \dot{x}_n} \quad (2.64)$$

mit einem Potential $U = U(x, \dot{x}, t)$ an. Im Falle einer geschwindigkeitsunabhängigen konservativen Kraft reduziert sich dies auf die aus der Newton'schen Mechanik bekannte Form, der zweite Term wurde hinzugefügt, um die Geschwindigkeitsabhängigkeit zu berücksichtigen. (x, \dot{x}) kann man bijektiv auf (q, \dot{q}) abbilden, daher kann man notieren

$$U = U(q, \dot{q}, t). \quad (2.65)$$

Jetzt kann man schreiben

$$Q_k = \sum_{n=1}^{3N} F_n \frac{\partial x_n}{\partial q_k} = -\sum_{n=1}^{3N} \frac{\partial U}{\partial x_n} \frac{\partial x_n}{\partial q_k} + \frac{d}{dt} \sum_{n=1}^{3N} \frac{\partial U}{\partial \dot{x}_n} \frac{\partial x_n}{\partial q_k} = -\frac{\partial U}{\partial q_k} + \frac{d}{dt} \frac{\partial U}{\partial \dot{q}_k}. \quad (2.66)$$

Damit folgt die Gleichung

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial (T - U)}{\partial \dot{q}_k} = \frac{\partial (T - U)}{\partial q_k}. \quad (2.67)$$

Man definiert die *Lagrange-Funktion* L durch

$$L(q, \dot{q}, t) := T(q, \dot{q}, t) - U(q, \dot{q}, t). \quad (2.68)$$

Damit erhält man

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial L(q, \dot{q}, t)}{\partial \dot{q}_k} = \frac{\partial L(q, \dot{q}, t)}{\partial q_k}. \quad (2.69)$$

Dies sind für $1 \leq k \leq f$ die *Lagrange-Gleichungen 2. Art*.

2.1.3 Hamilton-Formalismus

Der Hamilton-Formalismus bringt keine praktischen Vorteile gegenüber der Lagrange'schen Formulierung, jedoch ist er wichtig für den Übergang zur Quantenmechanik. Deshalb sei auch er hier kurz vorgestellt. Man definiert zunächst die *kanonischen Impulse* durch

$$p_i := \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \quad (2.70)$$

für $1 \leq i \leq f$. Man eliminiert nun die generalisierten Geschwindigkeiten \dot{q} :

$$p_i = \frac{\partial L(q, \dot{q}, t)}{\partial \dot{q}_i} \rightarrow \dot{q}_j = \dot{q}_j(q, p, t) \quad (2.71)$$

Die *Hamilton-Funktion* H wird definiert durch

$$H(q, p, t) := \sum_{i=1}^f \dot{q}_i(q, p, t) p_i - L(q, \dot{q}(q, p, t), t). \quad (2.72)$$

Die *Hamilton'schen Gleichungen* folgen durch partielle Differenzieren:

$$\frac{\partial H}{\partial q_k} = \sum_{i=1}^f \frac{\partial \dot{q}_i}{\partial q_k} p_i - \frac{\partial L}{\partial q_k} - \sum_{i=1}^f \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \frac{\partial \dot{q}_i}{\partial q_k} = -\frac{\partial L}{\partial q_k} = -\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_k} \right) = -\dot{p}_k \quad (2.73)$$

$$\frac{\partial H}{\partial p_k} = \sum_{i=1}^f \frac{\partial \dot{q}_i}{\partial p_k} p_i + \dot{q}_k - \sum_{i=1}^f \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \frac{\partial \dot{q}_i}{\partial p_k} = \dot{q}_k \quad (2.74)$$

$$\frac{\partial H}{\partial t} = \sum_{i=1}^f \frac{\partial \dot{q}_i}{\partial t} p_i - \sum_{i=1}^f \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \frac{\partial \dot{q}_i}{\partial t} - \frac{\partial L}{\partial t} = -\frac{\partial L}{\partial t} \quad (2.75)$$

Den Raum der (q, p) nennt man *Phasenraum*.

2.2 Elektrodynamik

In diesem Abschnitt wird das cgs-System verwendet, s. Absch. A.1. Für die Kraft \mathbf{F} auf ein Teilchen mit der Ladung q , welches sich mit der Geschwindigkeit \mathbf{v} durch das elektromagnetische Feld (\mathbf{E}, \mathbf{B}) bewegt, gilt

$$\mathbf{F} = q \left(\mathbf{E} + \frac{\mathbf{v}}{c} \times \mathbf{B} \right). \quad (2.76)$$

Diese Kraft bezeichnet man als *Lorentz-Kraft*. Die *Maxwell-Gleichungen* (MWGen) für das elektromagnetische Feld (EMF) (\mathbf{E}, \mathbf{B}) (ρ ist die Ladungsdichte und \mathbf{j} die Stromdichte) lauten

$$\nabla \cdot \mathbf{E} = 4\pi\rho, \quad (2.77)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{B} = 0, \quad (2.78)$$

$$\nabla \times \mathbf{E} + \frac{i}{c} \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} = 0, \quad (2.79)$$

$$\nabla \times \mathbf{B} - \frac{i}{c} \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} = \frac{4\pi}{c} \mathbf{j}. \quad (2.80)$$

Ladungen und Ströme sind also Quellen des elektromagnetischen Feldes. Die Glg.en (2.76) - (2.80) sind die Grundlage der ED, aus ihnen folgt die Theorie. Die MWGen haben eine einprägsame Struktur: Sie bestehen aus je einer Differenzialgleichung für den divergenten bzw. rotationsbehafteten Anteil der Felder \mathbf{E}, \mathbf{B} . Für jedes der Felder \mathbf{E} und \mathbf{B} gibt es eine homogene und eine inhomogene Gleichung. Mit dem Gauß'schen und dem Stokes'schen Satz ergeben sich die integralen Formen der Maxwell-Gleichungen:

$$\int_{\partial V} \mathbf{E} \cdot d\mathbf{n} = 4\pi Q \quad (2.81)$$

$$\int_{\partial V} \mathbf{B} \cdot d\mathbf{n} = 0 \quad (2.82)$$

$$\int_{\partial A} \mathbf{E} \cdot ds + \frac{i}{c} \frac{\partial}{\partial t} \int_A \mathbf{B} \cdot d\mathbf{n} = 0 \quad (2.83)$$

$$\int_{\partial A} \mathbf{B} \cdot ds - \frac{i}{c} \frac{\partial}{\partial t} \int_A \mathbf{E} \cdot d\mathbf{n} = \frac{4\pi}{c} I \quad (2.84)$$

Hierbei sind Q die Ladung in V und I der durch A tretende Strom. Die entsprechenden experimentellen Befunde, die zur Formulierung der Gleichungen führten, sind die folgenden:

- Coulomb'sches Gesetz
- Es gibt keine magnetischen Monopole.
- Faraday'sches Induktionsgesetz
- Ampère'sches Gesetz und Maxwell'scher Verschiebungsstrom

Wegen Glg. (2.78) existiert ein Vektorfeld \mathbf{A} mit

$$\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}, \quad (2.85)$$

das Feld \mathbf{A} nennt man *das Vektorpotential*. Damit ist Glg. (2.78) nach Glg. (A.225) erfüllt. Wegen der dritten Maxwell-Gleichung Glg. (2.79) gilt

$$\nabla \times \left(\mathbf{E} + \frac{i}{c} \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} \right) = \mathbf{o}. \quad (2.86)$$

Es existiert also ein Potential φ mit

$$\mathbf{E} = -\nabla \varphi - \frac{i}{c} \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t}, \quad (2.87)$$

φ nennt man *das skalare Potential*. Damit ist Glg. (2.79) erfüllt. Die Definitionen der Potentiale erhält man also aus den homogenen Maxwell-Gleichungen. Setzt man die bisherigen Festlegungen in Glg. (2.80) ein, erhält man mit Glg. (A.231)

$$-\Delta \mathbf{A} + \nabla (\nabla \cdot \mathbf{A}) + \frac{i}{c} \nabla \frac{\partial \varphi}{\partial t} + \frac{i}{c^2} \frac{\partial^2 \mathbf{A}}{\partial t^2} = \frac{4\pi}{c} \mathbf{j}. \quad (2.88)$$

Addiert man ein konservatives Feld $\nabla \varphi'$ zu \mathbf{A} hinzu, so ändert sich \mathbf{B} nicht. Mit der Ersetzung

$$\varphi \rightarrow \varphi - \frac{i}{c} \frac{\partial \varphi'}{\partial t} \quad (2.89)$$

ändert sich auch \mathbf{E} nicht. Dies nennt man die Eichinvarianz der MWGen. Die Eichung kann durch einen beliebigen linearen Zusammenhang der Potentiale festgelegt werden, mit der *Lorenz-Eichung*

$$\nabla \cdot \mathbf{A} + \frac{i}{c} \frac{\partial \varphi}{\partial t} = \mathbf{o} \quad (2.90)$$

wird die vierte MWG zu

$$\Delta \mathbf{A} - \frac{i}{c^2} \frac{\partial^2 \mathbf{A}}{\partial t^2} = -\frac{4\pi}{c} \mathbf{j}. \quad (2.91)$$

Die erste MWG wird zu

$$-\Delta \varphi - \frac{i}{c} \frac{\partial}{\partial t} \nabla \cdot \mathbf{A} = 4\pi \varphi \Leftrightarrow \Delta \varphi - \frac{i}{c^2} \frac{\partial^2 \varphi}{\partial t^2} = -4\pi \varphi. \quad (2.92)$$

Damit sind vier lineare, unabhängige Differenzialgleichungen für φ , \mathbf{A} gegeben, die die Maxwell-Gleichungen ersetzen. Über die Glg.en (2.87) und (2.85) kann hieraus das EMF (\mathbf{E} , \mathbf{B}) bestimmt werden.

Bildet man die partielle Zeitableitung von Glg. (2.77), multipliziert die Divergenz von Glg. (2.80) mit c und addiert die beiden resultierenden Gleichungen, erhält man

$$\nabla \cdot \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} - \nabla \cdot \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} = 4\pi \frac{\partial \varphi}{\partial t} + 4\pi \nabla \cdot \mathbf{j}$$

$$\Leftrightarrow \frac{\partial \varphi}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{j} = \mathbf{o}. \quad (2.93)$$

Dies ist die Kontinuitätsgleichung der Ladung. Nun sollen noch die Lagrange- und die Hamilton-Funktion eines Teilchens der Massen m und Ladung q im elektromagnetischen Feld (\mathbf{E}, \mathbf{B}) hergeleitet werden. Setzt man für das Potential $U = U(\mathbf{r}, \dot{\mathbf{r}}, t)$ an

$$U(\mathbf{r}, \dot{\mathbf{r}}, t) = q\varphi(\mathbf{r}, t) - \frac{q}{c}\mathbf{A}(\mathbf{r}, t) \cdot \dot{\mathbf{r}}, \quad (2.94)$$

so folgt mit Glg. (2.64)

$$\begin{aligned} \mathbf{F}(\mathbf{r}, \dot{\mathbf{r}}, t) &\stackrel{(A.229)}{=} -q\nabla\varphi + \frac{q}{c}(\dot{\mathbf{r}} \cdot \nabla)\mathbf{A} + \frac{q}{c}\dot{\mathbf{r}} \times \mathbf{B} - \frac{q}{c}\frac{D}{Dt}\mathbf{A} = q\left(-\nabla\varphi - \frac{1}{c}\frac{\partial\mathbf{A}}{\partial t} + \frac{1}{c}\dot{\mathbf{r}} \times \mathbf{B}\right) \\ &= q\left(\mathbf{E} + \frac{\dot{\mathbf{r}}}{c} \times \mathbf{B}\right). \end{aligned} \quad (2.95)$$

Es ergibt sich also die Lorentz-Kraft nach Glg. (2.76), dies zeigt die Richtigkeit des Ansatzes Glg. (2.94). Also lautet die Lagrange-Funktion eines Teilchens im EMF

$$L(\mathbf{r}, \dot{\mathbf{r}}, t) = \frac{m}{2}\dot{\mathbf{r}}^2 - q\varphi(\mathbf{r}, t) + \frac{q}{c}\dot{\mathbf{r}} \cdot \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) \quad (2.96)$$

Daraus folgt für die kanonischen Impulse

$$p_i = \frac{\partial L}{\partial \dot{x}_i} = m\dot{x}_i + \frac{q}{c}A_i \Rightarrow \dot{x}_i = \frac{1}{m}\left(p_i - \frac{q}{c}A_i\right). \quad (2.97)$$

Für die Hamilton-Funktion $H = H(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t)$ gilt somit

$$\begin{aligned} H(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) &= \frac{1}{m}\left(\mathbf{p} - \frac{q}{c}\mathbf{A}\right) \cdot \mathbf{p} - \frac{m}{2}\frac{1}{m^2}\left(\mathbf{p} - \frac{q}{c}\mathbf{A}\right)^2 + q\varphi(\mathbf{r}, t) - \frac{q}{cm}\left(\mathbf{p} - \frac{q}{c}\mathbf{A}\right) \cdot \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) \\ &= \frac{1}{m}\left(\mathbf{p} - \frac{q}{c}\mathbf{A}\right)\left(\mathbf{p} - \frac{1}{2}\left(\mathbf{p} - \frac{q}{c}\mathbf{A}\right) - \frac{q}{c}\mathbf{A}\right) + q\varphi(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{2m}\left(\mathbf{p} - \frac{q}{c}\mathbf{A}\right)^2 + q\varphi(\mathbf{r}, t). \end{aligned} \quad (2.98)$$

2.2.1 Elektromagnetische Wellen

Im Vakuum lauten die MWGen

$$\nabla \cdot \mathbf{E} = 0, \quad (2.99)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{B} = 0, \quad (2.100)$$

$$\nabla \times \mathbf{E} + \frac{1}{c}\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} = 0, \quad (2.101)$$

$$\nabla \times \mathbf{B} - \frac{1}{c}\frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} = 0. \quad (2.102)$$

Wendet man $\nabla \times$ auf die Glg.en (2.101) und (2.102) an, erhält man

$$-\Delta \mathbf{E} + \frac{1}{c}\frac{\partial}{\partial t}\nabla \times \mathbf{B} = 0 \Leftrightarrow \Delta \mathbf{E} - \frac{1}{c^2}\frac{\partial^2}{\partial t^2}\mathbf{E} = 0, \quad (2.103)$$

$$-\Delta \mathbf{B} - \frac{1}{c}\frac{\partial}{\partial t}\nabla \times \mathbf{E} = 0 \Leftrightarrow \Delta \mathbf{B} - \frac{1}{c^2}\frac{\partial^2}{\partial t^2}\mathbf{B} = 0, \quad (2.104)$$

also Wellengleichungen für das EMF (\mathbf{E}, \mathbf{B}). Man macht nun Ansätze

$$\mathbf{E} = \mathbf{E}_0 e^{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t)}, \quad (2.105)$$

$$\mathbf{B} = \mathbf{B}_0 e^{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t + \varphi)}. \quad (2.106)$$

Allgemeinere Wellen kann mit der FT aus der Überlagerung solcher ebener Wellen bekommen. Man sieht sofort, dass elektromagnetische Wellen im Vakuum dispersionsfrei sind und die Phasengeschwindigkeit c haben. Man ist interessiert an dem Verhältnis der Amplituden $\mathbf{E}_0, \mathbf{B}_0$, sowie an der Phasenverschiebung φ . Aus den Glg.en (2.99) und (2.100) folgt $\mathbf{E}_0, \mathbf{B}_0 \perp \mathbf{k}$. Elektromagnetische Wellen sind also Transversalwellen. Man stellt weiterhin mit Glg. (A.228) fest

$$\nabla \times \mathbf{E} = -i\mathbf{E} \times \mathbf{k}. \quad (2.107)$$

Außerdem gelten

$$\nabla \times \mathbf{B} = -i\mathbf{B} \times \mathbf{k}, \quad (2.108)$$

$$\frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} = -i\omega \mathbf{E}, \quad (2.109)$$

$$\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} = -i\omega \mathbf{B}. \quad (2.110)$$

Setzt man dies in die Glg.en (2.101) - (2.102) ein, erhält man

$$-i\mathbf{E} \times \mathbf{k} - \frac{i}{c} i\omega \mathbf{B} = 0, \quad (2.111)$$

$$-i\mathbf{B} \times \mathbf{k} + \frac{i}{c} i\omega \mathbf{E} = 0. \quad (2.112)$$

Mit $c = \frac{\omega}{k}$ folgt

$$\mathbf{E} \times \mathbf{k} = -k\mathbf{B}. \quad (2.113)$$

Hieraus folgen

$$\mathbf{E} \cdot \mathbf{B} = 0, \quad (2.114)$$

$$\varphi = 0. \quad (2.115)$$

Da $\mathbf{E} \perp \mathbf{k}$ gilt, ist

$$E = B \quad (2.116)$$

und somit

$$E_0 = B_0. \quad (2.117)$$

2.2.2 Energie des elektromagnetischen Feldes

Um die Energie des elektromagnetischen Feldes zu bestimmen, betrachtet man ein System aus N Ladungen q_i an den Orten \mathbf{r}_i . Die Arbeit, die das elektromagnetische Feld an diesem System leistet, ist nach Glg. (2.76) gegeben durch

$$\begin{aligned} W &= \sum_{i=1}^N \int \mathbf{F}(\mathbf{r}_i) \cdot \frac{d\mathbf{r}_i}{dt} dt = \sum_{i=1}^N \int q_i \left(\mathbf{E}(\mathbf{r}_i) + \frac{i}{c} \frac{d\mathbf{r}_i}{dt} \times \mathbf{B} \right) \cdot \frac{d\mathbf{r}_i}{dt} dt \\ &= \sum_{i=1}^N \int q_i \mathbf{E}(\mathbf{r}_i) \cdot \frac{d\mathbf{r}_i}{dt} dt. \end{aligned} \quad (2.118)$$

Daraus folgt

$$\frac{dW}{dt} = \sum_{i=1}^N q_i \mathbf{E}(\mathbf{r}_i) \cdot \frac{d\mathbf{r}_i}{dt}. \quad (2.119)$$

Hier kann man die Stromdichte

$$\mathbf{j}(\mathbf{r}, t) = \sum_{i=1}^N q_i \mathbf{v}_i \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i) \quad (2.120)$$

einsetzen:

$$\frac{dW}{dt} = \int_{\mathbb{R}^3} \mathbf{j} \cdot \mathbf{E} d^3 r \quad (2.121)$$

Dies kann man mittels der Maxwell-Gleichungen umformen,

$$\mathbf{j} \cdot \mathbf{E} = \frac{c}{4\pi} \mathbf{E} \cdot \nabla \times \mathbf{B} - \frac{1}{4\pi} \mathbf{E} \cdot \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t}. \quad (2.122)$$

Mit Glg. (A.232) erhält man

$$\mathbf{j} \cdot \mathbf{E} = -\frac{c}{4\pi} \nabla \cdot (\mathbf{E} \times \mathbf{B}) + \frac{c}{4\pi} \mathbf{B} \cdot \nabla \times \mathbf{E} - \frac{1}{8\pi} \frac{\partial \mathbf{E}^2}{\partial t} = -\frac{c}{4\pi} \nabla \cdot (\mathbf{E} \times \mathbf{B}) - \frac{1}{8\pi} \frac{\partial}{\partial t} (\mathbf{E}^2 + \mathbf{B}^2). \quad (2.123)$$

Nun definiert man die Energiedichte w des elektromagnetischen Feldes durch

$$w(\mathbf{r}, t) := \frac{1}{8\pi} (\mathbf{E}^2 + \mathbf{B}^2) \quad (2.124)$$

sowie die Strahlungsflussdichte als

$$\mathbf{S}(\mathbf{r}, t) := \frac{c}{4\pi} (\mathbf{E} \times \mathbf{B}). \quad (2.125)$$

Damit folgt

$$\frac{\partial w}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{S} = -\mathbf{j} \cdot \mathbf{E}. \quad (2.126)$$

Glg. (2.126) ist das *Poynting-Theorem*. Dies kann man sich noch veranschaulichen. Man integriert dazu Glg. (2.126) über ein zeitunabhängiges Volumen V :

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_V w(\mathbf{r}, t) d^3 r + \int_{\partial V} \mathbf{S} \cdot d\mathbf{n} = -\frac{dW}{dt}. \quad (2.127)$$

Ist Glg. (2.124) die Energiedichte des elektromagnetischen Feldes, so ist

$$U = \int_V w(\mathbf{r}, t) d^3 r \quad (2.128)$$

die Energie desselben. Somit folgt

$$\frac{dU}{dt} + \frac{dW}{dt} = - \int_{\partial V} \mathbf{S} \cdot d\mathbf{n}. \quad (2.129)$$

2.2.2.1 Strahlungsgrößen

Strahlung bedeutet Energietransport durch elektromagnetische Wellen. Die physikalischen Größen, die Strahlung beschreiben, werden Strahlungsgrößen genannt. Die spektralen Größen sind dabei folgendermaßen zu verstehen: Man stellt sich ein Gerät vor, was die zugrundeliegende Größe nach Wellenlängen gefiltert messen kann. Man misst beispielsweise einen Strahlungsfluss φ , der auf ein System wirkt, aber die Messung bricht bei einer Wellenlänge $\lambda > 0$ ab. So definiert man die Funktion $\varphi(\lambda)$. Die Ableitung dieser Funktion $\varphi_\lambda := \frac{d\varphi}{d\lambda}$ nach λ nennt man *spektralen Strahlungsfluss*, da diese Größe eine Aussage über die spektrale Verteilung der Energie erlaubt. Es gilt

$$\varphi = \int_0^\infty \varphi_\lambda d\lambda. \quad (2.130)$$

Man kann spektrale Strahlungsgrößen auch durch Ableitung nach der Frequenz definieren. Das Wort *spektral* wird manchmal unterschlagen werden.

Strahlungsgröße	SI-Einheit	Definition
Strahlungsenergie	J	die Energie, die an ein System in einem bestimmten Zeitintervall übertragen wird
spektrale Strahlungsenergie	J/m	Strahlungsenergie pro Wellenlänge
Strahlungsfluss	W	die zeitliche Rate, mit der durch Strahlung Energie übertragen wird
spektraler Strahlungsfluss	W/m	Strahlungsfluss pro Wellenlänge
Strahlungsflussdichte	W/m²	i. A. vektorielle Größe, Strahlungsenergie, die pro Zeit durch eine bestimmte Fläche tritt
spektrale Strahlungsflussdichte	W/m³	Strahlungsflussdichte pro Wellenlänge
Strahldichte	W/m²	Strahlungsflussdichte pro Raumwinkel
spektrale Strahldichte	W/m³	Strahldichte pro Wellenlänge
Energiedichte	J/m³	Energie, die pro Volumen in Form elektromagnetischer Wellen vorhanden ist
spektrale Energiedichte	J/m⁴	Energiedichte pro Wellenlänge

Table 2.1: Zusammenfassung der Definitionen der Strahlungsgrößen.

2.2.3 Spezielle Relativitätstheorie

Die MWGen ergeben für elektromagnetische Wellen im Vakuum in jedem IS die Phasengeschwindigkeit c . Dies ist ein Widerspruch zur Galileittransformation. Diese ist daher falsch und durch die *Lorentz-Transformation* zu ersetzen, welche für Geschwindigkeiten $v \ll c$ die Galileittransformation als Grenzfall enthalten muss. Dies ist die Aussage der *Speziellen Relativitätstheorie*.

Ein Element $(x^{(a)})$ der *Raumzeit* definiert man durch einen *4-Vektor*

$$(x^{(a)}) := \begin{pmatrix} ct \\ x \\ y \\ z \end{pmatrix}, \quad (2.131)$$

die Raumzeit ist die Menge aller 4-Vektoren. x, y, z sind kartesische Koordinaten in einem IS, t ist die durch einen willkürlichen Zeitnullpunkt t_0 festgelegte Zeitkoordinate. Griechische Indizes sollen immer von Null bis Drei laufen. Man definiert weiter ein *Ereignis* als einen messbaren physikalischen Vorgang ohne zeitliche und räumliche Ausdehnung. Seien zwei Ereignisse mit den Indizes 1 und 2 bezeichnet, dann kann man sie durch ihre entsprechenden Raumzeit-Koordinaten festlegen:

$$\begin{aligned} (x_1^{(a)}) &= \begin{pmatrix} ct_1 \\ x_1 \\ y_1 \\ z_1 \end{pmatrix}, \\ (x_2^{(a)}) &= \begin{pmatrix} ct_2 \\ x_2 \\ y_2 \\ z_2 \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (2.132)$$

Man definiert den *Abstand* $s_{1,2}^2$ der beiden Ereignisse in der Raumzeit durch

$$s_{1,2}^2 := c^2 (t_2 - t_1)^2 - (x_2 - x_1)^2 - (y_2 - y_1)^2 - (z_2 - z_1)^2. \quad (2.133)$$

Definiere nun ein IS', dessen Achsen parallel zu denen von IS sind und welches sich mit einer konstanten Geschwindigkeit $v = ve_x$ relativ zu IS bewegt. Zur Zeit $t = t' = 0$ seien die Ursprünge der beiden KS am selben Ort. Experimentell findet man

$$s_{1,2}^2 = s'_{1,2}^2. \quad (2.134)$$

Für ein Photon (oder eine elektromagnetische Wellenfront), welches sich in jedem IS mit c bewegt, gilt

$$s_{1,2}^2 = s'_{1,2}^2 = 0, \quad (2.135)$$

die Aussage ist also klar. Für ein geradlinig-gleichförmig bewegtes Teilchen ist

$$s_{1,2}^2 = (c^2 - v^2)(t_2 - t_1) = (c^2 - v'^2)(t'_2 - t'_1) = s'_{1,2}^2 \quad (2.136)$$

experimentell zu verifizieren. Nun definiert man weiter die Matrix $\overleftrightarrow{\eta}$ durch

$$\eta := \begin{pmatrix} \mathbf{I} & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & -\mathbf{I} & \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & -\mathbf{I} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} & -\mathbf{I} \end{pmatrix}. \quad (2.137)$$

Damit kann man den Abstand zweier Ereignisse ds linear entwickeln:

$$ds^2 = c^2 dt^2 - dx^2 - dy^2 - dz^2 = \sum_{a=0}^3 \sum_{\beta=0}^3 \eta_{a,\beta} dx^{(a)} dx^{(\beta)} =: \eta_{a,\beta} dx^{(a)} dx^{(\beta)} \quad (2.138)$$

Hierbei wurde die *Einstein'sche Summenkonvention* eingeführt: Über zwei gleiche Indizes, von denen der eine unten und der andere oben steht, wird summiert. Für die Lorentz-Transformation setzt man nun an

$$x'^{(a)} = \Lambda_{\beta}^{(a)} x^{(\beta)} + b^{(a)}. \quad (2.139)$$

Hieraus folgt

$$dx'^{(a)} = \Lambda_{\beta}^{(a)} dx^{(\beta)}. \quad (2.140)$$

Nun fordert man $ds^2 = ds'^2$ und erhält

$$\begin{aligned} ds'^2 &= \eta_{a,\beta} dx'^{(a)} dx'^{(\beta)} = \eta_{a,\beta} dx'^{(a)} \Lambda_{\delta}^{(\beta)} dx^{(\delta)} = \eta_{a,\beta} \Lambda_{\gamma}^{(a)} dx^{(\gamma)} \Lambda_{\delta}^{(\beta)} dx^{(\delta)} \\ &= \eta_{a,\beta} \Lambda_{\gamma}^{(a)} \Lambda_{\delta}^{(\beta)} dx^{(\gamma)} dx^{(\delta)} = \eta_{\gamma,\delta} dx^{(\gamma)} dx^{(\delta)} = ds^2. \end{aligned} \quad (2.141)$$

Da dies für alle dx und dx' gelten soll, gilt

$$\eta_{\gamma,\delta} = \eta_{a,\beta} \Lambda_{\gamma}^{(a)} \Lambda_{\delta}^{(\beta)}. \quad (2.142)$$

Dies bedeutet

$$\eta_{\gamma,\delta} = \sum_{a,\beta=0}^3 \eta_{a,\beta} \Lambda_{\gamma}^{(a)} \Lambda_{\delta}^{(\beta)} = \sum_{a=0}^3 \Lambda_{\gamma}^{(a)} \sum_{\beta=0}^3 \eta_{a,\beta} \Lambda_{\delta}^{(\beta)} = \sum_{a=0}^3 \left(\Lambda_a^{(\gamma)} \right)^T \sum_{\beta=0}^3 \eta_{a,\beta} \Lambda_{\delta}^{(\beta)} = (\Lambda^T \eta \Lambda)_{\gamma,\delta}, \quad (2.143)$$

also

$$\Lambda^T \eta \Lambda = \eta. \quad (2.144)$$

Für die oben beschriebene Anordnung zweier KS IS und IS' gilt $b = \mathbf{0}$. Weiterhin sind die Annahmen $y' = y$ und $z' = z$ sinnvoll. Die Transformation zwischen (x, t) und (x', t') kann nicht von den y- oder z-Koordinaten abhängen, da eine Rotation beider KS um die x-Achse zu keiner Änderung führen darf. Die Transformationsmatrix $\overleftrightarrow{\Lambda}$ hat also die Form

$$\overleftrightarrow{\Lambda} = \begin{pmatrix} \Lambda_{\mathbf{0}}^{(\mathbf{0})} & \Lambda_{\mathbf{1}}^{(\mathbf{0})} & \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ \Lambda_{\mathbf{0}}^{(\mathbf{1})} & \Lambda_{\mathbf{1}}^{(\mathbf{1})} & \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{I} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{I} \end{pmatrix}. \quad (2.145)$$

Weiterhin gilt für den Ursprung von IS'

$$x^{(\mathbf{0})} = ct \Leftrightarrow x'^{(\mathbf{0})} = ct', \quad (2.146)$$

$$x^{(\mathbf{1})} = vt \Leftrightarrow x'^{(\mathbf{1})} = \mathbf{0}, \quad (2.147)$$

$$x^{(\mathbf{2})} = \mathbf{0} \Leftrightarrow x'^{(\mathbf{2})} = \mathbf{0}, \quad (2.148)$$

$$x^{(\mathbf{3})} = \mathbf{0} \Leftrightarrow x'^{(\mathbf{3})} = \mathbf{0}. \quad (2.149)$$

Aus Glg. (2.144) folgt

$$\begin{aligned} \left(\begin{array}{cc} \Lambda_o^{(o)} & \Lambda_i^{(o)} \\ \Lambda_i^{(o)} & \Lambda_i^{(i)} \end{array} \right) \left(\begin{array}{cc} \mathbf{i} & \mathbf{o} \\ \mathbf{o} & -\mathbf{i} \end{array} \right) \left(\begin{array}{cc} \Lambda_o^{(o)} & \Lambda_i^{(o)} \\ \Lambda_o^{(i)} & \Lambda_i^{(i)} \end{array} \right) &= \left(\begin{array}{cc} \mathbf{i} & \mathbf{o} \\ \mathbf{o} & -\mathbf{i} \end{array} \right) \\ \Rightarrow \left(\begin{array}{cc} \Lambda_o^{(o)} & -\Lambda_o^{(i)} \\ \Lambda_i^{(o)} & -\Lambda_i^{(i)} \end{array} \right) \left(\begin{array}{cc} \Lambda_o^{(o)} & \Lambda_i^{(o)} \\ \Lambda_o^{(i)} & \Lambda_i^{(i)} \end{array} \right) &= \left(\begin{array}{cc} \mathbf{i} & \mathbf{o} \\ \mathbf{o} & -\mathbf{i} \end{array} \right) \\ \Rightarrow \left(\begin{array}{cc} (\Lambda_o^{(o)})^2 - (\Lambda_o^{(i)})^2 & \Lambda_o^{(o)} \Lambda_i^{(o)} - \Lambda_o^{(i)} \Lambda_i^{(i)} \\ \Lambda_o^{(o)} \Lambda_i^{(o)} - \Lambda_o^{(i)} \Lambda_i^{(i)} & (\Lambda_o^{(i)})^2 - (\Lambda_i^{(i)})^2 \end{array} \right) &= \left(\begin{array}{cc} \mathbf{i} & \mathbf{o} \\ \mathbf{o} & -\mathbf{i} \end{array} \right). \end{aligned} \quad (2.150)$$

Daraus folgen die drei Bedingungen

$$(\Lambda_o^{(o)})^2 - (\Lambda_o^{(i)})^2 = \mathbf{i}, \quad (2.151)$$

$$(\Lambda_o^{(i)})^2 - (\Lambda_i^{(i)})^2 = -\mathbf{i}, \quad (2.152)$$

$$\Lambda_o^{(o)} \Lambda_i^{(o)} - \Lambda_o^{(i)} \Lambda_i^{(i)} = \mathbf{o}. \quad (2.153)$$

Man kann für zwei reelle Zahlen ψ, φ ansetzen

$$\Lambda_o^{(i)} = -\sinh(\psi), \quad (2.154)$$

$$\Lambda_i^{(o)} = -\sinh(\varphi). \quad (2.155)$$

Es gelten also

$$\Lambda_o^{(o)} = \pm \cosh(\psi), \quad (2.156)$$

$$\Lambda_i^{(i)} = \pm \cosh(\varphi). \quad (2.157)$$

Für $\psi, \varphi \rightarrow o$ soll die identische Transformation herauskommen, also schließt man an dieser Stelle das Minuszeichen aus. Die dritte Bedingung lautet

$$\cosh(\psi) \sinh(\varphi) = \cosh(\varphi) \sinh(\psi), \quad (2.158)$$

hieraus folgt $\psi = \varphi$. Es gilt also

$$\left(\begin{array}{cc} \Lambda_o^{(o)} & \Lambda_i^{(o)} \\ \Lambda_o^{(i)} & \Lambda_i^{(i)} \end{array} \right) = \left(\begin{array}{cc} \cosh(\psi) & -\sinh(\psi) \\ -\sinh(\psi) & \cosh(\psi) \end{array} \right). \quad (2.159)$$

Somit gilt

$$x'^{(i)} = o = -\sinh(\psi) ct + \cosh(\psi) x^{(i)} = [-\sinh(\psi) c + \cosh(\psi) v] t. \quad (2.160)$$

Hieraus folgt

$$\tanh(\psi) = \frac{v}{c} \Rightarrow \psi = \operatorname{artanh}\left(\frac{v}{c}\right). \quad (2.161)$$

ψ nennt man *Rapidität*. Man definiert weiterhin

$$\gamma := \cosh(\psi) = \frac{\mathbf{i}}{\sqrt{\mathbf{i} - \tanh(\psi)^2}} = \frac{\mathbf{i}}{\sqrt{\mathbf{i} - v^2/c^2}}, \quad (2.162)$$

dann gilt

$$\sinh(\psi) = \gamma \frac{v}{c}. \quad (2.163)$$

Die Lorentz-Transformation ist in diesem Fall also durch

$$\begin{pmatrix} ct' \\ x' \\ y' \\ z' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\gamma & -\gamma \frac{v}{c} & 0 & 0 \\ -\gamma \frac{v}{c} & \gamma & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} ct \\ x \\ y \\ z \end{pmatrix} \quad (2.164)$$

festgelegt.

2.2.4 Relativistische Behandlung des elektromagnetischen Feldes

Die Gleichungen der Potentiale Glg.en (2.91) und (2.92) sowie die Lorenz-Eichung (2.90) werden hier noch einmal zusammengefasst:

$$\left(\Delta - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} \right) \varphi = -4\pi\rho, \quad (2.165)$$

$$\left(\Delta - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} \right) A = -4\pi j, \quad (2.166)$$

$$\frac{1}{c} \frac{\partial \varphi}{\partial t} + \nabla \cdot A = 0. \quad (2.167)$$

Nun wird der 4-Vektor

$$(A^{(a)}) := \begin{pmatrix} \varphi \\ A_x \\ A_y \\ A_z \end{pmatrix} \quad (2.168)$$

definiert. Definiere weiter

$$(j^{(a)}) := \begin{pmatrix} \varphi \\ j_x \\ j_y \\ j_z \end{pmatrix} \quad (2.169)$$

Man definiert als Kurzschreibweise für partielle Ableitungen

$$\partial_0 = \partial^{(0)} := \frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t}, \quad (2.170)$$

$$\partial^{(i)} := \frac{\partial}{\partial x_i} = -\frac{\partial}{\partial x^{(i)}} = -\partial_i \quad (2.171)$$

für $1 \leq i \leq 3$. Mit dem *d'Alembert-Operator*

$$\square := \partial_\beta \partial^{(\beta)} = \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} - \Delta \quad (2.172)$$

kann man dies als

$$\square A^{(a)} = \frac{4\pi}{c} j^{(a)} \quad (2.173)$$

notieren. Die Lorenz-Eichung schreibt sich damit als

$$\partial_a A^{(a)} = 0. \quad (2.174)$$

Man definiert den *Feldstärketensor* $F^{(a,\beta)}$ durch

$$F^{(a,\beta)} = \partial^{(a)} A^{(\beta)} - \partial^{(\beta)} A^{(a)}. \quad (2.175)$$

Diese Matrix ist antisymmetrisch:

$$\overleftrightarrow{F}^{(\beta,a)} = \partial^{(\beta)} A^{(a)} - \partial^{(a)} A^{(\beta)} = -(\partial^{(a)} A^{(\beta)} - \partial^{(\beta)} A^{(a)}) = -F^{(a,\beta)} \quad (2.176)$$

An dieser Stelle sei weiterhin an

$$\mathbf{E} = -\nabla \varphi - \frac{i}{c} \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t}, \quad (2.177)$$

$$\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A} \quad (2.178)$$

erinnert. Es gilt

$$\begin{aligned} F^{(\alpha, \beta)} &= \begin{pmatrix} \mathbf{0} & \frac{i}{c} \frac{\partial A_x}{\partial t} + \frac{\partial \varphi}{\partial x} & \frac{i}{c} \frac{\partial A_y}{\partial t} + \frac{\partial \varphi}{\partial y} & \frac{i}{c} \frac{\partial A_z}{\partial t} + \frac{\partial \varphi}{\partial z} \\ -\frac{\partial \varphi}{\partial x} - \frac{i}{c} \frac{\partial A_x}{\partial t} & \mathbf{0} & \frac{\partial}{\partial y} - \frac{\partial}{\partial x} & \frac{\partial}{\partial z} - \frac{\partial}{\partial x} \\ -\frac{\partial \varphi}{\partial y} - \frac{i}{c} \frac{\partial A_y}{\partial t} & \frac{\partial}{\partial x} - \frac{\partial}{\partial y} & \mathbf{0} & \frac{\partial}{\partial z} - \frac{\partial}{\partial y} \\ -\frac{\partial \varphi}{\partial z} - \frac{i}{c} \frac{\partial A_z}{\partial t} & \frac{\partial}{\partial x} - \frac{\partial}{\partial z} & \frac{\partial}{\partial y} - \frac{\partial}{\partial z} & \mathbf{0} \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} \mathbf{0} & -E_x & -E_y & -E_z \\ E_x & \mathbf{0} & -B_z & B_y \\ E_y & B_z & \mathbf{0} & -B_x \\ E_z & -B_y & B_x & \mathbf{0} \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (2.179)$$

Man betrachte wieder die beiden KS IS und IS', mit denen schon in Absch. 2.2.3 gearbeitet wurde. Die elektromagnetischen Felder in den Systemen seien mit (\mathbf{E}, \mathbf{B}) und $(\mathbf{E}', \mathbf{B}')$ bezeichnet. Die Feldstärketensoren transformieren sich mit Glg. (2.164) wie

$$\begin{aligned} F' &= \Lambda F \Lambda^T = \Lambda \begin{pmatrix} \mathbf{0} & -E_x & -E_y & -E_z \\ E_x & \mathbf{0} & -B_z & B_y \\ E_y & B_z & \mathbf{0} & -B_x \\ E_z & -B_y & B_x & \mathbf{0} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \gamma & -\gamma \frac{v}{c} & \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ -\gamma \frac{v}{c} & \gamma & \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{1} & \mathbf{1} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{1} & \mathbf{1} \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} \gamma & -\gamma \frac{v}{c} & \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ -\gamma \frac{v}{c} & \gamma & \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{1} & \mathbf{1} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{1} & \mathbf{1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \gamma E_x \frac{v}{c} & -\gamma E_x \frac{v}{c} & -E_y & -E_z \\ \gamma E_x & -\gamma E_x \frac{v}{c} & -B_z & B_y \\ \gamma E_x - \gamma B_z \frac{v}{c} & -\gamma E_y \frac{v}{c} + \gamma B_z & \mathbf{0} & -B_x \\ \gamma E_z + \gamma B_y \frac{v}{c} & -\gamma E_z \frac{v}{c} - \gamma B_y & B_x & \mathbf{0} \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} \mathbf{0} & -\gamma^2 E_x + \gamma^2 E_x \frac{v^2}{c^2} & -\gamma E_y + B_z \gamma \frac{v}{c} & -E_z \gamma - B_y \gamma \frac{v}{c} \\ -\gamma^2 E_x \frac{v^2}{c^2} + \gamma^2 E_x & \mathbf{0} & E_y \gamma \frac{v}{c} - B_z \gamma & E_z \gamma \frac{v}{c} + \gamma B_y \\ \gamma E_x - \gamma B_z \frac{v}{c} & -\gamma E_y \frac{v}{c} + \gamma B_z & \mathbf{0} & -B_x \\ \gamma E_z + \gamma B_y \frac{v}{c} & -\gamma E_z \frac{v}{c} - \gamma B_y & B_x & \mathbf{0} \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} \mathbf{0} & -E_x & -\gamma E_y + B_z \gamma \frac{v}{c} & -E_z \gamma - B_y \gamma \frac{v}{c} \\ E_x & \mathbf{0} & E_y \gamma \frac{v}{c} - B_z \gamma & E_z \gamma \frac{v}{c} + \gamma B_y \\ \gamma E_x - \gamma B_z \frac{v}{c} & -\gamma E_y \frac{v}{c} + \gamma B_z & \mathbf{0} & -B_x \\ \gamma E_z + \gamma B_y \frac{v}{c} & -\gamma E_z \frac{v}{c} - \gamma B_y & B_x & \mathbf{0} \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} \mathbf{0} & -E'_x & -E'_y & -E'_z \\ E'_x & \mathbf{0} & -B'_z & B'_y \\ E'_y & B'_z & \mathbf{0} & -B'_x \\ E'_z & -B'_y & B'_x & \mathbf{0} \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (2.180)$$

Hieraus folgen

$$E'_x = E_x, \quad (2.181)$$

$$E'_y = \gamma \left(E_y - B_z \frac{v}{c} \right), \quad (2.182)$$

$$E'_z = \gamma \left(E_z + B_y \frac{v}{c} \right), \quad (2.183)$$

$$B'_x = B_x, \quad (2.184)$$

$$B'_y = \gamma \left(B_y + E_z \frac{v}{c} \right), \quad (2.185)$$

$$B'_z = \gamma \left(B_z - E_y \frac{v}{c} \right). \quad (2.186)$$

Dies kann man vektoriell verallgemeinern zu

$$\mathbf{E}'_{\parallel} = \mathbf{E}_{\parallel}, \quad (2.187)$$

$$\mathbf{B}'_{\parallel} = \mathbf{B}_{\parallel}, \quad (2.188)$$

$$\mathbf{E}'_{\perp} = \gamma \left(\mathbf{E}_{\perp} + \frac{\mathbf{v}}{c} \times \mathbf{B} \right), \quad (2.189)$$

$$\mathbf{B}'_{\perp} = \gamma \left(\mathbf{B}_{\perp} - \frac{\mathbf{v}}{c} \times \mathbf{E} \right), \quad (2.190)$$

wobei jeweils zu \mathbf{v} parallele und senkrechte Komponenten gemeint sind. Die Rücktransformation erhält man mit $\mathbf{v} \rightarrow \mathbf{v}'$ zu

$$\mathbf{E}_{\parallel} = \mathbf{E}'_{\parallel}, \quad (2.191)$$

$$\mathbf{B}_{\parallel} = \mathbf{B}'_{\parallel}, \quad (2.192)$$

$$\mathbf{E}_{\perp} = \gamma \left(\mathbf{E}'_{\perp} - \frac{\mathbf{v}}{c} \times \mathbf{B}' \right), \quad (2.193)$$

$$\mathbf{B}_{\perp} = \gamma \left(\mathbf{B}'_{\perp} + \frac{\mathbf{v}}{c} \times \mathbf{E}' \right). \quad (2.194)$$

2.3 Quantenmechanik

Hier werden nur die Grundlagen der Quantenmechanik (QM) erklärt, für eine ausführlichere Darstellung s. [9]. In der QM wird die Bahnkurve $\mathbf{r}(t)$ durch die Wellenfunktion $\psi(\mathbf{r}, t)$ ersetzt, um den Zustand eines Teilchens ohne Spin festzulegen. ψ ist i. A. komplexwertig und $|\psi(\mathbf{r}, t)|^2$ ist die Wahrscheinlichkeitsdichte, das Teilchen zur Zeit t bei \mathbf{r} anzutreffen. Für Funktionen $f, g : \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{C}$ definiert man das unitäre Produkt $\langle \cdot | \cdot \rangle$ durch

$$\langle f | g \rangle := \int_{\mathbb{R}^3} f^* g d^3 r. \quad (2.195)$$

Da das Teilchen irgendwo ist, gilt

$$\langle \psi | \psi \rangle = 1. \quad (2.196)$$

Es gilt die *Schrödinger-Gleichung (SG)*

$$\hat{H}\psi(\mathbf{r}, t) = i\hbar \frac{\partial \psi(\mathbf{r}, t)}{\partial t} \quad (2.197)$$

mit dem *Hamilton-Operator*

$$\hat{H} := -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\mathbf{r}). \quad (2.198)$$

Dabei ist $\hbar := \frac{h}{2\pi}$ mit dem *Planck'schen Wirkungsquantum* h . Ein Operator macht aus einer Funktion eine neue Funktion und wird durch ein Dachsymbol gekennzeichnet. Zwei weitere axiomatische Annahmen der QM sind

$$\mathbf{p} = \hbar \mathbf{k} \quad (2.199)$$

für den Zusammenhang von Impuls \mathbf{p} und Kreiswellenzahl \mathbf{k} eines Teilchens sowie

$$E = \hbar \omega \quad (2.200)$$

für den Zusammenhang von Energie E und Kreisfrequenz ω . Eine ebene Welle kann somit durch

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \psi_0 \exp(i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t)) = \psi_0 \exp\left(\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p} \cdot \mathbf{r} - Et)\right) \quad (2.201)$$

notiert werden. Hierbei stellt man fest, dass

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\mathbf{r}, t) = E \psi(\mathbf{r}, t) \quad (2.202)$$

gilt, die rechte Seite der SG zieht also die Energie nach vorne. Analog folgt für die linke Seite

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi(\mathbf{r}, t) = \frac{p^2}{2m}\psi(\mathbf{r}, t) = E_{\text{kin}}\psi(\mathbf{r}, t) \quad (2.203)$$

mit der nichtrelativistischen Energie-Impuls-Beziehung $E_{\text{kin}} = \frac{p^2}{2m}$. Die SG ist also der Energieerhaltungssatz für eine ebene Wahrscheinlichkeitswelle. Wegen

$$-i\hbar\nabla\psi(\mathbf{r}, t) = \mathbf{p}\psi(\mathbf{r}, t) \quad (2.204)$$

definiert man

$$\hat{\mathbf{p}} := -i\hbar\nabla \quad (2.205)$$

als den *Impulsoperator*. Der Term der partiellen Zeitableitung $i\hbar\frac{\partial}{\partial t}$ wird bei Wellenfunktionen $\psi(\mathbf{r}, t)$, deren Zeitabhängigkeit trivial ist und von der Ortsabhängigkeit absepariert werden kann, also

$$\dot{\psi}(\mathbf{r}, t) = \psi(\mathbf{r}) \exp\left(-i\frac{E}{\hbar}t\right), \quad (2.206)$$

zu

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t} = E. \quad (2.207)$$

Die Schrödinger-Gleichung wird dann zur *stationären Schrödinger-Gleichung*

$$\hat{H}\psi(\mathbf{r}, t) = E\psi(\mathbf{r}, t). \quad (2.208)$$

Dies ist ein Eigenwertproblem, wobei E der Eigenwert ist und $\psi(\mathbf{r}, t)$ der Eigenvektor.

Es wird häufig gesagt, die Quantenmechanik sei nicht deterministisch. Dies ist falsch, die Schrödinger-Gleichung ist eine lineare Differenzialgleichung erster Ordnung in der Zeit. Ist der Zustand eines Systems zur Zeit t_0 bekannt, so liegt die Zustandstrajektorie mit der Schrödinger-Gleichung fest. Nicht deterministisch ist jedoch beispielsweise das Ergebnis einer Messung des Ortes eines Teilchens.

2.3.1 Freies Teilchen

Ein freies Teilchen der Masse m bewegt sich unter Abwesenheit eines Potentials $\hat{V} = 0$ entsprechend der Gleichung

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi = i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}. \quad (2.209)$$

Macht man für $\psi(\mathbf{r}, t)$ wieder den Ansatz einer ebenen Welle

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \psi_0 \exp(i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t)) = \psi_0 \exp\left(\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p} \cdot \mathbf{r} - Et)\right), \quad (2.210)$$

so folgt daraus die Dispersionsrelation

$$\frac{\hbar^2\mathbf{k}^2}{2m} = E = \hbar\omega \Leftrightarrow \omega(\mathbf{k}) = \frac{\hbar\mathbf{k}^2}{2m}. \quad (2.211)$$

Glg. (2.211) nennt man *Dispersionsrelation*. Die Phasengeschwindigkeit c_{ph} einer Materiewelle wird somit zu

$$c_{\text{ph}} = \frac{\omega}{k} = \frac{\hbar k}{2m}, \quad (2.212)$$

während für die Gruppengeschwindigkeit c_{gr} gilt

$$c_{\text{gr}} = \sum_{i=1}^3 \frac{\partial\omega}{\partial k_i} e_i = \frac{\hbar\mathbf{k}}{m}. \quad (2.213)$$

Materiewellen sind anders als elektromagnetische Wellen im Vakuum nicht dispersionsfrei. Die Gruppengeschwindigkeit ist dabei betragsmäßig doppelt so groß wie die Phasengeschwindigkeit.

2.3.2 Potentialtopf

Der *Potentialtopf* beschreibt ein Potential $V(x)$ der Form

$$V(x) := \begin{cases} 0, & 0 \leq x \leq L, \\ \infty, & \text{sonst} \end{cases} \quad (2.214)$$

mit $L > 0$. Der Hamilton-Operator \hat{H} eines Teilchens in diesem Potential lautet

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(x). \quad (2.215)$$

Die Randbedingungen ergeben sich aus der Tatsache

$$\psi(x) = 0 \text{ für } x \notin (0, L). \quad (2.216)$$

Man macht den Ansatz

$$\psi(x) = C_1 \exp(ik_1 x) + C_2 \exp(ik_2 x) \quad (2.217)$$

mit $k_1, k_2 > 0$. Aus der Randbedingung

$$\psi(0) = 0 \quad (2.218)$$

folgt

$$C_1 = -C_2, \quad (2.219)$$

definiere also $C := C_1$, dann gilt für den Ansatz

$$\psi(x) = C(\exp(ik_1 x) - \exp(ik_2 x)). \quad (2.220)$$

Aus der Randbedingung

$$\psi(L) = 0 \quad (2.221)$$

folgt

$$\exp(ik_1 L) = \exp(ik_2 L). \quad (2.222)$$

Im Allgemeinen dürfen die beiden Lösungskomponenten $\exp(ik_1 x)$ und $\exp(ik_2 x)$ linear unabhängig sein, daher gilt

$$k_1 L = k_2 L + 2n\pi \quad (2.223)$$

mit $n \in \mathbb{Z}$, also

$$k_1 - k_2 = \frac{2n\pi}{L}. \quad (2.224)$$

Setze also

$$k_1 = n_1 \frac{\pi}{L}, \quad (2.225)$$

$$k_2 = n_2 \frac{\pi}{L} \quad (2.226)$$

mit $n_1 - n_2 \in \mathbb{Z}$ gerade. Den Fall $k_1 = k_2$ muss man ausschließen, das sonst die Wellenfunktion verschwindet. Es gilt die Normierungsbedingung

$$\begin{aligned} \mathbf{1} &\stackrel{!}{=} \int_0^L |\psi(x)|^2 dx = |C|^2 \int_0^L 2 - \exp(i(k_1 - k_2)x) - \exp(i(k_2 - k_1)x) dx \\ &\Leftrightarrow |C|^2 \cdot 2L \Leftrightarrow |C| = \frac{\mathbf{1}}{\sqrt{2L}}. \end{aligned} \quad (2.227)$$

Die Gesamtlösung für die Wellenfunktion lautet also unter der Annahme $C > 0$ mit $n_1, n_2 \in \mathbb{Z}, n_1 \neq n_2$ und $n_1 - n_2$ gerade

$$\psi(x) = \frac{\mathbf{1}}{\sqrt{2L}} \left[\exp\left(in_1 \frac{\pi}{L} x\right) - \exp\left(in_2 \frac{\pi}{L} x\right) \right]. \quad (2.228)$$

Für die Energie-Eigenwerte E_{n_1, n_2} folgt

$$E_{n_1, n_2} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m L^2} (n_1^2 + n_2^2). \quad (2.229)$$

Die Energie $E = 0$ ist nicht möglich, da n_1 und n_2 nicht gleichzeitig Null sein dürfen. Dies ist in der klassischen Mechanik anders.

2.3.3 Potentialstufe

Gegeben sei das Potential

$$V(x) = \begin{cases} V_0, & 0 \leq x \leq L, \\ 0, & \text{sonst} \end{cases} \quad (2.230)$$

mit $V_0, L > 0$. Befindet sich ein klassisches Teilchen mit einer Energie $0 < E < V_0$ im Bereich $x < 0$, so kann es den Bereich $x > L$ niemals erreichen. In der Quantenmechanik ist dies anders, man bezeichnet dies als *Tunneleffekt*, weil das Teilchen anschaulich gesprochen einen Tunnel durch die Potentialbarriere gräbt.

Auch dies soll hier durchgesprochen werden, allerdings für den einfacheren Fall $L \rightarrow \infty$. Ein Index $\mathbf{1}$ stehe von nun an für den Bereich $x < 0$, während ein Index $\mathbf{2}$ von nun an für den Bereich $x \geq 0$ stehe. Das Potential $V(x)$ sei gegeben durch

$$V(x) = \begin{cases} 0, & x < 0 \\ V_0, & x \geq 0 \end{cases} \quad (2.231)$$

mit $V_0 > 0$. In den beiden Bereichen $\mathbf{1}$ und $\mathbf{2}$ gelten zwei unterschiedliche stationäre Schrödinger-Gleichungen

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi_1(x) = E \psi_1(x), \quad (2.232)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi_2(x) = (E - V_0) \psi_2(x) \quad (2.233)$$

für die zwei Wellenfunktionen $\psi_1(x), \psi_2(x), E < V_0$ sei die Energie des Teilchens. Für $\psi_1(x)$ macht man einen Ansatz

$$\psi_1(x) = C_1 \exp(ikx) + C_2 \exp(-ikx) \quad (2.234)$$

mit $k > 0$. Der erste Term entspricht dem nach rechts einlaufenden Teil der Welle, während der zweite Term der Reflexion entspricht. C_1, C_2 sind diesmal keine Normierungskonstanten, da man auf unbeschränkten Mengen nicht normieren kann. Für $\psi_2(x)$ macht man einen Ansatz

$$\psi_2(x) = C_3 \exp(-\lambda x) \quad (2.235)$$

mit $C_3, \lambda > 0$.

Für ψ gilt die stationäre Schrödinger-Gleichung, also hat die zweite Ableitung von ψ die gleichen Stetigkeits-eigenschaften wie das Potential V . In diesem Fall ist die zweite Ableitung unstetig, jedoch ist ψ immer noch

stetig-differenzierbar. Dadurch erhält man folgende zwei Anschlussbedingungen:

$$C_1 + C_2 = C_3, \quad (2.236)$$

$$ikC_1 - ikC_2 = -\lambda C_3 \quad (2.237)$$

Setzt man die erste Gleichung in die zweite ein, erhält man

$$\begin{aligned} ikC_1 - ikC_2 &= -\lambda C_1 - \lambda C_2 \Leftrightarrow C_2(\lambda - ik) = -C_1(\lambda + ik) \\ \Leftrightarrow C_2 &= -\frac{\lambda + ik}{\lambda - ik} = -\exp(2\varphi) \end{aligned} \quad (2.238)$$

mit

$$\varphi = \arctan\left(\frac{k}{\lambda}\right). \quad (2.239)$$

Damit folgt

$$C_3 = C_1 - \exp(2\varphi). \quad (2.240)$$

k erhält man aus der Schrödinger-Gleichung für Bereich 1:

$$\frac{\hbar^2 k^2}{2m} = E \Rightarrow k = \frac{i}{\hbar} \sqrt{2mE} \quad (2.241)$$

λ erhält man aus der Schrödinger-Gleichung für Bereich 2:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \lambda^2 = E - V_0 \Rightarrow \lambda = \frac{i}{\hbar} \sqrt{2m(V_0 - E)} \quad (2.242)$$

Die Lösungen werden noch einmal zusammengefasst:

$$\psi_1(x) = C_1 \exp\left(\frac{i}{\hbar} \sqrt{2mE}x\right) - \exp\left(2\varphi - \frac{i}{\hbar} \sqrt{2mEx}\right), \quad (2.243)$$

$$\psi_2(x) = (C_1 - \exp(2\varphi)) \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \sqrt{2m(V_0 - E)}x\right). \quad (2.244)$$

C_1 wird nicht durch die Schrödinger-Gleichung festgelegt, sondern durch eine hier nicht mögliche Normierung. Im Fall $L < \infty$ kann man Transmissions- und Reflexionskoeffizienten der Wahrscheinlichkeitsstromdichte an der Potentialschwelle berechnen.

Man kann als Resultat dieses Abschnitts sowie der Absch.e 2.3.1 und 2.3.2 festhalten:

- Im Fall $E > V_0 = \text{const.}$ existiert ein kontinuierliches Energiespektrum.
- Im Fall $E < V_0 = \text{const.}$ kann das Teilchen in Form eines exponentiellen Abfalls in diesen Bereich hinein-propagieren.
- Ist die Bewegung des Teilchens beschränkt, existiert ein diskretes Energiespektrum.

2.3.4 Produktwellenfunktionen

Sei ein eindimensionales Potential $V_x(x)$ gegeben mit zugehörigem Hamiltonian

$$\hat{H}_x = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V_x(x), \quad (2.245)$$

die Lösungen $(\psi_{n_x}(x), E_{n_x})$ des Eigenwertproblems

$$\hat{H}_x \psi_{n_x}(x) = E_{n_x} \psi_{n_x}(x) \quad (2.246)$$

seien bekannt. Nun erweiterte man das Problem auf drei Dimensionen, also

$$V(x, y, z) = V_x(x) + V_y(y) + V_z(z), \quad (2.247)$$

wobei analog zur x-Komponente auch die zu $V_y(y)$ und $V_z(z)$ gehörigen Lösungen der Schrödinger-Gleichung bekannt seien. Es muss jedoch nicht $V_x = V_y$ sein. Der Hamiltonian \hat{H} des dreidimensionalen Systems wird zu.

$$\hat{H} = \hat{H}_x + \hat{H}_y + \hat{H}_z \quad (2.248)$$

Nun mache für die Lösung $\psi(x, y, z)$ einen Produktansatz

$$\psi(x, y, z) = \psi_{n_x}(x) \psi_{n_y}(y) \psi_{n_z}(z), \quad (2.249)$$

dann gilt

$$\begin{aligned} \hat{H}\psi(x, y, z) &= (\hat{H}_x + \hat{H}_y + \hat{H}_z) \psi_{n_x}(x) \psi_{n_y}(y) \psi_{n_z}(z) \\ &= (E_{n_x} + E_{n_y} + E_{n_z}) \psi_{n_x}(x) \psi_{n_y}(y) \psi_{n_z}(z). \end{aligned} \quad (2.250)$$

Die so konstruierten Lösungen $\psi(x, y, z)$ bilden die komplette Lösungsmenge von

$$\hat{H}\psi(x, y, z) = E\psi(x, y, z). \quad (2.251)$$

Mit diesen Erkenntnissen kann man beispielsweise leicht die Schrödinger-Gleichung für ein Teilchen in einem dreidimensionalen harmonischen Oszillatoren oder in einem dreidimensionalen Potentialtopf lösen, wenn die eindimensionalen Lösungen bekannt sind.

2.3.5 Harmonischer Oszillator

Der Hamiltonian \hat{H} des harmonischen Oszillators lautet

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2, \quad (2.252)$$

also lautet die stationäre Schrödinger-Gleichung

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\psi'' + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2\psi = E\psi. \quad (2.253)$$

Dieses Eigenwertproblem ist zu lösen. Man kann dies schreiben als

$$\psi'' - \frac{x^2}{b^4}\psi = -\frac{2mE}{\hbar^2}\psi \quad (2.254)$$

mit $b := \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$. Definiere $u := \frac{x}{b}$, dann sind

$$\frac{d}{dx} = \frac{du}{dx} \frac{d}{du} = \frac{1}{b} \frac{d}{du}, \quad (2.255)$$

$$\frac{d^2}{dx^2} = \frac{1}{b^2} \frac{d^2}{du^2}. \quad (2.256)$$

Die stationäre SG wird mit der Ersetzung

$$\psi(x) \rightarrow \psi(u) \quad (2.257)$$

zu

$$\psi'' - u^2\psi = -\frac{2E}{\hbar\omega}\psi. \quad (2.258)$$

In der Unendlichkeit wird dies zu

$$\psi'' - u^2\psi \approx 0. \quad (2.259)$$

Hierfür wird der Ansatz

$$f(u) = \exp\left(-\frac{u^2}{2\sigma^2}\right) \quad (2.260)$$

gemacht mit $\sigma > 0$. Dies ergibt zweimal abgeleitet

$$\frac{d^2}{du^2} \exp\left(-\frac{u^2}{2\sigma^2}\right) = \frac{d}{du} \left(-\frac{u}{\sigma^2} \exp\left(-\frac{u^2}{2\sigma^2}\right) \right) \approx \frac{u^2}{\sigma^4} \exp\left(-\frac{u^2}{2\sigma^2}\right) \quad (2.261)$$

für große u . Setzt man dies ein, erhält man

$$\frac{u^2}{\sigma^4} - u^2 \stackrel{!}{=} 0 \Rightarrow \sigma = 1. \quad (2.262)$$

Man macht für ψ den Ansatz

$$\psi(u) = P(u) \exp\left(-\frac{u^2}{2}\right). \quad (2.263)$$

Die zweite Ableitung ergibt sich zu

$$\frac{d^2\psi}{du^2} = \frac{d}{du} \left[P' \exp\left(-\frac{u^2}{2}\right) - u P \exp\left(-\frac{u^2}{2}\right) \right] = \exp\left(-\frac{u^2}{2}\right) [P'' - 2uP' - P + u^2P]. \quad (2.264)$$

Glg. (2.258) wird mit $\tilde{E} = \frac{zE}{\hbar\omega}$ zu

$$P'' - 2uP' - P = -\tilde{E}P \Leftrightarrow P'' - 2uP' + P(\tilde{E} - 1) = 0. \quad (2.265)$$

Für $P(u)$ wird ein Potenzreihenansatz

$$P(u) = \sum_{i=0}^{\infty} a_i u^i \quad (2.266)$$

gemacht. Damit ergeben sich

$$P'(u) = \sum_{i=0}^{\infty} i a_i u^{i-1} \quad (2.267)$$

und

$$P''(u) = \sum_{i=0}^{\infty} (i-1) i a_i u^{i-2} = \sum_{i=0}^{\infty} (i+2)(i+1) a_{i+2} u^i. \quad (2.268)$$

Setzt man dies in Glg. (2.265) ein, erhält man

$$\sum_{i=0}^{\infty} (i+2)(i+1) a_{i+2} u^i - 2 \sum_{i=0}^{\infty} i a_i u^i + (\tilde{E} - 1) \sum_{i=0}^{\infty} a_i u^i = 0. \quad (2.269)$$

Damit dies für alle $y \in \mathbb{R}$ gilt, müssen die individuellen Koeffizienten verschwinden:

$$(i+2)(i+1) a_{i+2} - 2ia_i + (\tilde{E} - 1) a_i = 0, \quad (2.270)$$

also erhält man für die a_i die Rekursionsformel

$$a_{i+2} = a_i \frac{2i - \tilde{E} + 1}{(i+2)(i+1)}. \quad (2.271)$$

Da die geometrische Reihe $\sum_{n=1}^{\infty} n^{-1}$ divergiert, divergiert auch $\sum_{i=0}^{\infty} a_i u^i$. Daher muss es ein $n \in \mathbb{N}$ geben mit

$$2n - \tilde{E} + 1 = 0 \Leftrightarrow \frac{2E}{\hbar\omega} = 1 + 2n \Leftrightarrow E = E_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right). \quad (2.272)$$

Dies sind die Energie-Eigenwerte des Oszillators. n definiert einen Zustand. Die Zustände sind also quantisiert, ihre Energien sind äquidistant mit dem Abstand $\hbar\omega$ und die Grundzustandsenergie $E_0 > 0$ ist positiv.

Schreibt man die Rekursionsformel um, erhält man

$$a_i = a_{i+2} \frac{(i+2)(i+1)}{2(i-n)}, \quad (2.273)$$

durch a_n und $a_{n+1} = 0$ sind die Polynome $P_n(u)$ festgelegt, sie heißen *Hermite-Polynome* $H_n(u)$, s. Absch. A.14.2.

Es gilt die Normierungsbedingung

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(y)|^2 dy = \int_{-\infty}^{\infty} c_n^2 \exp\left(-\frac{y^2}{b^2}\right) H_n^2\left(\frac{y}{b}\right) dy = \int_{-\infty}^{\infty} c_n^2 b \exp(-u^2) H_n^2(u) du = 1, \quad (2.274)$$

also gilt mit Glg. (A.402)

$$c_n^2 b = \frac{1}{\sqrt{\pi} 2^n n!}. \quad (2.275)$$

Die Eigenzustände des harmonischen Oszillators sind also

$$\psi_n(u) = c_n H_n(u) \exp\left(-\frac{u^2}{2}\right) \quad (2.276)$$

mit

$$b = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}, \quad (2.277)$$

$$c_n = \frac{1}{\sqrt{b \sqrt{\pi} 2^n n!}}, \quad (2.278)$$

$$u = \frac{x}{b}. \quad (2.279)$$

Zum Schluss werden noch zwei Relationen festgehalten, die aus den Glg.en (A.401) und (A.400) folgen:

$$u\psi_n(u) = \sqrt{\frac{n}{2}}\psi_{n-1}(u) + \sqrt{\frac{n+1}{2}}\psi_{n+1}(u) \quad (2.280)$$

$$\frac{d\psi_n}{du}(u) = \sqrt{2n}\psi_{n-1}(u) - u\psi_n(u) = \sqrt{\frac{n}{2}}\psi_{n-1}(u) - \sqrt{\frac{n+1}{2}}\psi_{n+1}(u) \quad (2.281)$$

2.3.6 Hilbert-Raum und Operatoren

Ein Teilchen wird in der QM beschrieben durch seine im Allgemeinen zeitabhängige Wellenfunktion $\psi(t) : \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{C}$. Diese Wellenfunktion bezeichnet man auch als *Zustand* des Teilchens.

2.3.6.1 Hilbert-Raum

Die Menge aller stetig-differenzierbaren Funktionen $\mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{C}$ bezeichnet man in der QM als *Hilbert-Raum* H . Für zwei $f, g \in H$ definiert man das unitäre Produkt $\langle \cdot | \cdot \rangle$ durch

$$\langle f | g \rangle := \int_{\mathbb{R}^3} f^* g d^3 r. \quad (2.282)$$

Die Dimension von H ist unendlich. Man kann unendlich viele verschiedene Basen (f_1, f_2, \dots) mit $f_i \in H$ für alle $i \in \mathbb{N}$ mit $i \geq 1$ von H angeben. Üblicherweise wählt man Orthonormalbasen, also Basen mit

$$\langle f_i | f_j \rangle = \delta_{i,j} \quad (2.283)$$

für alle $i, j \in \mathbb{N}$ mit $i, j \geq 1$. Für einen Zustand $\psi(\mathbf{r}, t)$ kann man somit schreiben

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \sum_{i=1}^{\infty} a_i(t) f_i(\mathbf{r}). \quad (2.284)$$

Für die a_i gilt, sei $k \in \mathbb{N}$ mit $k \geq 1$,

$$\langle f_k | \psi \rangle = \int_{\mathbb{R}^3} f_k^*(\mathbf{r}) \left(\sum_{i=1}^{\infty} a_i f_i(\mathbf{r}) \right) d^3 r = \sum_{i=1}^{\infty} a_i \int_{\mathbb{R}^3} f_k^*(\mathbf{r}) f_i(\mathbf{r}) d^3 r = \sum_{i=1}^{\infty} a_i \delta_{ki} = a_k, \quad (2.285)$$

also

$$a_i = \langle f_i | \psi \rangle. \quad (2.286)$$

Bei zweckmäßiger Wahl der Reihenfolge der f_i gilt $\lim_{i \rightarrow \infty} a_i = 0$, also kann man die obige Summe in der Praxis je nach gewünschter Genauigkeit irgendwo abbrechen lassen. Der Vektor (a_i) legt also den Zustand $\psi(\mathbf{r})$ eines Teilchens fest. Man kann auf eine andere Basis (\tilde{f}_i) transformieren, die Transformation ergibt sich aus

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \sum_{i=1}^{\infty} a_i(t) f_i(\mathbf{r}) = \sum_{i=1}^{\infty} \tilde{a}_i(t) \tilde{f}_i(\mathbf{r}). \quad (2.287)$$

In diesem Fall wird der Zustand $\psi(\mathbf{r}, t)$ durch $(\tilde{a}_i(t))$ festgelegt. Ein Beispiel für eine solche Transformation ist die Fourier-Transformation.

Hat man die Schrödinger-Gleichung für ein System gelöst und eine Quantelung der Zustände gefunden, so kann man einen Zustand $\psi(\mathbf{r})$ durch $N \geq 1$ Quantenzahlen n_1, \dots, n_N festlegen, $\psi(\mathbf{r}, t) = \psi(n_1, \dots, n_N, \mathbf{r}, t)$. Es gibt also unendlich viele Möglichkeiten, einen Zustand eines Teilchens festzulegen. Will man sich nicht auf eine solche Möglichkeit festlegen, schreibt man einfach

$$|\psi\rangle. \quad (2.288)$$

Dies können zum Beispiel spektrale Koeffizienten a_i sein $|\psi\rangle = (a_i)$ oder eine Quantenzahl n wie beim eindimensionalen harmonischen Oszillatoren, $|\psi\rangle = |n\rangle$. Diese Notation bezeichnet man auch als *Dirac-Notation*. Benötigt man zwei Quantenzahlen n, m zur Festlegung eines Zustandes, so schreibt man $|\psi\rangle = |n, m\rangle$. Man definiert

$$\langle \psi | := |\psi\rangle^*. \quad (2.289)$$

Das bedeutet: Wenn für den Zustand $|\psi\rangle$ im Ortsraum gilt $|\psi\rangle = \psi(\mathbf{r}, t)$, dann gilt $\langle \psi | = \psi^*(\mathbf{r}, t)$. Vom englischen Wort *bracket* (Klammer) abgeleitet nennt man $|\psi\rangle$ auch einen *Ketzustand* oder einfach Ket, und $\langle \psi |$ einen *Brazustand* oder einfach Bra.

Ein Operator \hat{O} macht aus einem Zustand einen neuen Zustand (s. auch Absch. A.8), er ist also eine Abbildung im Hilbert-Raum. Man schreibt

$$|\chi\rangle = \hat{O}|\psi\rangle \quad (2.290)$$

für den Zustand $|\chi\rangle$, der entsteht, wenn der Operator \hat{O} auf den Zustand $|\psi\rangle$ wirkt. Ist \hat{O} linear (alle in der QM verwendeten Operatoren sind linear), so ist \hat{O} eine Matrix, wenn man die Zustände bezüglich irgendeiner Orthonormalbasis von H entwickelt. Diese Matrix besitzt unendlich viele Zeilen und Spalten, außer man verwendet approximativ nur endlich viele Basiselemente. Man bezeichnet den zu \hat{O} adjungierten Operator als \hat{O}^+ und definiert diesen durch die Relation

$$\langle \psi | \hat{O} \chi \rangle = \langle \hat{O}^+ \psi | \chi \rangle, \quad (2.291)$$

die für alle $\psi, \chi \in H$ gelten soll. Dadurch ist \hat{O}^+ festgelegt. In der linearen Algebra bezeichnet man eine Matrix

\overleftrightarrow{A} über \mathbb{C} als *unitär*, wenn

$$\overleftrightarrow{A}^+ = \overleftrightarrow{A}^{-1} \quad (2.292)$$

gilt. Dabei ist $\overleftrightarrow{A}^{-1}$ die zu A *inverse Matrix*, also

$$\overleftrightarrow{A}^{-1} \overleftrightarrow{A} = \mathbf{1} \quad (2.293)$$

und \overleftrightarrow{A}^+ ist die *adjungierte Matrix*

$$A^+ = (A^*)^T. \quad (2.294)$$

Schreibt man für einen Zustand

$$|\psi\rangle = \sum_{i=1}^{\infty} a_i |\psi_i\rangle, \quad (2.295)$$

so gilt

$$\begin{aligned} \mathbf{1} &= \langle \psi | \psi \rangle = \left\langle \sum_{i=1}^{\infty} a_i^* f_i^*(\mathbf{r}) \middle| \sum_{j=1}^{\infty} a_j f_j(\mathbf{r}) \right\rangle \\ &= \int_{\mathbb{R}^3} \left(\sum_{i=1}^{\infty} a_i^* f_i^*(\mathbf{r}) \right) \left(\sum_{j=1}^{\infty} a_j f_j(\mathbf{r}) \right) d^3 r = \sum_{i,j=1}^{\infty} \int_{\mathbb{R}^3} a_i^* f_i^*(\mathbf{r}) a_j f_j(\mathbf{r}) d^3 r \\ &= \sum_{i,j=1}^{\infty} a_i^* a_j \delta_{i,j} = \sum_{i=1}^{\infty} |a_i|^2. \end{aligned} \quad (2.296)$$

Die Wahrscheinlichkeitsdichte im Ortsraum ist gegeben durch $\rho = \psi \psi^* = \sum_{i,j=1}^{\infty} a_i^* a_j f_i^*(\mathbf{r}) f_j(\mathbf{r})$. Die Wahrscheinlichkeit P_i , das Teilchen in einem Zustand f_i anzutreffen, ist gegeben durch

$$P_i = |\langle f_i | \psi \rangle|^2 = |a_i|^2. \quad (2.297)$$

Geht jeder Zustand i mit einer Energie E_i einher, so ist der Erwartungswert der Energie $\langle E \rangle$ gegeben durch

$$\langle E \rangle = \sum_{i=1}^{\infty} P_i E_i = \sum_{i=1}^{\infty} |\langle f_i | \psi \rangle|^2 E_i. \quad (2.298)$$

Gilt für einen Operator \hat{O} die Gleichung $\hat{O}|f_i\rangle = o_i|f_i\rangle$, so ist der Erwartungswert $\langle o \rangle$ der Größe o gegeben durch

$$\begin{aligned} \langle o \rangle &= \sum_{i=1}^{\infty} P_i o_i = \sum_{i=1}^{\infty} |\langle f_i | \psi \rangle|^2 o_i = \sum_{i=1}^{\infty} \langle \psi | f_i \rangle o_i \langle f_i | \psi \rangle = \sum_{i=1}^{\infty} \langle \psi | o_i f_i \rangle a_i \\ &= \sum_{i=1}^{\infty} \int_{\mathbb{R}^3} \psi^* o_i a_i f_i d^3 r = \int_{\mathbb{R}^3} \psi^* \sum_{i=1}^{\infty} o_i a_i f_i d^3 r = \int_{\mathbb{R}^3} \psi^* \sum_{i=1}^{\infty} \hat{O} a_i f_i d^3 r \\ &= \int_{\mathbb{R}^3} \psi^* \hat{O} \sum_{i=1}^{\infty} a_i f_i d^3 r = \int_{\mathbb{R}^3} \psi^* \hat{O} \psi d^3 r. \end{aligned} \quad (2.299)$$

Allgemein ist der Erwartungswert $\langle \hat{O} \rangle$ des Operators \hat{O} im Zustand $|\psi\rangle$ gegeben durch

$$\langle \hat{O} \rangle = \int_{\mathbb{R}^3} \psi^* \hat{O} \psi d^3 r = \langle \psi | \hat{O} | \psi \rangle. \quad (2.300)$$

Man entwickle nun \hat{O} als Matrix bezüglich der Basis (f_i) und schreibe $O_{i,j}$ für den Eintrag in der j -ten Spalte der i -ten Zeile. Als Anfangszustand wähle man $|\psi\rangle = f_j$, also befindet sich das System mit Sicherheit im j -ten

Zustand. Man schreibe

$$|\chi\rangle := \hat{O}|\psi\rangle = \sum_{i=1}^{\infty} b_i f_i(\mathbf{r}) \quad (2.301)$$

für den Zustand $|\chi\rangle$ des Systems unter Wirkung des Operators \hat{O} . Sei $k \in \mathbb{N}$ mit $k \geq 1$, dann ist

$$b_k = \sum_{l=1}^{\infty} O_{k,l} \langle f_l | \psi \rangle = \sum_{l=1}^{\infty} O_{k,l} \delta_{l,j} = O_{k,j}. \quad (2.302)$$

$|b_k|^2$ ist die Wahrscheinlichkeit, das System nach Wirken des Operators im Zustand f_k anzutreffen, $|O_{k,j}|^2$ ist also die Wahrscheinlichkeit, dass das System vom Zustand j unter Wirkung des Operators \hat{O} in den Zustand k übergeht. Ist $O_{k,j} = 0$, so kann das System unter Wirkung des Operators \hat{O} nicht vom Zustand j in den Zustand k übergehen, man erhält einen *verbotenen Übergang*. Man kann also schreiben

$$O_{i,j} = \langle f_i | \hat{O} | f_j \rangle. \quad (2.303)$$

Dies ist eine rechnerisch auswertbare Formel, um die Matrixelemente $O_{i,j}$ des Operators \hat{O} bezüglich der Basis (f_k) zu ermitteln.

Nun wird gezeigt, dass jeder lineare Operator \hat{O} mindestens einen Eigenwert $\lambda \in \mathbb{C}$ hat. Mit $x \in \mathbb{C}$ und $|\psi\rangle \in H$ lautet das Eigenwertproblem

$$\hat{O}|\psi\rangle = x|\psi\rangle. \quad (2.304)$$

Wähle nun eine Orthonormalbasis $(|\psi_i\rangle, \dots)$ von H und entwickle \hat{O} und $|\psi\rangle$ bezüglich dieser Basis, dann wird das Problem zu

$$O\mathbf{a} = x\mathbf{a} \quad (2.305)$$

mit $\mathbf{a} = (a_1, \dots)^T$ und $|\psi\rangle = \sum_{i=1}^{\infty} a_i |\psi_i\rangle$. Die Existenz eines Eigenwertes $\lambda \in \mathbb{C}$ ist äquivalent dazu, dass das charakteristische Polynom

$$p(x) := \det(O - x) \quad (2.306)$$

mindestens eine komplexe Nullstelle besitzt. Da $p(x)$ nach dem Hauptsatz der Algebra über \mathbb{C} in Linearfaktoren zerfällt, ist dies der Fall.

2.3.6.2 Hermite'sche Operatoren

Man bezeichnet einen Operator \hat{O} als *hermitesch*, wenn gilt

$$\langle \hat{O}f | g \rangle = \langle f | \hat{O}g \rangle, \quad (2.307)$$

also ausgeschrieben

$$\int_{\mathbb{R}^3} (\hat{O}f)^* g d^3 r = \int_{\mathbb{R}^3} f^* (\hat{O}g) d^3 r. \quad (2.308)$$

Hermite'sche Operatoren sind also selbstadjungiert,

$$\hat{O}^+ = \hat{O}. \quad (2.309)$$

Nun wird gezeigt, dass die Eigenwerte hermitesch Operatoren reell sind. Seien also ein Hermite'scher Operator \hat{O} gegeben und $|\psi\rangle \in H, a \in \mathbb{C}$ mit $\hat{O}|\psi\rangle = a|\psi\rangle$. Dann gilt

$$a^* \langle \psi | \psi \rangle = \langle \hat{O}\psi | \psi \rangle = \langle \psi | \hat{O}\psi \rangle = a \langle \psi | \psi \rangle, \quad (2.310)$$

also ist $a^* = a$ und somit $a \in \mathbb{R}$. Weiterhin sind auch die Erwartungswerte Hermite'scher Operatoren reell:

$$\begin{aligned}\langle \psi | \hat{O} | \psi \rangle^* &= \left(\int_{\mathbb{R}^3} \psi^* \hat{O} \psi d^3 r \right)^* = \int_{\mathbb{R}^3} \psi \left(\hat{O} \psi \right)^* d^3 r \\ &= \int_{\mathbb{R}^3} \left(\hat{O} \psi \right)^* \psi d^3 r = \langle \hat{O} \psi | \psi \rangle = \langle \psi | \hat{O} | \psi \rangle\end{aligned}\quad (2.311)$$

Messgrößen sind immer reell. Hermite'sche Operatoren sind daher geeignet, um Messgrößen festzulegen.

Nun wird gezeigt, dass die Eigenvektoren Hermite'scher Operatoren zu unterschiedlichen Eigenwerten orthogonal sind. Seien also ein Hermite'scher Operator \hat{O} gegeben und $|\psi\rangle, |\chi\rangle \in H, a, \beta \in \mathbb{R}$ mit $a \neq \beta$ und

$$\hat{O}|\psi\rangle = a|\psi\rangle, \quad (2.312)$$

$$\hat{O}|\chi\rangle = \beta|\chi\rangle. \quad (2.313)$$

Dann gilt

$$\beta\langle\psi|\chi\rangle = \langle\psi|\hat{O}\chi\rangle = \langle\hat{O}\psi|\chi\rangle = a\langle\psi|\chi\rangle, \quad (2.314)$$

also ist

$$\langle\psi|\chi\rangle = 0. \quad (2.315)$$

Eigenvektoren zu entarteten Eigenwerten müssen natürlich nicht per se orthonormal sein. Jedoch kann man auf sie das Gram-Schmidt'sche Orthonormalisierungsverfahren anwenden.

Nun sollen noch einige Operatoren auf Hermitezität untersucht werden. Es gilt

$$\int \left(-\frac{d}{dx} \varphi \right)^* \psi dx = \int -\frac{d}{dx} \varphi^* \psi dx = \int \varphi^* \frac{d}{dx} \psi dx, \quad (2.316)$$

also ist

$$\left(\frac{d}{dx} \right)^+ = -\frac{d}{dx}. \quad (2.317)$$

Partielle Ableitungen sind also nicht hermitesch. Die x-Komponente des Impulsoperators $\hat{p}_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$ ist jedoch hermitesch und die anderen Komponenten somit auch. Es gilt

$$\int \left((-i)^n \frac{d^n}{dx^n} \varphi \right)^* \psi dx = (-i)^n \int \frac{d^n}{dx^n} \varphi^* \psi dx = (-i)^n (-i)^n \int \varphi^* \frac{d^n \psi}{dx^n} dx, \quad (2.318)$$

also ist

$$\left(\frac{d^n}{dx^n} \right)^+ = (-i)^n \frac{d^n}{dx^n}. \quad (2.319)$$

Wegen

$$\begin{aligned}\int (\Delta \varphi)^* \psi d^3 r &= \int \left(\sum_{i=1}^3 \frac{d^2}{dx_i^2} \varphi^* \right) \psi d^3 r = \sum_{i=1}^3 \int \left(\frac{d^2 \varphi^*}{dx_i^2} \right) \psi d^3 r \\ &= \sum_{i=1}^3 \int \varphi^* \left(\frac{d^2 \psi}{dx_i^2} \right) d^3 r = \int \varphi^* \Delta \psi d^3 r\end{aligned}\quad (2.320)$$

ist $\Delta^+ = \Delta$. Der Laplace-Operator ist also hermitesch. Wegen

$$\begin{aligned}\int \left(\left(-i - x \frac{d}{dx} \right) \varphi \right)^* \psi dx &= - \int \varphi^* \psi dx - \int \left(x \frac{d}{dx} \varphi^* \right) \psi dx \\ &= - \int \varphi^* \psi dx + \int \varphi^* \left(\psi + x \frac{d}{dx} \psi \right) dx = \int \varphi^* x \frac{d}{dx} \psi dx\end{aligned}\quad (2.321)$$

ist

$$\left(x \frac{d}{dx} \right)^+ = -\mathbf{i} - x \frac{d}{dx}. \quad (2.322)$$

Der *Vernichtungsoperator* \hat{a} ist definiert durch

$$\hat{a} := \frac{\mathbf{i}}{\sqrt{2}} \left(x + \frac{\partial}{\partial x} \right). \quad (2.323)$$

Es gilt

$$\int \left(\frac{\mathbf{i}}{\sqrt{2}} \left(x - \frac{\partial}{\partial x} \right) \varphi \right)^* \psi dx = \int \frac{\mathbf{i}}{\sqrt{2}} \varphi^* x \psi + \frac{\mathbf{i}}{\sqrt{2}} \varphi^* \frac{\partial \psi}{\partial x} dx = \int \varphi^* \frac{\mathbf{i}}{\sqrt{2}} \left(x + \frac{\partial}{\partial x} \right) \psi dx, \quad (2.324)$$

das heißt

$$\hat{a}^+ = \frac{\mathbf{i}}{\sqrt{2}} \left(x - \frac{\partial}{\partial x} \right), \quad (2.325)$$

dies nennt man den *Erzeugungsoperator*. Für den *Teilchenzahloperator* \hat{N} gilt

$$\hat{N} := \frac{\mathbf{i}}{2} \left(x^2 - \frac{\partial^2}{\partial x^2} \right). \quad (2.326)$$

Damit gilt

$$\begin{aligned} & \int \left(\frac{\mathbf{i}}{2} \left(x^2 - \frac{\partial^2}{\partial x^2} \right) \varphi \right)^* \psi dx = \int \frac{\mathbf{i}}{2} x^2 \varphi^* \psi - \frac{\mathbf{i}}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \varphi^* \psi dx \\ &= \int \varphi^* \frac{\mathbf{i}}{2} \left(x^2 - \frac{\partial^2}{\partial x^2} \right) \psi dx = \int \varphi^* \hat{N} \psi dx, \end{aligned} \quad (2.327)$$

also ist

$$\hat{N}^+ = \hat{N}. \quad (2.328)$$

Der Teilchenzahloperator ist also hermitesch.

An dieser Stelle werden noch einige allgemeine Aussagen über Hermite'sche Operatoren festgehalten. Seien \hat{A} , \hat{B} zwei lineare, Hermite'sche Operatoren. Dann ist auch $a\hat{A} + \beta\hat{B}$ mit $a, \beta \in \mathbb{R}$ hermitesch. Seien nämlich $f, g \in H$. Dann gilt

$$\langle f | (a\hat{A} + \beta\hat{B}) g \rangle = \langle f | a\hat{A}g \rangle + \langle f | \beta\hat{B}g \rangle = \langle a\hat{A}f | g \rangle + \langle \beta\hat{B}f | g \rangle = \langle (a\hat{A} + \beta\hat{B})f | g \rangle. \quad (2.329)$$

Weiterhin gilt in diesem Fall

$$\langle f | \hat{A}\hat{B}g \rangle = \langle \hat{A}f | \hat{B}g \rangle = \langle \hat{B}\hat{A}f | g \rangle, \quad (2.330)$$

also

$$(\hat{A}\hat{B})^+ = \hat{B}\hat{A}. \quad (2.331)$$

Kommutieren \hat{A} und \hat{B} , so ist die Hintereinanderausführung $\hat{A}\hat{B}$ also ebenfalls hermitesch. Weiterhin gilt mit $n \in \mathbb{N}$

$$(\hat{A}^n)^+ = \hat{A}^n. \quad (2.332)$$

Somit ist der Impulsoperator $\hat{\mathbf{p}} = \sum_{j=1}^3 \hat{p}_j e_j$ als Linearkombination Hermite'scher Operatoren hermitesch. Weiterhin sind alle Potentiale \hat{V} hermitesch, da sie reell sind und keine Differenzialoperatoren enthalten. Weiterhin ist

der Hamilton-Operator

$$\hat{H} = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} + \hat{V} \quad (2.333)$$

hermitesch.

2.3.6.3 Kommutierende Operatoren

Der *Kommutator* $[\hat{A}, \hat{B}]$ zweier Operatoren \hat{A}, \hat{B} ist definiert durch

$$[\hat{A}, \hat{B}] := \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}. \quad (2.334)$$

Sei $|\psi\rangle$ ein Zustand. Verschwindet der Kommutator eines konstanten Operators \hat{A} mit dem Hamilton-Operator \hat{H}

$$[\hat{H}, \hat{A}] = 0, \quad (2.335)$$

so ist $\langle \hat{A} \rangle = \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle$ eine Erhaltungsgröße:

$$\frac{\partial}{\partial t} \langle \hat{A} \rangle = \frac{\partial}{\partial t} \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle = \left\langle \psi \left| \frac{\partial}{\partial t} \hat{A} \right| \psi \right\rangle + \left\langle \psi \left| \hat{A} \right| \frac{\partial}{\partial t} \psi \right\rangle \quad (2.336)$$

Da \hat{A} als konstant angenommen wird, folgt mit der SG

$$\frac{\partial}{\partial t} \langle \hat{A} \rangle = -\frac{i}{\hbar} \langle \hat{H}\psi | \hat{A} | \psi \rangle + \frac{i}{\hbar} \langle \psi | \hat{A} | \hat{H}\psi \rangle = -\frac{i}{\hbar} \langle \hat{H}\psi | \hat{A} | \psi \rangle + \frac{i}{\hbar} \langle \psi | \hat{H}\hat{A}\psi \rangle = 0, \quad (2.337)$$

da \hat{H} hermitesch ist. Gilt $[\hat{A}, \hat{B}] = 0$ für Hermite'sche Operatoren \hat{A}, \hat{B} , so lassen sich simultane Eigenfunktionen der beiden Operatoren finden. Dies kann man sich folgendermaßen klarmachen: Zunächst gilt

$$\hat{B}\hat{A}|\psi\rangle = \hat{B}a|\psi\rangle \Leftrightarrow \hat{A}(\hat{B}|\psi\rangle) = a(\hat{B}|\psi\rangle), \quad (2.338)$$

also ist $\hat{B}|\psi\rangle$ ein Eigenvektor von \hat{A} zum Eigenwert a . Ist a nicht entartet, so ist der zugehörige Eigenraum eindimensional und somit existiert ein $b \in \mathbb{C}$ mit $\hat{B}|\psi\rangle = b|\psi\rangle$.

Ist a als Eigenwert von \hat{A} allerdings n -fach entartet, mit $n \in \mathbb{N}$, $n \geq 2$, so bedeutet dies, dass der zugehörige Eigenraum durch n Basisvektoren $|\psi_1\rangle, \dots, |\psi_n\rangle$ aufgespannt wird, die man als orthonormal annehmen kann, also

$$\langle \psi_i | \psi_j \rangle = \delta_{i,j}. \quad (2.339)$$

Wegen Glg. (2.338) existieren $k_i \in \mathbb{C}$ für $1 \leq i \leq n$ mit

$$\hat{B}|\psi\rangle = \sum_{i=1}^n k_i |\psi_i\rangle. \quad (2.340)$$

Da \hat{B} hermitesch ist, kann man die Matrix $(B_{i,j}) := \langle \psi_i | \hat{B} | \psi_j \rangle$ durch eine unitäre Transformation U in Diagonalförm

$$B' = U^T B U = \begin{pmatrix} \lambda_1 & & & \\ & \lambda_2 & & \\ & & \ddots & \\ & & & \lambda_n \end{pmatrix} \quad (2.341)$$

mit nicht notwendigerweise verschiedenen Eigenwerten $\lambda_1, \dots, \lambda_n \in \mathbb{C}$ bringen. Die transformierten Basiselemente $|\psi'_i\rangle := U|e_i\rangle$ sind als Überlagerungen der $|\psi_i\rangle$ ebenfalls Eigenfunktionen von \hat{A} . Somit hat man n simultane Eigenfunktionen der beiden Operatoren \hat{A}, \hat{B} gefunden.

2.3.6.4 Leiteroperatoren

Die *Leiteroperatoren* (auch: Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren) \hat{a}^+ und \hat{a} sind definiert durch

$$\hat{a}^+ := \frac{\mathbf{i}}{\sqrt{2}} \left(u - \frac{\partial}{\partial u} \right). \quad (2.342)$$

und

$$\hat{a} := \frac{\mathbf{i}}{\sqrt{2}} \left(u + \frac{\partial}{\partial u} \right) \quad (2.343)$$

Für die Zustände $\psi_n(u)$ des harmonischen Oszillators gelten mit den Glg.en (2.280) und (2.281)

$$\hat{a}\psi_n(u) = \sqrt{n}\psi_{n-1}(u) \quad (2.344)$$

und

$$\hat{a}^+\psi_n(u) = \sqrt{n+1}\psi_{n+1}(u). \quad (2.345)$$

Daher haben die Leiteroperatoren ihren Namen. Man kann weiterhin jeden Zustand $\psi_n(u)$ aus dem Grundzustand $\psi_0(u)$ erzeugen:

$$(\hat{a}^+)^n \psi_0(u) = \sqrt{n!}\psi_n(u) \Leftrightarrow \psi_n(u) = \frac{\mathbf{i}}{\sqrt{n!}} (\hat{a}^+)^n \psi_0(u) \quad (2.346)$$

Es sollte gelten

$$\hat{a}\psi_0(u) \stackrel{!}{=} 0. \quad (2.347)$$

Dies bedeutet

$$\left(u + \frac{\partial}{\partial u} \right) \psi_0(u) \propto \left(u + \frac{\partial}{\partial u} \right) \exp\left(-\frac{u^2}{2}\right) = (u - u) \exp\left(-\frac{u^2}{2}\right) = 0, \quad (2.348)$$

die geforderte Aussage stimmt also. Es gilt für $f, g : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ stetig-differenzierbar

$$\begin{aligned} \langle f|\hat{a}g \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} f^* \hat{a} g du = \int_{-\infty}^{\infty} f^* \frac{\mathbf{i}}{\sqrt{2}} \left(u + \frac{\partial}{\partial u} \right) g du \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} g \frac{\mathbf{i}}{\sqrt{2}} \left(u - \frac{\partial}{\partial u} \right) f^* du = \langle \hat{a}^+ f | g \rangle \end{aligned} \quad (2.349)$$

Die Leiteroperatoren sind also paarweise adjungiert, wie auch schon in der Notation \hat{a}, \hat{a}^+ berücksichtigt wurde. Für den Operator

$$\hat{N} := \hat{a}^+ \hat{a} \quad (2.350)$$

gilt

$$\hat{N}\psi_n(u) = \hat{a}^+ \sqrt{n}\psi_{n-1}(u) = n\psi_n(u). \quad (2.351)$$

\hat{N} nennt man den *Teilchenzahloperator*. Für den Kommutator $[\hat{a}, \hat{a}^+]$ der beiden Operatoren gilt

$$\begin{aligned} [\hat{a}, \hat{a}^+] \psi_n(u) &= (\hat{a}\hat{a}^+ - \hat{a}^+\hat{a}) \psi_n(u) = \hat{a}\sqrt{n+1}\psi_{n+1}(u) - \hat{a}^+\sqrt{n}\psi_{n-1}(u) \\ &= (n+1)\psi_n(u) - n\psi_n(u) = \psi_n(u). \end{aligned} \quad (2.352)$$

Es ist also allgemein

$$[\hat{a}, \hat{a}^+] = \hat{1}. \quad (2.353)$$

Für die x-Komponente \hat{x} des Ortsoperators $\hat{\mathbf{r}}$ gilt

$$\hat{a} + \hat{a}^+ = \sqrt{2}u = \frac{\sqrt{2}x}{b} \Leftrightarrow \hat{x} = \frac{b}{\sqrt{2}}(\hat{a} + \hat{a}^+). \quad (2.354)$$

Für die x-Komponente $\hat{p}_x = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}$ des Impulsoperators $\hat{\mathbf{p}}$ gilt

$$\hat{a} - \hat{a}^+ = \sqrt{2}\frac{\partial}{\partial u} = \sqrt{2}b\frac{\partial}{\partial x} = ib\frac{\sqrt{2}}{\hbar}\hat{p}_x \Leftrightarrow \hat{p}_x = -i\frac{\hbar}{b\sqrt{2}}(\hat{a} - \hat{a}^+). \quad (2.355)$$

Für den Hamilton-Operator \hat{H} des harmonischen Oszillators gilt

$$\begin{aligned} \hat{H} &= \frac{\hat{p}_x^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2x^2 = -\frac{1}{2m}\frac{\hbar^2}{2b^2}(\hat{a}^2 + (\hat{a}^+)^2 - \hat{a}\hat{a}^+ - \hat{a}^+\hat{a}) + \frac{1}{4}m\omega^2b^2(\hat{a}^2 + (\hat{a}^+)^2 + \hat{a}\hat{a}^+ + \hat{a}^+\hat{a}) \\ &= \frac{\hbar\omega}{4}(2\hat{a}\hat{a}^+ + 2\hat{a}^+\hat{a}) = \frac{\hbar\omega}{2}(2\hat{N} + 1). \end{aligned} \quad (2.356)$$

2.3.7 Unschärferelation

Seien \hat{A}, \hat{B} zwei Operatoren und sei ein Teilchen im Zustand $|\psi\rangle$. Definiere die Varianzen $\langle(\Delta\hat{A})^2\rangle, \langle(\Delta\hat{B})^2\rangle$ der Operatoren \hat{A}, \hat{B} im Zustand $|\psi\rangle$ durch

$$\langle(\Delta\hat{A})^2\rangle := \langle(\hat{A} - \langle\hat{A}\rangle)^2\rangle \quad (2.357)$$

und analog für $\langle(\Delta\hat{B})^2\rangle$. Es gilt weiterhin

$$\begin{aligned} \langle(\Delta\hat{A})^2\rangle &= \langle(\hat{A} - \langle\hat{A}\rangle)^2\rangle = \langle\hat{A}^2 + \langle\hat{A}\rangle^2 - 2\hat{A}\langle\hat{A}\rangle\rangle \\ &= \langle\hat{A}^2\rangle - \langle\hat{A}\rangle^2. \end{aligned} \quad (2.358)$$

Nun nehme an, dass \hat{A} und \hat{B} hermitesch sind. Die Erwartungswerte $\langle\hat{A}\rangle, \langle\hat{B}\rangle$ von \hat{A} und \hat{B} sind dann reell. Definiere die Funktion $F : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ durch

$$\begin{aligned} F(x) &:= \int_{\mathbb{R}^3} \left| [x(\hat{A} - \langle\hat{A}\rangle) - i(\hat{B} - \langle\hat{B}\rangle)]\psi \right|^2 d^3r \\ &= \int_{\mathbb{R}^3} \left([x(\hat{A} - \langle\hat{A}\rangle) - i(\hat{B} - \langle\hat{B}\rangle)]\psi \right)^* \left[x(\hat{A} - \langle\hat{A}\rangle) - i(\hat{B} - \langle\hat{B}\rangle) \right] \psi d^3r \\ &= \int_{\mathbb{R}^3} \psi^* \left[x(\hat{A} - \langle\hat{A}\rangle) + i(\hat{B} - \langle\hat{B}\rangle) \right] \left[x(\hat{A} - \langle\hat{A}\rangle) - i(\hat{B} - \langle\hat{B}\rangle) \right] \psi d^3r. \end{aligned} \quad (2.359)$$

Mit

$$\begin{aligned} &xi \left[(\hat{B} - \langle\hat{B}\rangle)(\hat{A} - \langle\hat{A}\rangle) - (\hat{A} - \langle\hat{A}\rangle)(\hat{B} - \langle\hat{B}\rangle) \right] \\ &= xi \left[\hat{B}\hat{A} - \hat{B}\langle\hat{A}\rangle - \langle\hat{B}\rangle\hat{A} + \langle\hat{B}\rangle\langle\hat{A}\rangle - \hat{A}\hat{B} + \hat{A}\langle\hat{B}\rangle + \langle\hat{A}\rangle\hat{B} - \langle\hat{A}\rangle\langle\hat{B}\rangle \right] \\ &= -xi[\hat{A}, \hat{B}] \end{aligned} \quad (2.360)$$

folgt

$$\begin{aligned} F(x) &= \int_{\mathbb{R}^3} \psi^* \left[x^2(\hat{A} - \langle\hat{A}\rangle)^2 + (\hat{B} - \langle\hat{B}\rangle)^2 - xi[\hat{A}, \hat{B}] \right] \psi d^3r \\ &= x^2 \langle(\Delta\hat{A})^2\rangle + \langle(\Delta\hat{B})^2\rangle - x \langle i[\hat{A}, \hat{B}] \rangle \geq 0. \end{aligned} \quad (2.361)$$

Seien $f, g \in H$. Dann gilt

$$\begin{aligned} \langle i[A, B]f | g \rangle &= \left\langle i(\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A})f | g \right\rangle = \left\langle i\hat{A}\hat{B}f - i\hat{B}\hat{A}f | g \right\rangle \\ &= \left\langle i\hat{A}\hat{B}f | g \right\rangle - \left\langle i\hat{B}\hat{A}f | g \right\rangle = -\left\langle \hat{B}f | i\hat{A}g \right\rangle + \left\langle \hat{A}f | i\hat{B}g \right\rangle = \left\langle f | i\hat{A}\hat{B}g \right\rangle - \left\langle f | i\hat{B}\hat{A}g \right\rangle \\ &= \left\langle f | i(\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A})g \right\rangle = \left\langle f | i[\hat{A}, \hat{B}]g \right\rangle. \end{aligned} \quad (2.362)$$

Also ist $i[\hat{A}, \hat{B}]$ hermitesch und $\langle i[\hat{A}, \hat{B}] \rangle$ ist reell. $F(x)$ ist eine nach oben geöffnete Parabel mit genau einem Minimum x_0 . Dieses ergibt sich durch Nullsetzen der Ableitung zu

$$0 = 2x_0 \langle (\Delta\hat{A})^2 \rangle - \langle i[\hat{A}, \hat{B}] \rangle \Leftrightarrow x_0 = \frac{\langle i[\hat{A}, \hat{B}] \rangle}{2 \langle (\Delta\hat{A})^2 \rangle}. \quad (2.363)$$

Setzt man dies in Glg. (2.361) ein, erhält man

$$\frac{1}{4} \frac{\langle i[\hat{A}, \hat{B}] \rangle^2}{\langle (\Delta\hat{A})^2 \rangle} + \langle (\Delta\hat{B})^2 \rangle - \frac{\langle i[\hat{A}, \hat{B}] \rangle^2}{2 \langle (\Delta\hat{A})^2 \rangle} \geq 0 \Leftrightarrow \langle (\Delta\hat{A})^2 \rangle \langle (\Delta\hat{B})^2 \rangle \geq \frac{1}{4} \langle i[\hat{A}, \hat{B}] \rangle^2. \quad (2.364)$$

Dies kann man auch schreiben als

$$\langle (\Delta\hat{A})^2 \rangle \langle (\Delta\hat{B})^2 \rangle \geq \frac{1}{4} |\langle [\hat{A}, \hat{B}] \rangle|^2. \quad (2.365)$$

Hieraus kann man folgern, dass man die Erwartungswerte nichtkommutierender Operatoren im Allgemeinen nicht gleichzeitig beliebig genau bestimmen kann. Die Eigenwerte Hermite'scher Operatoren sind die Messgrößen der Quantenmechanik. Sei ein gebundener Zustand gegeben, der durch $N \geq 1$ Quantenzahlen festgelegt werden kann. Man bezeichnet einen Satz Hermite'scher Operatoren $\hat{A}_1, \dots, \hat{A}_N$ als *vollständige Observablen*, wenn die \hat{A}_i mit $1 \leq i \leq N$ paarweise kommutieren. Mit dieser Voraussetzung kann man die Quantenzahlen gleichzeitig messen.

2.3.8 H-Atom

Die Materie auf der Erde strukturiert sich in Atome, die aus einem positiv geladenen Kern aus Protonen und Neutronen der Kernladungszahl $Z \in \mathbb{N}$ mit $Z \geq 1$ bestehen, sowie aus einer Elektronenhülle. Z nennt man auch die Ordnungszahl, alle Atome der gleichen Ordnungszahl fasst man zu einem *chemischen Element* zusammen. Die Massenzahl $N \in \mathbb{N}$, $N \geq Z \geq 1$ entspricht der Anzahl der Protonen und Neutronen im Kern. Protonen sind einfach (in Einheiten der Elementarladung e) positiv geladen, Neutronen sind neutral. Atome gleicher Ordnungszahl aber unterschiedlicher Massenzahl nennt man *Isotope*. Da die Elektronen ebenfalls einfach negativ geladen sind, besteht ein neutrales Atom aus genauso vielen Protonen wie Elektronen. Fehlen Elektronen oder sind zusätzliche vorhanden, so ist dies ein *Ion*, das Atom wurde *ionisiert*. Jedes Element erhält ein Symbol, z. B. A , man schreibt Z_A , wenn A die Ordnungszahl Z hat und Isotope der Massenzahl N gemeint sind. In der Natur treten Ordnungszahlen bis 92 auf, in Kernreaktoren kann man Elemente höherer Ordnungszahl erzeugen. Für die Atmosphärenphysik ist die genaue Struktur des Kerns irrelevant, man nimmt ihn als positiv geladene Punktmasse an.

Das Wasserstoffatom (Elementsymbol H) ist das einfachste Atom, es besteht aus einem Proton als Kern und einem Elektron in der Hülle. Es wird hier untersucht. Aus Absch. 2.1.1 ist das Konzept der reduzierten Masse bekannt. Dieses lässt sich auch quantenmechanisch anwenden. Hierzu geht man vom klassischen Fall aus und stellt die Lagrange-Funktion des Zwei-Teilchen-Systems auf:

$$L(\dot{\mathbf{r}}_1, \dot{\mathbf{r}}_2, \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \frac{m_1}{2} \dot{\mathbf{r}}_1^2 + \frac{m_2}{2} \dot{\mathbf{r}}_2^2 - V(\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1) \quad (2.366)$$

Hierbei geht man sinnvollerweise davon aus, dass das Potential nur vom Relativvektor abhängt. Führt man die

Definitionen

$$\mathbf{r} := \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2, \quad (2.367)$$

$$\mathbf{R} := \frac{m_1 \mathbf{r}_1 + m_2 \mathbf{r}_2}{m_1 + m_2}, \quad (2.368)$$

$$M := m_1 + m_2, \quad (2.369)$$

$$\mu := \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2} \quad (2.370)$$

ein, kann man rechnen

$$\begin{aligned} \frac{M}{2} \dot{\mathbf{R}}^2 + \frac{\mu}{2} \dot{\mathbf{r}}^2 &= \frac{1}{2M} (m_1^2 \dot{\mathbf{r}}_1^2 + m_2^2 \dot{\mathbf{r}}_2^2 + 2m_1 m_2 \dot{\mathbf{r}}_1 \cdot \dot{\mathbf{r}}_2) + \frac{m_1 m_2}{2(m_1 + m_2)} (\dot{\mathbf{r}}_1^2 + \dot{\mathbf{r}}_2^2 - 2\dot{\mathbf{r}}_1 \cdot \dot{\mathbf{r}}_2) \\ &= \frac{1}{2} m_1 \dot{\mathbf{r}}_1^2 + \frac{1}{2} m_2 \dot{\mathbf{r}}_2^2. \end{aligned} \quad (2.371)$$

Somit lautet eine alternative Lagrange-Funktion

$$L(\dot{\mathbf{R}}, \dot{\mathbf{r}}, \mathbf{r}) = \frac{M}{2} \dot{\mathbf{R}}^2 + \frac{\mu}{2} \dot{\mathbf{r}}^2 - V(\mathbf{r}). \quad (2.372)$$

Für die kanonischen Impulse folgt

$$\mathbf{p} = \frac{\partial L}{\partial \dot{\mathbf{r}}} = \mu \dot{\mathbf{r}}, \quad (2.373)$$

$$\mathbf{P} = \frac{\partial L}{\partial \dot{\mathbf{R}}} = M \dot{\mathbf{R}}. \quad (2.374)$$

Für die Hamilton-Funktion folgt

$$H(\mathbf{P}, \mathbf{p}, \mathbf{r}) = \frac{\mathbf{P}^2}{2M} + \frac{\mathbf{p}^2}{2\mu} + V(\mathbf{r}). \quad (2.375)$$

Mit den Ersetzungsregeln für Operatoren schreibt man

$$\mathbf{P} \rightarrow \hat{\mathbf{P}} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \mathbf{R}}, \quad (2.376)$$

$$\mathbf{p} \rightarrow \hat{\mathbf{p}} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}}. \quad (2.377)$$

So erhält man den Hamilton-Operator

$$\hat{H}' = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_{\mathbf{R}} - \frac{\hbar^2}{2\mu} \Delta_{\mathbf{r}} + V(\mathbf{r}). \quad (2.378)$$

Er ist anzuwenden auf eine Wellenfunktion $\psi = \psi(\mathbf{R}, \mathbf{r})$:

$$\hat{H}' \psi(\mathbf{R}, \mathbf{r}) = E \psi(\mathbf{R}, \mathbf{r}). \quad (2.379)$$

\hat{H}' hängt nicht explizit von \mathbf{R} ab, daher gilt

$$[\hat{H}', \hat{\mathbf{P}}] = 0. \quad (2.380)$$

Nach Absch. 2.3.6.3 haben \hat{H}' und $\hat{\mathbf{P}}$ somit dieselben Eigenfunktionen. Man sucht daher nach Lösungen, die Eigenfunktionen von $\hat{\mathbf{P}}$ sind:

$$\hat{\mathbf{P}} \psi(\mathbf{R}, \mathbf{r}) = \hbar \mathbf{K} \psi(\mathbf{R}, \mathbf{r}). \quad (2.381)$$

Daraus folgt

$$\psi(\mathbf{R}, \mathbf{r}) = \exp(i\mathbf{K} \cdot \mathbf{R}) \varphi(\mathbf{r}). \quad (2.382)$$

Dies setzt man in die stationäre SG ein:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2M} \Delta_{\mathbf{R}} - \frac{\hbar^2}{2\mu} \Delta_{\mathbf{r}} + V(\mathbf{r}) - E \right) \exp(i\mathbf{K} \cdot \mathbf{R}) \varphi(\mathbf{r}) = 0 \quad (2.383)$$

Mit den Definitionen

$$\Delta := \Delta_{\mathbf{r}}, \quad (2.384)$$

$$\varepsilon := E - \frac{\hbar^2 K^2}{2M} \quad (2.385)$$

wird dies zu

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2\mu} \Delta + V(\mathbf{r}) - \varepsilon \right) \varphi(\mathbf{r}) = 0. \quad (2.386)$$

Mit dem Hamilton-Operator

$$\hat{H} := -\frac{\hbar^2}{2\mu} \Delta + V(\mathbf{r}) \quad (2.387)$$

erhält man

$$\hat{H}\varphi(\mathbf{r}) = \varepsilon\varphi(\mathbf{r}). \quad (2.388)$$

Die Schwerpunktbewegung führt zu einer Modulation der Wellenfunktion mit $e^{i\mathbf{K} \cdot \mathbf{R}}$ und einem Beitrag zur kinetischen Energie von $\hbar^2 K^2 / 2m$. Dies wurde hier abgekoppelt. Man kann also durch den Übergang

$$m_e \rightarrow \mu \quad (2.389)$$

bei den Wasserstoff-Eigenzuständen eine höhere Genauigkeit erzielen. Nun sollen diese Eigenfunktionen ermittelt werden. Die Schrödinger-Gleichung

$$\hat{H}|\psi\rangle = E|\psi\rangle \quad (2.390)$$

muss für ein nur vom Abstand abhängendes Potential $V = V(r)$ gelöst werden:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi + V(r) \psi = E \psi, \quad (2.391)$$

hierbei ist m die Masse des betrachteten Teilchens. Zur Lösung macht man einen Produktansatz der Form

$$\psi(r, \theta, \varphi) = R(r) G(\theta, \varphi). \quad (2.392)$$

Man kann für den Laplace-Operator Δ schreiben

$$\Delta = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \Delta_{\theta, \varphi} \quad (2.393)$$

mit einem Anteil $\Delta_{\theta, \varphi}$, der nur partielle Winkelableitungen enthält (s. Glg. (A.270)). Setzt man dies mit Glg. (2.392) in die Schrödinger-Gleichung ein, erhält man zunächst

$$\begin{aligned} & -G(\theta, \varphi) \frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) R(r) - R(r) \frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r^2} \Delta_{\theta, \varphi} G(\theta, \varphi) \\ & + V(r) R(r) G(\theta, \varphi) = ER(r) G(\theta, \varphi). \end{aligned} \quad (2.394)$$

Man weiß, dass ψ außerhalb von Nullmengen nicht Null ist, also kann man separieren

$$-\frac{1}{R(r)} \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) R(r) + r^2 V(r) - Er^2 = \frac{1}{G(\theta, \varphi)} \frac{\hbar^2}{2m} \Delta_{\theta, \varphi} G(\theta, \varphi). \quad (2.395)$$

Beide Seiten sind also gleich einer Separationskonstanten, die mit $-\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2m}$ bezeichnet werden soll mit $l \in \mathbb{N}$. Die Lösungen bekommen daher einen Index l . Zunächst löst man den Winkelanteil. Die DGL hierfür lautet

$$\Delta_{\theta, \varphi} G_l(\theta, \varphi) = -l(l+1) G_l(\theta, \varphi). \quad (2.396)$$

Dies wird von den Kugelflächenfunktionen $Y_{l,m}(\theta, \varphi)$ Glg. (A.435) erfüllt, s. Glg. (A.446), hierbei gilt $|m| \leq l$. Die Normierungsbedingung lautet

$$\int_{\varphi=0}^{2\pi} \int_{\theta=0}^{\pi} |G_l|^2 \sin(\theta) d\theta d\varphi \stackrel{!}{=} 1. \quad (2.397)$$

Auch dies wird durch die Kugelflächenfunktionen $Y_{l,m}(\theta, \varphi)$ erfüllt. Für den Radialteil erhält man

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2m} [r^2 R_l''(r) + 2r R_l'(r)] + r^2 V(r) R_l(r) - Er^2 R_l(r) &= -\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2m} R_l(r) \\ \Leftrightarrow \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} \right) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} + V(r) - E \right] R_l(r) &= 0. \end{aligned} \quad (2.398)$$

Definiere $U_l(r) := R_l(r)r$, dann ist $R_l(r) = \frac{U_l(r)}{r}$ und somit

$$\begin{aligned} \left(\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} \right) \frac{U_l(r)}{r} &= \frac{d}{dr} \left(-\frac{U_l(r)}{r^2} + \frac{\frac{dU_l(r)}{dr}}{r} \right) + \frac{2}{r} \left(\frac{\frac{dU_l(r)}{dr}}{r} - \frac{1}{r^2} U_l(r) \right) \\ &= \frac{2U_l(r)}{r^3} - \frac{\frac{dU_l(r)}{dr}}{r^2} + \frac{\frac{d^2U_l(r)}{dr^2}}{r} - \frac{\frac{dU_l(r)}{dr}}{r^2} + \frac{2}{r^2} \frac{dU_l(r)}{dr} - \frac{2}{r^3} U_l(r), \end{aligned} \quad (2.399)$$

also ist

$$\left(\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} \right) R_l(r) = \frac{1}{r} \frac{d^2}{dr^2} U_l(r). \quad (2.400)$$

Die $U_l(r)$ erfüllen also die Differenzialgleichung

$$\begin{aligned} \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dr^2} + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} + V(r) - E \right] U_l(r) &= 0 \\ \Leftrightarrow \left[-\frac{d^2}{dr^2} + \frac{l(l+1)}{r^2} + \frac{2mV(r)}{\hbar^2} - \frac{2mE}{\hbar^2} \right] U_l(r) &= 0. \end{aligned} \quad (2.401)$$

Glg. (2.401) ist die *radiale Schrödinger-Gleichung*. Nun wird für $V(r)$ das Coulomb-Potential eingesetzt

$$V(r) = -\frac{Ze^2}{r}, \quad (2.402)$$

es werden cgs-Einheiten verwendet. Hierbei wird verallgemeinernd davon ausgegangen, dass sich Z Protonen im Kern befinden und nur ein Elektron in der Hülle. Glg. (2.401) wird damit zu

$$\left[-\frac{d^2}{dr^2} + \frac{l(l+1)}{r^2} - \frac{2mZe^2}{\hbar^2 r} - \frac{2mE}{\hbar^2} \right] U_l(r) = 0. \quad (2.403)$$

An dieser Stelle definiert man den Bohr-Radius a_B durch

$$a_B := \frac{\hbar^2}{e^2 m_e}, \quad (2.404)$$

und definiere weiterhin $u := \frac{r}{a_B}$. Dann gilt

$$\frac{d^2}{dr^2} = \frac{d}{dr} \left(\frac{du}{dr} \frac{d}{du} \right) = \frac{d}{dr} \left(\frac{1}{a_B} \frac{d}{du} \right) = \frac{1}{a_B^2} \frac{d^2}{du^2}. \quad (2.405)$$

Mit der Ersetzung

$$U_l(r) \rightarrow U_l(u) \quad (2.406)$$

und den Definitionen

$$E_{\text{at}} := \frac{\hbar^2}{m_e a_B^2}, \quad (2.407)$$

$$\varepsilon := \frac{E}{E_{\text{at}}} \quad (2.408)$$

wird Glg. (2.403) zu

$$\left[-\frac{d^2}{du^2} + \frac{l(l+1)}{u^2} - \frac{2Z}{u} - 2\varepsilon \right] U_l(u) = 0. \quad (2.409)$$

Für große u gilt

$$-\frac{d^2}{du^2} U_l(u) - 2\varepsilon U_l(u) \approx 0. \quad (2.410)$$

Man macht einen Ansatz

$$U_l(u) = \exp(-\lambda u) \quad (2.411)$$

mit $\lambda \in \mathbb{R}$, $\lambda > 0$.
Dies ergibt

$$\lambda^2 = -2\varepsilon. \quad (2.412)$$

Für kleine r gilt

$$\frac{d^2 U_l(u)}{du^2} \approx l(l+1) \frac{U_l(u)}{u^2}. \quad (2.413)$$

Hier bietet sich ein Ansatz

$$U_l(u) = u^k \quad (2.414)$$

mit $k \in \mathbb{N}$, $k \geq 2$ an. Es folgt

$$k(k-1) = l(l+1), \quad (2.415)$$

also

$$k = l+1. \quad (2.416)$$

Setze nun eine Funktion $P_l(u)$ an mit

$$U_l(u) = P_l(u) u^{l+1} \exp(-\lambda u) \quad (2.417)$$

an. Dann gelten

$$U'_l = P'_l u^{l+1} \exp(-\lambda u) + (l+1) \frac{U_l}{u} - \lambda U_l = P'_l u^{l+1} \exp(-\lambda u) + U_l \left(\frac{l+1}{u} - \lambda \right), \quad (2.418)$$

$$\begin{aligned} U''_l &= P''_l u^{l+1} \exp(-\lambda u) + (l+1) P'_l u^l \exp(-\lambda u) \\ &\quad - \lambda P'_l u^{l+1} \exp(-\lambda u) + U'_l \left(\frac{l+1}{u} - \lambda \right) - \frac{l+1}{u^2} U_l = P''_l u^{l+1} \exp(-\lambda u) \\ &\quad + (l+1) P'_l u^l \exp(-\lambda u) - \lambda P'_l u^{l+1} \exp(-\lambda u) \\ &\quad + \left(\frac{l+1}{u} - \lambda \right) \left[P'_l u^{l+1} \exp(-\lambda u) + U_l \left(\frac{l+1}{u} - \lambda \right) \right] - \frac{l+1}{u^2} U_l \\ &= P''_l u^{l+1} \exp(-\lambda u) + P'_l u^l \exp(-\lambda u) + (l+1) - 2\lambda P'_l u^{l+1} \exp(-\lambda u) \\ &\quad + \lambda^2 P_l u^{l+1} \exp(-\lambda u) - 2\lambda(l+1) P_l u^l \exp(-\lambda u) + l(l+1) P_l u^{l-1} \exp(-\lambda u) \\ &= \exp(-\lambda u) u^{l+1} \left[P''_l + \frac{2(l+1)P'_l}{u} - 2\lambda P'_l + \lambda^2 P_l - 2\lambda \frac{l+1}{u} P_l + l \frac{l+1}{u^2} P_l \right]. \end{aligned} \quad (2.419)$$

Setzt man dies in Glg. (2.409) ein, erhält man

$$\begin{aligned} &- \exp(-\lambda u) u^{l+1} \left[P''_l + \frac{2(l+1)P'_l}{u} - 2\lambda P'_l + \lambda^2 P_l - 2\lambda \frac{l+1}{u} P_l + l \frac{l+1}{u^2} P_l \right] \\ &+ l \frac{l+1}{u^2} P_l \exp(-\lambda u) u^{l+1} - 2Z \exp(-\lambda u) u^l P_l - 2\varepsilon \exp(-\lambda u) u^{l+1} P_l = 0 \\ \Leftrightarrow &- u^{l+1} P''_l - u^l + (l+1) P'_l + 2\lambda P'_l u^{l+1} - \lambda^2 P_l u^{l+1} + 2\lambda(l+1) u^l P_l - 2Z u^l P_l - 2\varepsilon u^{l+1} P_l = 0 \\ \Leftrightarrow &u P''_l + 2(l+1) P'_l - 2\lambda P'_l u + \lambda^2 P_l u - 2\lambda(l+1) P_l + 2Z P_l + 2\varepsilon u P_l = 0 \\ \Leftrightarrow &u P''_l + (2l+2 - 2\lambda u) P'_l + (\lambda^2 u - 2\lambda(l+1) + 2Z + 2\varepsilon u) P_l = 0 \\ \Leftrightarrow &u P''_l + (2l+2 - 2\lambda u) P'_l + (-2\lambda(l+1) + 2Z) P_l = 0, \end{aligned} \quad (2.420)$$

der letzte Schritt folgt wegen $\lambda^2 = -2\varepsilon$, Glg. (2.412). Dies wird durch 2λ dividiert:

$$\frac{1}{2\lambda} u P''_l + \left(\frac{l+1}{\lambda} - u \right) P'_l + \left(\frac{Z}{\lambda} - l - 1 \right) P_l = 0 \quad (2.421)$$

Definiere

$$x := 2\lambda u, \quad (2.422)$$

dann sind

$$u = \frac{x}{2\lambda}, \quad (2.423)$$

$$\frac{d}{du} = 2\lambda \frac{d}{dx}, \quad (2.424)$$

$$\frac{d^2}{du^2} = 4\lambda^2 \frac{d^2}{dx^2}. \quad (2.425)$$

Ersetzt man

$$P_l(u) \rightarrow P_l(x), \quad (2.426)$$

erhält man

$$\begin{aligned} x P''_l + \left(\frac{l+1}{\lambda} - \frac{x}{2\lambda} \right) 2\lambda P'_l + \left(\frac{Z}{\lambda} - l - 1 \right) P_l &= 0 \\ \Leftrightarrow x P''_l + (2l+2 - x) P'_l + \left(\frac{Z}{\lambda} - l - 1 \right) P_l &= 0. \end{aligned} \quad (2.427)$$

Dies ist die *Laguerre'sche Differenzialgleichung*. In Absch. A.14.3 ist gezeigt, dass die dort in Glg. (A.412) definierten *Laguerre-Polynome* $L_{n_r, 2l+1}(x)$ diese Gleichung erfüllen, hierbei ist $n_r \in \mathbb{N}$. Definiere $n := \frac{Z}{\lambda} \in \mathbb{N}$, n

ist die *Hauptquantenzahl*. Für sie gilt

$$n = n_r + l + 1, \quad (2.428)$$

hieraus folgt $l < n$. Es gilt somit für die Energie-Eigenwerte mit Glg. (2.412)

$$\varepsilon = -\frac{\lambda^2}{2} = -\frac{Z^2}{2n^2}, \quad (2.429)$$

also gilt $n \geq 1$. Es folgt in ursprünglichen Einheiten

$$E_n = -\frac{Z^2}{2n^2} E_{\text{at}} = -\frac{Z^2 \hbar^2}{2n^2 m_e a_B^2}. \quad (2.430)$$

Somit gilt für die Radialfunktionen

$$\begin{aligned} R_{n_r, l}(r) &= C_{n_r, l} \frac{U_{n_r, l}(r)}{r} = C_{n_r, l} \frac{1}{r} L_{n_r, 2l+1} \left(\frac{2Zr}{na_B} \right) \left(\frac{2Zr}{na_B} \right)^{l+1} \exp \left(-\frac{Zr}{na_B} \right) \\ &= C_{n_r, l} \frac{2Z}{na_B} \left(\frac{2Zr}{na_B} \right)^l L_{n_r, 2l+1} \left(\frac{2Zr}{na_B} \right) \exp \left(-\frac{Zr}{na_B} \right) \end{aligned} \quad (2.431)$$

mit einer nun zu bestimmenden Normierungskonstanten $C_{n_r, l} \in \mathbb{R}$. Die Wahrscheinlichkeit $P(r)$, das Teilchen in einem Abstand höchstens r vom Ursprung anzutreffen, ist gegeben durch

$$P(r) = \int_0^r \int_0^{2\pi} \int_0^\pi \left| y_{n_r, l, m}(r', \theta, \varphi) \right|^2 r'^2 \sin(\theta) d\theta d\varphi dr' = \int_0^r |R_{n_r, l}(r')|^2 r'^2 dr', \quad (2.432)$$

also ist die radiale Wahrscheinlichkeitsdichte $\rho_{n_r, l}(r)$ gegeben durch

$$\rho_{n_r, l}(r) = \frac{dP}{dr} = R_{n_r, l}(r)^2 r^2. \quad (2.433)$$

Die Normierungsbedingung lautet daher

$$\int_0^\infty R_{n_r, l}(r)^2 r^2 dr \stackrel{!}{=} 1. \quad (2.434)$$

Man setzt

$$\int_0^\infty U_{n_r, l}(r)^2 dr \stackrel{!}{=} \frac{1}{C_{n_r, l}^2} \quad (2.435)$$

und skaliert das Integral mit $y = \frac{2Zr}{na_B}$ um:

$$\begin{aligned} \int_0^\infty U_{n_r, l}(r)^2 dr &= \int_0^\infty y^{2l+2} L_{n_r, 2l+1}(y)^2 \exp(-y) \frac{na_B}{2Z} dy \\ &= \frac{na_B}{2Z} \int_0^\infty y^{2l+2} L_{n_r, 2l+1}(y)^2 \exp(-y) dy. \end{aligned} \quad (2.436)$$

Für das verbleibende Integral gilt mit Glg. (A.422)

$$\int_0^\infty y^{2l+2} L_{n_r, 2l+1}(y)^2 \exp(-y) dy = \frac{(n_r + 2l + 1)!}{n_r!} (2n_r + 2l + 2) = 2n \frac{(n+l)!}{n_r!}. \quad (2.437)$$

Es folgt

$$C_{n_r, l} = \sqrt{\frac{Z}{a_B}} \frac{1}{n} \sqrt{\frac{n_r!}{(n+l)!}}. \quad (2.438)$$

l	Bezeichnung
0	s
1	p
2	d
3	f

Table 2.2: Bezeichnung der Wasserstoff-Eigenfunktionen in Abhängigkeit der Drehimpulsquantenzahl l . Für höhere l wird alphabetisch fortgesetzt.

Die normierten Radialfunktionen lauten also

$$R_{n,l}(r) = \sqrt{\frac{Z^3}{a_B^3}} \sqrt{\frac{(n-l-1)!}{(n+l)!}} \frac{z}{n^2} \left(\frac{zZr}{na_B}\right)^l L_{n-l-1, zl+1} \left(\frac{zZr}{na_B}\right) \exp\left(-\frac{Zr}{na_B}\right). \quad (2.439)$$

Die Wasserstoff-Eigenfunktionen $\psi_{n,l,m}(r, \theta, \varphi)$ lauten schlussendlich

$$\begin{aligned} \psi_{n,l,m}(r, \theta, \varphi) &= R_{n,l}(r) Y_{l,m}(\theta, \varphi) \\ &= \sqrt{\frac{Z^3}{a_B^3}} \frac{z}{n^2} \sqrt{\frac{(n-l-1)!}{(n+l)!}} \left(\frac{zZr}{na_B}\right)^l L_{n-l-1, zl+1} \left(\frac{zZr}{na_B}\right) \exp\left(-\frac{Zr}{na_B}\right) Y_{l,m}(\theta, \varphi). \end{aligned} \quad (2.440)$$

Die Wahrscheinlichkeitsdichten $|\psi_{n,l,m}|^2$ bezeichnet man auch als *Orbitale*. Entsprechend der sogenannten *Drehimpulsquantenzahl* l bezeichnet man sie wie in Tab. 2.2 angegeben. Unterschiedliche Eigenfunktionen zum gleichen Eigenwert bezeichnet man als *entartet*. Aus den Bedingungen $n \in \mathbb{N}$, $l < n$ und $|m| \leq l$ kann man die Vielfachheit N der Entartung bei gegebener Hauptquantenzahl n ermitteln (die Energie hängt nur von der Hauptquantenzahl n ab):

$$N = \sum_{l=0}^{n-1} \sum_{m=-l}^l 1 = \sum_{l=0}^{n-1} (2l+1) = \sum_{l=1}^n (2l-1) = n(n+1) - n = n^2. \quad (2.441)$$

Dabei wurde die Gauß'sche Summenformel Glg. (A.5) verwendet. Die Wasserstoff-Eigenfunktionen zum Energieniveau E_n sind also n^2 -fach entartet. Bei Berücksichtigung des Spins und Nicht-Berücksichtigung relativistischer Korrekturen verdoppelt sich der Entartungsgrad.

2.3.9 Drehimpuls

Der Drehimpuls \mathbf{L} einer Punktmasse mit dem Impuls $\mathbf{p} = (p_1, p_2, p_3)^T$ am Ort $\mathbf{r} = (x_1, x_2, x_3)^T$ wird in der klassischen Mechanik durch

$$\mathbf{L} := \mathbf{r} \times \mathbf{p} = \sum_{j,k,l=1}^3 \varepsilon_{j,k,l} x_j p_k e_l \quad (2.442)$$

definiert. Ersetzt man in dieser Gleichung die kartesischen Ortskomponenten durch die entsprechenden Operatoren

$$x_j \rightarrow \hat{x}_j \quad (2.443)$$

sowie die kartesischen Impulskomponenten durch die Impulsoperatoren

$$p_k \rightarrow \hat{p}_k, \quad (2.444)$$

erhält man den *Drehimpulsoperator*

$$\hat{\mathbf{L}} := \hbar \sum_{j,k,l=1}^3 -i\varepsilon_{j,k,l} \hat{x}_j \frac{\partial}{\partial x_k} e_l. \quad (2.445)$$

Ausgeschrieben erhält man in der Ortsdarstellung in kartesischen Koordinaten

$$\hat{L}_x = \frac{\hbar}{i} \left(y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \right), \quad (2.446)$$

$$\hat{L}_y = \frac{\hbar}{i} \left(z \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial z} \right), \quad (2.447)$$

$$\hat{L}_z = \frac{\hbar}{i} \left(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right). \quad (2.448)$$

Der Impulsoperator $\hat{\mathbf{p}}$ ist genau wie der Ortsoperator $\hat{\mathbf{r}}$ hermitesch. Da \hat{p}_j mit \hat{x}_k für $x \neq k$ vertauscht, ist nach Absch. 2.3.6.2 auch die Hintereinanderausführung $\hat{p}_j \hat{x}_k = \hat{x}_k \hat{p}_j$ hermitesch. Somit sind die Drehimpulsoperatoren hermitesch. Man definiert

$$\hat{L}_{\pm} := \hat{L}_x \pm i \hat{L}_y. \quad (2.449)$$

Als Kurzschreibweise führt man einen verallgemeinerten Drehimpulsoperator

$$\hat{\mathbf{J}} := -i \hat{\mathbf{r}} \times \nabla \quad (2.450)$$

ein. Nun sollen einige Kommutatorrelationen der Drehimpulsoperatoren hergeleitet werden. Es gilt in der Ortsdarstellung

$$\hat{J}_l = -i \sum_{j,k=1}^3 \varepsilon_{j,k,l} x_j \frac{\partial}{\partial x_k}. \quad (2.451)$$

Somit folgt für den Kommutator zweier Komponenten des Drehimpulsoperators

$$\begin{aligned} [\hat{J}_j, \hat{J}_k] &= \hat{J}_j \hat{J}_k - \hat{J}_k \hat{J}_j = \left(-i \sum_{l,m=1}^3 \varepsilon_{l,m,j} x_l \frac{\partial}{\partial x_m} \right) \left(-i \sum_{l,m=1}^3 \varepsilon_{l,m,k} x_l \frac{\partial}{\partial x_m} \right) \\ &\quad - \left(-i \sum_{l,m=1}^3 \varepsilon_{l,m,k} x_l \frac{\partial}{\partial x_m} \right) \left(-i \sum_{l,m=1}^3 \varepsilon_{l,m,j} x_l \frac{\partial}{\partial x_m} \right) \\ &= - \left(\sum_{l,m=1}^3 \varepsilon_{l,m,j} x_l \frac{\partial}{\partial x_m} \right) \left(\sum_{l,m=1}^3 \varepsilon_{l,m,k} x_l \frac{\partial}{\partial x_m} \right) + \left(\sum_{l,m=1}^3 \varepsilon_{l,m,k} x_l \frac{\partial}{\partial x_m} \right) \left(\sum_{l,m=1}^3 \varepsilon_{l,m,j} x_l \frac{\partial}{\partial x_m} \right) \\ &= - \sum_{l,m,n,o=1}^3 \varepsilon_{l,m,j} \varepsilon_{n,o,k} x_l \frac{\partial}{\partial x_m} x_n \frac{\partial}{\partial x_o} + \sum_{l,m,n,o=1}^3 \varepsilon_{l,m,k} \varepsilon_{n,o,j} x_l \frac{\partial}{\partial x_m} x_n \frac{\partial}{\partial x_o} \\ &= - \sum_{l,m,n,o=1}^3 \varepsilon_{l,m,j} \varepsilon_{n,o,k} x_l x_n \frac{\partial^2}{\partial x_o \partial x_m} + \sum_{l,m,n,o=1}^3 \varepsilon_{l,m,k} \varepsilon_{n,o,j} x_l x_n \frac{\partial^2}{\partial x_o \partial x_m} \\ &\quad - \sum_{l,m,n,o=1}^3 \varepsilon_{l,m,j} \varepsilon_{n,o,k} x_l \delta_{n,m} \frac{\partial}{\partial x_o} + \sum_{l,m,n,o=1}^3 \varepsilon_{l,m,k} \varepsilon_{n,o,j} x_l \delta_{m,n} \frac{\partial}{\partial x_o} \\ &= \sum_{l,m,n,o=1}^3 x_l x_n (\varepsilon_{l,m,k} \varepsilon_{n,o,j} - \varepsilon_{l,m,j} \varepsilon_{n,o,k}) \frac{\partial^2}{\partial x_o \partial x_m} - \sum_{l,n,o=1}^3 \varepsilon_{l,n,j} \varepsilon_{n,o,k} x_l \frac{\partial}{\partial x_o} + \sum_{l,n,o=1}^3 \varepsilon_{l,n,k} \varepsilon_{n,o,j} x_l \frac{\partial}{\partial x_o} \\ &= \sum_{l,n,o=1}^3 x_l \frac{\partial}{\partial x_o} (\varepsilon_{l,n,k} \varepsilon_{n,o,j} - \varepsilon_{l,n,j} \varepsilon_{n,o,k}) = \sum_{n=1}^3 \sum_{l,o=1}^3 (\varepsilon_{l,n,k} \varepsilon_{n,o,j} - \varepsilon_{l,n,j} \varepsilon_{n,o,k}) x_l \frac{\partial}{\partial x_o} \\ &= \sum_{n=1}^3 \sum_{l,o=1}^3 \varepsilon_{j,k,n} \varepsilon_{l,o,n} x_l \frac{\partial}{\partial x_o} = \sum_{n=1}^3 \varepsilon_{j,k,n} \sum_{l,o=1}^3 \varepsilon_{l,o,n} x_l \frac{\partial}{\partial x_o} = \sum_{n=1}^3 \varepsilon_{j,k,n} \frac{i}{-i} \hat{J}_n = i \sum_{n=1}^3 \varepsilon_{j,k,n} \hat{J}_n. \end{aligned} \quad (2.452)$$

Dabei wurde Glg. (A.21) verwendet. Dies bedeutet insbesondere

$$[\hat{J}_1, \hat{J}_2] = i\hat{J}_3, \quad (2.453)$$

$$[\hat{J}_2, \hat{J}_3] = i\hat{J}_1, \quad (2.454)$$

$$[\hat{J}_3, \hat{J}_1] = i\hat{J}_2. \quad (2.455)$$

Somit ist

$$[\hat{J}_3, \hat{J}_\pm] = [\hat{J}_3, \hat{J}_1 \pm i\hat{J}_2] = [\hat{J}_3, \hat{J}_1] \pm [\hat{J}_3, i\hat{J}_2] = i\hat{J}_3 \pm i(-i\hat{J}_1) = \pm\hat{J}_1 + i\hat{J}_2 = \pm\hat{J}_\pm. \quad (2.456)$$

Weiterhin gelten

$$\begin{aligned} \hat{J}_\pm \hat{J}_\mp &= (\hat{J}_1 \pm i\hat{J}_2)(\hat{J}_1 \mp i\hat{J}_2) = \hat{J}_1^2 + \hat{J}_2^2 \mp i\hat{J}_1\hat{J}_2 \pm i\hat{J}_2\hat{J}_1 \\ &= \hat{\mathbf{J}}^2 - \hat{J}_3^2 \mp i[\hat{J}_1, \hat{J}_2] = \hat{\mathbf{J}}^2 - \hat{J}_3(\hat{J}_3 \mp 1) \end{aligned} \quad (2.457)$$

und

$$\begin{aligned} [\hat{\mathbf{J}}^2, \hat{J}_1] &= [\hat{J}_2^2 + \hat{J}_3^2, \hat{J}_1] = \hat{J}_2\hat{J}_2\hat{J}_1 - \hat{J}_1\hat{J}_2\hat{J}_2 + \hat{J}_3\hat{J}_3\hat{J}_1 - \hat{J}_1\hat{J}_3\hat{J}_3 \\ &= \hat{J}_2\hat{J}_2\hat{J}_1 - \hat{J}_1\hat{J}_2\hat{J}_2 + \hat{J}_2\hat{J}_1\hat{J}_2 - \hat{J}_2\hat{J}_1\hat{J}_2 + \hat{J}_3\hat{J}_3\hat{J}_1 - \hat{J}_1\hat{J}_3\hat{J}_3 + \hat{J}_3\hat{J}_1\hat{J}_3 - \hat{J}_3\hat{J}_1\hat{J}_3 \\ &= \hat{J}_2[\hat{J}_2, \hat{J}_1] + [\hat{J}_2, \hat{J}_1]\hat{J}_2 + \hat{J}_3[\hat{J}_3, \hat{J}_1] + [\hat{J}_3, \hat{J}_1]\hat{J}_3 \\ &= -i\hat{J}_2\hat{J}_3 - i\hat{J}_3\hat{J}_2 + i\hat{J}_3\hat{J}_2 + i\hat{J}_2\hat{J}_3 = 0, \end{aligned} \quad (2.458)$$

analog für \hat{J}_2 und \hat{J}_3 und somit auch

$$[\hat{\mathbf{J}}^2, \hat{J}_\pm] = 0. \quad (2.459)$$

Für die Behandlung des Drehimpulses im H-Atom sollen nun die Drehimpulsoperatoren in Kugelkoordinaten transformiert werden. Dazu verwendet man neben Glg. (A.267) die Darstellung

$$\nabla = \mathbf{e}_r \frac{\partial}{\partial r} + \mathbf{e}_\theta \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} + \mathbf{e}_\varphi \frac{1}{r \sin(\theta)} \frac{\partial}{\partial \varphi}. \quad (2.460)$$

des Gradienten. Weiterhin gelten die bekannten Relationen

$$\mathbf{e}_r \times \mathbf{e}_\theta = \mathbf{e}_\varphi \quad (2.461)$$

sowie

$$\mathbf{e}_r \times \mathbf{e}_\varphi = -\mathbf{e}_\theta. \quad (2.462)$$

Damit folgt in der Ortsdarstellung

$$\hat{\mathbf{J}} = -i\mathbf{r} \times \nabla = -i\mathbf{r} \times \left(\mathbf{e}_r \frac{\partial}{\partial r} + \mathbf{e}_\theta \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} + \mathbf{e}_\varphi \frac{1}{r \sin(\theta)} \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) = -i\mathbf{e}_\varphi \frac{\partial}{\partial \theta} + i\mathbf{e}_\theta \frac{1}{\sin(\theta)} \frac{\partial}{\partial \varphi}. \quad (2.463)$$

Aufgrund der Glg.en (A.263) - (A.265) gelten

$$\hat{J}_x = -i \left(-\sin(\varphi) \frac{\partial}{\partial \theta} - \cos(\varphi) \cot(\theta) \frac{\partial}{\partial \varphi} \right), \quad (2.464)$$

$$\hat{J}_y = -i \left(\cos(\varphi) \frac{\partial}{\partial \theta} - \sin(\varphi) \cot(\theta) \frac{\partial}{\partial \varphi} \right), \quad (2.465)$$

$$\hat{J}_z = -i \frac{\partial}{\partial \varphi}. \quad (2.466)$$

Weiterhin gilt

$$\begin{aligned}\hat{\mathbf{J}}^2 &= \hat{J}_x^2 + \hat{J}_y^2 + \hat{J}_z^2 \\ &= -\sin^2(\varphi) \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} - \cos^2(\varphi) \cot^2(\theta) \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} - \cos^2(\varphi) \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} - \sin^2(\varphi) \cot^2(\theta) \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} - \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} - \cot(\theta) \frac{\partial}{\partial \theta} \\ &= -\left(\frac{\partial^2}{\partial \theta^2} + \cot^2(\theta) \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} + \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} + \cot(\theta) \frac{\partial}{\partial \theta} \right) = -\left(\frac{1}{\sin(\theta)} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin(\theta) \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2(\theta)} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right).\end{aligned}\quad (2.467)$$

Dies entspricht mit Glg. (A.272) der Aussage

$$\hat{\mathbf{J}}^2 = -\Delta_{\theta, \varphi}. \quad (2.468)$$

Sei $|n, l, m\rangle$ der Zustand eines Elektrons im Wasserstoffatom mit den Quantenzahlen n , l und m . Aufgrund der Ortsdarstellung von $|n, l, m\rangle$ Glg. (2.440), der Definition der Kugelflächenfunktionen Glg. (A.435), der Darstellung der z-Komponenten des Drehimpulsoperators Glg. (2.466), der eben hergeleiteten Glg. (2.468) sowie der Eigenschaft Glg. (A.446) der Kugelflächenfunktionen gelten folgende zwei Aussagen:

$$\hat{L}^2 |n, l, m\rangle = \hbar^2 l(l+1) |n, l, m\rangle, \quad (2.469)$$

$$\hat{L}_z |n, l, m\rangle = m\hbar |n, l, m\rangle \quad (2.470)$$

Daraus folgen:

- Der Gesamtdrehmoment L im Zustand $|n, l, m\rangle$ ist $\hbar\sqrt{l(l+1)}$. Daher heißt l Drehimpulsquantenzahl.
- Die z-Komponente des Drehimpulses L_z im Zustand $|n, l, m\rangle$ ist $L_z = m\hbar$. m heißt *Magnetquantenzahl*.
- \hat{L}^2 , \hat{L}_z und \hat{H} kommutieren paarweise. Daher sind L^2 und L_z Erhaltungsgrößen und da die Wasserstoff-Eigenzustände von drei Quantenzahlen abhängen, sind diese drei Operatoren im Wasserstoffatom ohne Berücksichtigung des Spins vollständige Observablen.

Weiterhin findet man

$$\begin{aligned}\hat{J}_{\pm} &= \hat{J}_x \pm i\hat{J}_y = -i \left(-\sin(\varphi) \frac{\partial}{\partial \theta} - \cos(\varphi) \cot(\theta) \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \pm \left(\cos(\varphi) \frac{\partial}{\partial \theta} - \sin(\varphi) \cot(\theta) \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \\ &= (i\cos(\varphi) - \pm\sin(\varphi)) \cot(\theta) \frac{\partial}{\partial \varphi} + (\pm\cos(\varphi) + i\sin(\varphi)) \frac{\partial}{\partial \theta} \\ &= ie^{\pm i\varphi} \cot(\theta) \frac{\partial}{\partial \varphi} \pm e^{\pm i\varphi} \frac{\partial}{\partial \theta} = \exp(\pm i\varphi) \left(i\cot(\theta) \frac{\partial}{\partial \varphi} \pm \frac{\partial}{\partial \theta} \right).\end{aligned}\quad (2.471)$$

Nun wird der verallgemeinerte Drehimpulsoperator $\hat{\mathbf{J}}$ Glg. (2.450) noch etwas weiter behandelt. Er und seine Komponenten wurden als hermitesch identifiziert, somit ist auch $\hat{\mathbf{J}}^2$ als Hintereinanderausführung Hermite'scher, kommutativer Operatoren nach Absch. 2.3.6.2 hermitesch. Es gilt weiterhin

$$\hat{J}_+^+ = \hat{J}_-, \quad (2.472)$$

$$\hat{J}_-^+ = \hat{J}_+. \quad (2.473)$$

Unter den vier Operatoren $\hat{\mathbf{J}}^2, \hat{J}_x, \hat{J}_y, \hat{J}_z$ kann man nach Glg. (2.452) und Glg. (2.458) zwei finden, die kommutieren, nämlich $\hat{\mathbf{J}}^2$ und ein anderer, hierfür wird \hat{J}_z gewählt. Diese haben nach Absch. 2.3.6.3 die gleichen Eigenfunktionen, also kann man schreiben

$$\hat{\mathbf{J}}^2 |\lambda, m\rangle = \lambda |\lambda, m\rangle, \quad (2.474)$$

$$\hat{J}_z |\lambda, m\rangle = m |\lambda, m\rangle \quad (2.475)$$

mit reellen Eigenwerten $\lambda, m \in \mathbb{R}$. Nun schaut man sich die Zustände

$$\hat{J}_+ |\lambda, m\rangle \quad (2.476)$$

und

$$\hat{J}_- |\lambda, m\rangle \quad (2.477)$$

an. Da $\hat{\mathbf{J}}^2$ mit \hat{J}_\pm kommutiert, gilt

$$\hat{\mathbf{J}}^2 \hat{J}_\pm |\lambda, m\rangle = \hat{J}_\pm \hat{\mathbf{J}}^2 |\lambda, m\rangle = \lambda \hat{J}_\pm |\lambda, m\rangle. \quad (2.478)$$

Mit Glg. (2.456) folgt

$$\hat{J}_z \hat{J}_\pm - \hat{J}_\pm \hat{J}_z = \pm \hat{J}_\pm \Leftrightarrow \hat{J}_z \hat{J}_\pm = \hat{J}_\pm \hat{J}_z \pm \hat{J}_\pm \quad (2.479)$$

und somit

$$\hat{J}_z \hat{J}_\pm |\lambda, m\rangle = (\hat{J}_\pm \hat{J}_z \pm \hat{J}_\pm) |\lambda, m\rangle = \hat{J}_\pm (\hat{J}_z \pm 1) |\lambda, m\rangle = (m \pm 1) \hat{J}_\pm |\lambda, m\rangle. \quad (2.480)$$

Es gilt also

$$\hat{J}_\pm |\lambda, m\rangle = c_\pm |\lambda, m \pm 1\rangle. \quad (2.481)$$

mit $c_\pm \in \mathbb{R}$. Daher nennt man \hat{J}_+ *Aufsteigeoperator* und \hat{J}_- *Absteigeoperator*. Man muss nun die Normierungskonstanten c_\pm berechnen. Hierzu geht man von Normierung

$$\langle \lambda, m | \lambda, m \rangle \stackrel{!}{=} 1 \quad (2.482)$$

der Zustände aus, dies kann man einfach fordern. Man erhält somit

$$c_\pm^2 = \langle \lambda, m \pm 1 | c_\pm c_\pm | \lambda, m \pm 1 \rangle = \left\langle \hat{J}_\pm \lambda, m \middle| \hat{J}_\pm \right\rangle = \left\langle \lambda, m \middle| \hat{J}_\mp \hat{J}_\pm \right\rangle. \quad (2.483)$$

Hier kann man Glg. (2.457) einsetzen und erhält mit der Forderung $c_\pm > 0$

$$\begin{aligned} c_\pm^2 &= \left\langle \lambda, m \middle| \hat{\mathbf{J}}^2 - \hat{J}_z^2 \mp \hat{J}_z \right\rangle = \lambda - m^2 \mp m \\ \Leftrightarrow c_\pm &= \sqrt{\lambda - m^2 \mp m} = \sqrt{\lambda - m(m \pm 1)}. \end{aligned} \quad (2.484)$$

Nun muss man noch eine Bedingung für λ und m herleiten. Für einen Hermite'schen Operator \hat{A} gilt

$$\langle f | \hat{A}^2 f \rangle = \langle \hat{A}f | \hat{A}f \rangle \geq 0. \quad (2.485)$$

Daraus folgt

$$0 \leq \left\langle \lambda, m \middle| \hat{J}_x^2 \right\rangle + \left\langle \lambda, m \middle| \hat{J}_y^2 \right\rangle = \left\langle \lambda, m \middle| \hat{\mathbf{J}}^2 - \hat{J}_z^2 \right\rangle = \lambda - m^2. \quad (2.486)$$

Folglich gilt

$$\lambda \geq m^2 \geq 0. \quad (2.487)$$

Aus einem Zustand $|\lambda, m\rangle$ erhält man somit durch Anwendung der Auf - und Absteigeoperatoren die Zustände $|\lambda, m \pm 1\rangle$, $|\lambda, m \pm 2\rangle$ und so weiter. Dies muss jedoch wegen (2.487) irgendwo abbrechen, also muss die Normierung Glg. (2.484) bei einem maximalen m -Wert m_{\max} und bei einem minimalen m -Wert m_{\min} verschwinden:

$$\hat{J}_+ |\lambda, m_{\max}\rangle = 0 \Rightarrow c_+ = 0 \Rightarrow \lambda = m_{\max} (m_{\max} + 1), \quad (2.488)$$

$$\hat{J}_- |\lambda, m_{\min}\rangle = 0 \Rightarrow c_- = 0 \Rightarrow \lambda = m_{\min} (m_{\min} - 1) \quad (2.489)$$

$$\Rightarrow (m_{\max} + m_{\min}) (m_{\max} - m_{\min} + 1) = 0 \quad (2.490)$$

Wegen $m_{\max} \geq m_{\min}$ ist die zweite Klammer ungleich Null, also ist die erste Klammer gleich Null:

$$m_{\max} = -m_{\min} =: j \quad (2.491)$$

Es gilt

$$\lambda = j(j+1). \quad (2.492)$$

Der Aufsteigeoperator führt also in ganzzahligen Schritten von $-j$ zu j . Also ist $2j$ ganzzahlig, somit ist j ganz- oder halbzahlig. Nun führt man eine Bezeichnungsänderung

$$|\lambda, m\rangle = |j(j+1), m\rangle \rightarrow |j, m\rangle \quad (2.493)$$

ein. Diese Zustände sind normiert, weiterhin sind sie als Eigenzustände Hermite'scher Operatoren zu unterschiedlichen Eigenwerten orthogonal:

$$\langle j', m' | j, m \rangle = \delta_{j,j'} \delta_{m,m'}. \quad (2.494)$$

Ist j ganzzahlig, so ist die Ortsdarstellung der Lösung gegeben durch die Kugelflächenfunktionen Glg. (A.435). Hierdurch wird zum Beispiel der Bahndrehmomentum von Teilchen im Zentralkraftfeld beschrieben, s. Absch. 2.3.8. Der Fall, dass j halbzahlig ist, ist wichtig für Teilchen mit halbzahligem Spin. Teilchen mit halbzahligem Spin bezeichnet man als *Fermionen*, während man Teilchen mit ganzzahligem Spin als *Bosonen* bezeichnet. Beispiele für Fermionen sind Elektronen, Protonen und Neutronen, Photonen sind Bosonen.

Von nun an wird von halbzahligem Spin ausgegangen, nämlich $j = \frac{1}{2}$. In diesem Fall werden die Zustände $|j, m\rangle$ mit $|ss_z\rangle = |\frac{1}{2}, s_z\rangle$ bezeichnet. Man definiert

$$\left(\begin{array}{c} 1 \\ 0 \end{array} \right) := \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle, \quad (2.495)$$

$$\left(\begin{array}{c} 0 \\ 1 \end{array} \right) := \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle. \quad (2.496)$$

Glg. (2.495) wird als *Spin-up-Zustand* und Glg. (2.496) wird als *Spin-down-Zustand* bezeichnet. Es gilt $\hat{J}_z |\frac{1}{2}, m\rangle = m |\frac{1}{2}, m\rangle$, also folgt in Matrixschreibweise

$$J_z \left(\begin{array}{c} 1 \\ 0 \end{array} \right) = \left(\begin{array}{c} \frac{1}{2} \\ 0 \end{array} \right), \quad (2.497)$$

$$J_z \left(\begin{array}{c} 0 \\ 1 \end{array} \right) = \left(\begin{array}{c} 0 \\ -\frac{1}{2} \end{array} \right), \quad (2.498)$$

was erfüllt ist für

$$J_z = \frac{1}{2} \left(\begin{array}{cc} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{array} \right). \quad (2.499)$$

Für die Normierungskonstante c_{\pm} aus Glg. (2.484) gelten mit $\lambda = j(j+1) = \frac{1}{2} \cdot \frac{3}{2} = \frac{3}{4}$

$$c_+ = \sqrt{\frac{3}{4} + \frac{1}{2} \left(-\frac{1}{2} + 1 \right)} = 1, \quad (2.500)$$

$$c_- = \sqrt{\frac{3}{4} - \frac{1}{2} \left(\frac{1}{2} - 1 \right)} = 1. \quad (2.501)$$

Somit gilt wegen $\hat{J}_+ |\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle = 1$ und $\hat{J}_+ |\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle = |\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle$ auch

$$J_+ = \left(\begin{array}{cc} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{array} \right). \quad (2.502)$$

Wegen $\hat{J}_- |\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle = |\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle$ und $\hat{J}_- |\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle = 0$ gilt

$$J_- = \left(\begin{array}{cc} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{array} \right). \quad (2.503)$$

Somit gelten

$$J_x = \frac{1}{2} (J_+ + J_-) = \frac{1}{2} \left(\begin{array}{cc} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{array} \right), \quad (2.504)$$

$$J_y = -i \frac{1}{2} (J_+ - J_-) = \frac{1}{2} \left(\begin{array}{cc} 0 & -i \\ i & 0 \end{array} \right). \quad (2.505)$$

Die hier auftretenden Matrizen

$$\hat{\sigma}_x := \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad (2.506)$$

$$\hat{\sigma}_y := \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad (2.507)$$

$$\hat{\sigma}_z := \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (2.508)$$

nennst man auch *Pauli-Matrizen* oder Spinmatrizen.

2.3.10 Spin

Es stellt sich die Frage, ob die halbzahligen Zustände überhaupt physikalische Relevanz haben, oder nur rein mathematische Phänomene sind. Tatsächlich beschreiben diese Zustände die intrinsischen Eigendrehmomente der Elementarteilchen, eben den *Spin*. Experimentell kann man nur die Richtung, nicht aber den Betrag des Spins verändern, der eine Teilcheneigenschaft ist, genau wie die Ladung und die Masse. Er ist nicht an eine rotierende Massenverteilung geknüpft, also kein Drehimpuls im reinen Sinn.

Nun soll die Schrödinger-Gleichung auf ein Teilchen mit Masse m , Ladung q und Spin $1/2$ verallgemeinert werden. Hat man nun ein Teilchen mit Ladung q und Spin $1/2$ gegeben, so reicht zur Beschreibung des Zustands dieses Teilchens nicht mehr eine einfache Wellenfunktion $\mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{C}$ aus. Die Wahrscheinlichkeitsdichte hängt nämlich nicht mehr nur vom Ort ab, sondern auch vom Spinzustand. Mit den Definitionen Glg.en (2.495) und (2.496) kann man für den Zustand eines solchen Teilchens jedoch schreiben

$$|\psi(\mathbf{r}, t)\rangle = \varphi_+(\mathbf{r}, t) \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + \varphi_-(\mathbf{r}, t) \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (2.509)$$

mit orts- und zeitabhängigen Anteilen $\varphi_+(\mathbf{r}, t)$ und $\varphi_-(\mathbf{r}, t)$. Solch eine Wellenfunktion nennt man *Spinor*. Dieser Zustand ist natürlich normiert:

$$\langle \psi | \psi \rangle = \int_{\mathbb{R}^3} (|\varphi_+(\mathbf{r})|^2 + |\varphi_-(\mathbf{r})|^2) d^3 r \quad (2.510)$$

Man kann mit Glg. (2.98)

$$\hat{\mathbf{p}} \rightarrow \hat{\mathbf{p}} - \frac{q}{c} \hat{\mathbf{A}}, \quad (2.511)$$

ersetzen, um die Energie eines Teilchens im elektromagnetischen Feld zu berücksichtigen. Weiterhin muss der Term der potentiellen Energie erweitert werden. Ein magnetisches Moment $\boldsymbol{\mu}$ hat in einem B-Feld \mathbf{B} eine potentielle Energie

$$E_{\text{pot}} = -\boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{B}. \quad (2.512)$$

Da ein Elementarteilchen in seinem Ruhesystem nur genau eine ausgezeichnete Richtung kennt, nämlich die des Spins, muss das magnetische Moment parallel zum Spin sein. Den Spin ersetzt man durch den *Spinoperator*

$$\hat{\mathbf{s}} \rightarrow \hat{\mathbf{s}}. \quad (2.513)$$

Bei Teilchen mit Spin $1/2$ kann man dies mit den durch die Pauli-Matrizen definierten Operatoren $\hat{\sigma}_x, \hat{\sigma}_y, \hat{\sigma}_z$ schreiben als

$$\hat{\mathbf{s}} = \frac{\hbar}{2} \hat{\boldsymbol{\sigma}} = \frac{\hbar}{2} \boldsymbol{\sigma}. \quad (2.514)$$

Hierbei wurde ein Vektor

$$\boldsymbol{\sigma} = \sigma_x \mathbf{e}_x + \sigma_y \mathbf{e}_y + \sigma_z \mathbf{e}_z \in \mathbb{C}^{2 \times 2 \times 3} \quad (2.515)$$

eingeführt. Ist φ das skalare Potential des elektromagnetischen Feldes, so lautet der gesuchte Hamilton-Operator

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} \left(\hat{\mathbf{p}} - \frac{q}{c} \hat{\mathbf{A}} \right)^2 + q\varphi - \hat{\boldsymbol{\mu}} \cdot \mathbf{B}. \quad (2.516)$$

Für das magnetische Moment gilt

$$\boldsymbol{\mu} = g \frac{q}{2mc} \mathbf{s} \quad (2.517)$$

mit einem klassisch nicht herleitbaren Faktor g , den man *Landé-Faktor* nennt. Für den Pauli-Hamilton-Operator folgt

$$\hat{H}_P = \frac{\mathbf{i}}{2m} \left(\hat{\mathbf{p}} - \frac{q}{c} \hat{\mathbf{A}} \right)^2 + q\varphi - g \frac{q\hbar}{4mc} \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{B}. \quad (2.518)$$

Die *Pauli-Gleichung* lautet damit

$$\hat{H}_P |\psi(\mathbf{r}, t)\rangle = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(\mathbf{r}, t)\rangle. \quad (2.519)$$

für einen Spinor $|\psi(\mathbf{r}, t)\rangle$, s. Glg. (2.509).

2.3.11 Störungstheorie

2.3.11.1 Zeitunabhängiger Fall

Sei ein Eigenwertproblem

$$\hat{H}_o |\psi^{(o)}\rangle = E^{(o)} |\psi^{(o)}\rangle \quad (2.520)$$

gegeben mit einem Hamiltonian \hat{H}_o , orthonormalen und vollständigen Eigenfunktionen $|\psi_n^{(o)}\rangle$ und zugehörigen Eigenwerten $E_n^{(o)}$. Nun ersetzt man den Hamiltonian \hat{H}_o durch einen neuen Hamiltonian \hat{H} , der gegeben ist durch

$$\hat{H} := \hat{H}_o + \hat{V} \quad (2.521)$$

mit einem Störpotential \hat{V} . Man möchte Lösungen $|\psi\rangle$ der Eigenwertgleichung

$$\hat{H} |\psi\rangle = E |\psi\rangle \quad (2.522)$$

finden. Hierzu setzt man zunächst

$$\hat{H}(\lambda) := \hat{H}_o + \lambda \hat{V} \quad (2.523)$$

mit $\lambda \in [0, 1]$ an. Nun entwickelt man die Eigenzustände $|\psi\rangle$ und Eigenwerte E nach Potenzen von λ :

$$E(\lambda) = \sum_{i=0}^{\infty} \lambda^{(i)} E^{(i)} \quad (2.524)$$

$$|\psi(\lambda)\rangle = \sum_{i=0}^{\infty} \lambda^{(i)} |\psi^{(i)}\rangle \quad (2.525)$$

Dies setzt man in Glg. (2.522) ein:

$$\hat{H}(\lambda) |\psi(\lambda)\rangle = E(\lambda) |\psi(\lambda)\rangle \quad (2.526)$$

$$\Rightarrow (\hat{H}_o + \lambda \hat{V}) \sum_{i=0}^{\infty} \lambda^{(i)} |\psi^{(i)}\rangle = \left(\sum_{i=0}^{\infty} \lambda^{(i)} E^{(i)} \right) \left(\sum_{i=0}^{\infty} \lambda^{(i)} |\psi^{(i)}\rangle \right) \quad (2.527)$$

Man sortiert Glg. (2.527) nun nach Potenzen von λ , für die m -te Ordnung gilt dann

$$\hat{H}_o |\psi^{(m)}\rangle + \hat{V} |\psi^{(m-1)}\rangle = \sum_{k=0}^m E^{(m-k)} |\psi^{(k)}\rangle. \quad (2.528)$$

Es existieren $C_{n,k}^{(1)} \in \mathbb{C}$ mit

$$|\psi_n^{(1)}\rangle = \sum_{k=1}^{\infty} C_{n,k}^{(1)} |\psi_k^{(0)}\rangle. \quad (2.529)$$

Wendet man hierauf den ungestörten Hamilton-Operator \hat{H}_o an, erhält man

$$\hat{H}_o \left| \psi_n^{(1)} \right\rangle = \sum_{k=1}^{\infty} C_{n,k}^{(1)} E_k^{(o)} \left| \psi_k^{(o)} \right\rangle. \quad (2.530)$$

Setzt man in Glg. (2.528) $m = 1$ sowie $|\psi\rangle = |\psi_n\rangle$ ein und multipliziert dies von links mit $\langle \psi_n^{(o)} |$, erhält man

$$\langle \psi_n^{(o)} | \hat{H}_o | \psi_n^{(1)} \rangle + \langle \psi_n^{(o)} | \hat{V} | \psi_n^{(o)} \rangle = E_n^{(1)} + \langle \psi_n^{(o)} | E_n^{(o)} | \psi_n^{(1)} \rangle. \quad (2.531)$$

Außerdem gilt

$$\langle \psi_n^{(o)} | \hat{H}_o | \psi_n^{(1)} \rangle = C_{n,n}^{(1)} E_n^{(o)} = \langle \psi_n^{(o)} | E_n^{(o)} | \psi_n^{(1)} \rangle. \quad (2.532)$$

Für die Energiekorrektur in erster Ordnung gilt somit

$$E_n^{(1)} = \langle \psi_n^{(o)} | \hat{V} | \psi_n^{(o)} \rangle. \quad (2.533)$$

Nun werden die $\left| \psi_n^{(1)} \right\rangle$ gesucht, also die $C_{n,k}^{(1)}$, $k \in \mathbb{N}$ mit $k \neq n$. Multipliziere Glg. (2.528) mit $m = 2$ von links mit $\langle \psi_k^{(o)} |$. Es entsteht

$$\begin{aligned} \langle \psi_k^{(o)} | \hat{H}_o | \psi_n^{(1)} \rangle + \langle \psi_k^{(o)} | \hat{V} | \psi_n^{(o)} \rangle &= \langle \psi_k^{(o)} | E_n^{(o)} | \psi_n^{(1)} \rangle \\ \Leftrightarrow C_{n,k}^{(1)} E_k^{(o)} + \langle \psi_k^{(o)} | \hat{V} | \psi_n^{(o)} \rangle &= E_n^{(o)} C_{n,k}^{(1)} \\ \Leftrightarrow C_{n,k}^{(1)} &= \frac{\langle \psi_k^{(o)} | \hat{V} | \psi_n^{(o)} \rangle}{E_n^{(o)} - E_k^{(o)}}. \end{aligned} \quad (2.534)$$

Dies funktioniert nur im Falle nicht entarteter Energieniveaus $E_n^{(o)}, E_k^{(o)}$. Für den Zustand $|\psi_n(\lambda)\rangle$ erhält man nun

$$|\psi_n(\lambda)\rangle = |\psi_n^{(o)}\rangle + \lambda \sum_{\substack{m=1, \\ m \neq n}}^{\infty} \frac{\langle \psi_m^{(o)} | \hat{V} | \psi_n^{(o)} \rangle}{E_n^{(o)} - E_m^{(o)}} |\psi_m^{(o)}\rangle + C_{n,n}^{(1)} |\psi_n^{(o)}\rangle + \mathcal{O}(\lambda^2). \quad (2.535)$$

Die Norm hiervon ist

$$\langle \psi_n(\lambda) | \psi_n(\lambda) \rangle = 1 + C_{n,n}^{(1)*} + C_{n,n}^{(1)} + \mathcal{O}(\lambda^2) \quad (2.536)$$

Also ist $C_{n,n}^{(1)} = ir$ mit $r \in \mathbb{R}$. Daher ist die Amplitude von $|\psi_n^{(o)}\rangle$ in $|\psi_n(\lambda)\rangle$ gegeben durch

$$1 + i\lambda r = \exp(i\lambda r) + \mathcal{O}(\lambda^2). \quad (2.537)$$

Der Koeffizient $C_{n,n}^{(1)}$ führt also in erster Ordnung zu einer Phasenverschiebung von $|\psi_n^{(o)}\rangle$, diese Phasenverschiebung kann man in $|\psi_n^{(o)}\rangle$ absorbieren und

$$C_{n,n}^{(1)} = 0 \quad (2.538)$$

setzen. Man erhält also in erster Ordnung im Falle nicht entarteter Energieniveaus

$$E_n = E_n^{(o)} + E_n^{(1)} = E_n^{(o)} + \langle \psi_n^{(o)} | \hat{V} | \psi_n^{(o)} \rangle, \quad (2.539)$$

$$|\psi_n\rangle = |\psi_n^{(o)}\rangle + |\psi_n^{(1)}\rangle = |\psi_n^{(o)}\rangle + \sum_{\substack{m=1, \\ m \neq n}}^{\infty} \frac{\langle \psi_m^{(o)} | \hat{V} | \psi_n^{(o)} \rangle}{E_n^{(o)} - E_m^{(o)}} |\psi_m^{(o)}\rangle. \quad (2.540)$$

Eine notwendige Bedingung für eine sinnvolle Anwendbarkeit der Störungstheorie in erster Ordnung ist, dass die Beimischungen der Zustände klein sind.

Man erkennt bereits den Vorteil der Störungstheorie: Während stationäre Probleme der Quantenmechanik Eigenwertprobleme sind, bei denen man Eigenwert und Eigenvektor simultan bestimmen muss, kann man in der Störungstheorie die Energiekorrekturen und die Zustandskorrekturen sukzessive hintereinander ausrechnen.

Um die zweite Ordnung auszurechnen, setzt man in Glg. (2.528) mit $m = 2$ zunächst $|\psi\rangle = |\psi_n\rangle$ ein und multipliziert dies von links mit $\langle\psi_n^{(2)}|$:

$$\left\langle\psi_n^{(0)}\left|\hat{H}_o\right|\psi_n^{(2)}\right\rangle + \left\langle\psi_n^{(0)}\left|\hat{V}\right|\psi_n^{(1)}\right\rangle = E_n^{(2)} + \left\langle\psi_n^{(0)}\left|E_n^{(1)}\right|\psi_n^{(1)}\right\rangle + \left\langle\psi_n^{(0)}\left|E_n^{(0)}\right|\psi_n^{(2)}\right\rangle \quad (2.541)$$

Für die $|\psi_n^{(2)}\rangle$ macht man nun den Ansatz

$$\left|\psi_n^{(2)}\right\rangle = \sum_{m=1}^{\infty} C_{n,m}^{(2)} \left|\psi_m^{(0)}\right\rangle. \quad (2.542)$$

Damit folgt

$$\left\langle\psi_n^{(0)}\left|\hat{H}_o\sum_{m=1}^{\infty} C_{n,m}^{(2)} \left|\psi_m^{(0)}\right\rangle\right\rangle = \left\langle\psi_n^{(0)}\left|\sum_{m=1}^{\infty} C_{n,m}^{(2)} E_m^{(0)} \left|\psi_m^{(0)}\right\rangle\right\rangle = C_{n,n}^{(2)} E_n^{(0)}. \quad (2.543)$$

Weiterhin gilt

$$\left\langle\psi_n^{(0)}\left|E_n^{(1)}\right|\psi_n^{(1)}\right\rangle = \left\langle\psi_n^{(0)}\left|E_n^{(1)}\right|\sum_{m=1}^{\infty} C_{n,m}^{(1)} \left|\psi_m^{(0)}\right\rangle\right\rangle = E_n^{(1)} C_{n,n}^{(1)} = 0. \quad (2.544)$$

Somit folgt

$$\begin{aligned} E_n^{(2)} &= \left\langle\psi_n^{(0)}\left|\hat{V}\right|\psi_n^{(1)}\right\rangle = \left\langle\psi_n^{(0)}\left|\hat{V}\right|\sum_{m=1}^{\infty} C_{n,m}^{(1)} \left|\psi_m^{(0)}\right\rangle\right\rangle = \sum_{m=1}^{\infty} C_{n,m}^{(1)} \left\langle\psi_n^{(0)}\left|\hat{V}\right|\psi_m^{(0)}\right\rangle \\ &= \sum_{\substack{m=1, \\ m \neq n}}^{\infty} \frac{\left\langle\psi_m^{(0)}\left|\hat{V}\right|\psi_n^{(0)}\right\rangle \left\langle\psi_n^{(0)}\left|\hat{V}\right|\psi_m^{(0)}\right\rangle}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} = \sum_{\substack{m=1, \\ m \neq n}}^{\infty} \frac{\left|\left\langle\psi_n^{(0)}\left|\hat{V}\right|\psi_m^{(0)}\right\rangle\right|^2}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}}. \end{aligned} \quad (2.545)$$

Die Koeffizienten $C_{m,n}^{(2)}$ werden hier nicht mehr berechnet, da man meist nur bis zur ersten Ordnung im Zustand und bis zur zweiten Ordnung in der Energie geht. Sukzessive kann man so weitere Ordnungen berechnen.

Nun wird der Fall entarteter Energien entarteter Zustände betrachtet. Seien also $N \in \mathbb{N}$ mit $N \geq 2$ und die ersten N ungestörten Zustände $|\psi_1^{(0)}\rangle, \dots, |\psi_N^{(0)}\rangle$ seien entartet, also

$$\hat{H}_o \left|\psi_m^{(0)}\right\rangle = E_o \left|\psi_m^{(0)}\right\rangle \quad (2.546)$$

für $1 \leq m \leq N$. Formel (2.540) ist nicht anwendbar. Man erkennt jedoch, dass bei kleinen Energiedifferenzen $E_n^{(0)} - E_m^{(0)}$ die Beimischung der Zustände sehr stark ist. Man muss also schon bei sehr schwacher Störung $\lambda \rightarrow 0$ von der Beimischung entarteter Zustände ausgehen, also macht man den Ansatz

$$|\psi(\lambda)\rangle = \sum_{l=1}^N C_l \left|\psi_l^{(0)}\right\rangle + \lambda \sum_{m=N+1}^{\infty} C_m^{(1)} \left|\psi_m^{(0)}\right\rangle + \mathcal{O}(\lambda^2), \quad (2.547)$$

$$E(\lambda) = E_o + \lambda E^{(1)} + \mathcal{O}(\lambda^2). \quad (2.548)$$

Dies setzt man in die Schrödinger-Gleichung Glg. (2.526) ein:

$$\begin{aligned} & \sum_{l=1}^N C_l \hat{H}_o |\psi_l^{(o)}\rangle + \sum_{l=1}^N C_l \lambda \hat{V} |\psi_l^{(o)}\rangle + \lambda \sum_{m=N+1}^{\infty} C_m^{(1)} \hat{H}_o |\psi_m^{(o)}\rangle + \mathcal{O}(\lambda^2) \\ = & E_o \sum_{l=1}^N C_l |\psi_l^{(o)}\rangle + \lambda E^{(1)} \sum_{l=1}^N C_l |\psi_l^{(o)}\rangle + \lambda E_o \sum_{m=N+1}^{\infty} C_m^{(1)} |\psi_m^{(o)}\rangle + \mathcal{O}(\lambda^2) \end{aligned} \quad (2.549)$$

In nullter Ordnung ist dies erfüllt. Im Folgenden wird nur die erste Ordnung betrachtet. Die $|\psi_l^{(o)}\rangle$, $1 \leq l \leq N$, seien orthonormalisiert. Sei $j \in \mathbb{N}$ mit $1 \leq j \leq N$ gegeben. Durch Multiplikation der Terme erster Ordnung in Glg. (2.549) von links mit $\langle \psi_j^{(o)} |$ erhält man

$$\sum_{l=1}^N C_l \langle \psi_j^{(o)} | \hat{V} | \psi_l^{(o)} \rangle = E^{(1)} C_j. \quad (2.550)$$

Die Lösung $(C_1, \dots, C_N, E^{(1)})$ ergibt die Korrektur nullter Ordnung im Zustand und erster Ordnung in der Energie. Die Gleichung gilt für alle $1 \leq l \leq N$, also kann man dies auch als Matrix schreiben

$$\overleftrightarrow{V} \mathbf{C} = E^{(1)} \mathbf{C} \quad (2.551)$$

mit den Matrixelementen

$$V_{j,l} := \langle \psi_j^{(o)} | \hat{V} | \psi_l^{(o)} \rangle \quad (2.552)$$

und dem Vektor $\mathbf{C} := (C_1, \dots, C_N)^T$. Da \hat{V} hermitesch ist, ist auch die Matrix \overleftrightarrow{V} hermitesch. Als Lösung erhält man daher N orthonormale Eigenvektoren \mathbf{C}^k zu den Eigenwerten $E_k^{(1)}$. Die zugehörigen N Zustände sind

$$|\psi_k\rangle = \sum_{l=1}^N C_l^{(k)} |\psi_l^{(o)}\rangle \quad (2.553)$$

mit der jeweiligen Energie

$$E_k = E_o + E_k^{(1)}. \quad (2.554)$$

Diese Zustände sind orthonormal. Seien nämlich $k, m \in \mathbb{N}$ mit $1 \leq k, m \leq N$ gegeben. Dann gilt

$$\langle \psi_k | \psi_m \rangle = \sum_{l=1}^{\infty} C_l^{(k)*} C_l^{(m)} = \langle \mathbf{C}^{(k)} | \mathbf{C}^{(m)} \rangle = \delta_{m,n}. \quad (2.555)$$

2.3.11.2 Spin-Bahn-Kopplung im H-Atom

Die *Spin-Bahn-Kopplung* beschreibt den Effekt der Wechselwirkung des magnetischen Moments des Elektrons mit dem Magnetfeld des Kerns; es handelt sich um einen relativistischen Effekt, da die Kernbewegung durch eine Koordinatentransformation in das Ruhesystem des Elektrons entsteht. Dieser Effekt wird hier im H-Atom in erster Ordnung Störungstheorie behandelt.

Zunächst sei an dieser Stelle an die Definition des Bohr'schen Radius a_B nach Glg. (2.404) erinnert:

$$a_B = \frac{\hbar^2}{m_e e^2} \quad (2.556)$$

Für die Energie-Eigenwerte im H-Atom gilt mit Glg. (2.430)

$$E_n = -\frac{Z^2}{2n^2} E_{\text{at}} \quad (2.557)$$

Für E_{at} kann man nun weiter rechnen

$$E_{\text{at}} = \frac{\hbar^2}{m_e a_B^2} = \frac{1}{a_B} \frac{\hbar^2}{m_e a_B} = \frac{1}{a_B} \frac{\hbar^2}{m_e} \frac{m_e e^2}{\hbar^2} = \frac{e^2}{a_B}. \quad (2.558)$$

Für ein $(Z - 1)$ -fach ionisiertes Atom ist die atomare Energieskala

$$\varepsilon_{\text{at}} = Z^2 E_{\text{at}} = Z^2 \frac{e^2}{a_B} = Z^2 e^2 \frac{m_e e^2}{\hbar^2} = Z^2 e^4 \frac{m_e}{\hbar^2} \frac{c^2}{c^2} = m_e c^2 \left(\frac{Ze^2}{\hbar c} \right)^2 = m_e c^2 (Za)^2. \quad (2.559)$$

a ist hierbei die *Feinstrukturkonstante*, für diese gilt

$$a := \frac{e^2}{\hbar c} \stackrel{\text{SI}}{=} \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 \hbar c} \approx \frac{1}{137}. \quad (2.560)$$

Die Spin-Bahn-Kopplung entsteht nicht durch einen eventuellen magnetischen Kerndipol. Das Elektron bewege sich in einer halbklassischen Betrachtung mit einer momentanen Geschwindigkeit \mathbf{v} um den Kern. Im momentanen Ruhesystem des Elektrons existiert nach Glg. (2.190) ein magnetisches Feld

$$\mathbf{B}' = -\gamma \frac{\mathbf{v}}{c} \times \mathbf{E}, \quad (2.561)$$

welches das Elektron zu spüren bekommt. Die Funktion

$$\mathbf{u}(\mathbf{v}') := \frac{\mathbf{v}'}{\sqrt{1 - v'^2}} \quad (2.562)$$

mit

$$\mathbf{v}' := \frac{\mathbf{v}}{c} \quad (2.563)$$

beschreibt die Stärke des relativistischen Effektes. Die lineare Taylor-Entwicklung dieser Funktion lautet

$$\mathbf{u} = \mathbf{v}' + \mathcal{O}(v'^2), \quad (2.564)$$

sodass man für das relativistische B-Feld hier nähert

$$\mathbf{B}' = -\frac{\mathbf{v}}{c} \times \mathbf{E} + \mathcal{O}\left(\left(\frac{\mathbf{v}}{c}\right)^2\right). \quad (2.565)$$

Die Terme höherer Ordnung werden nicht mehr mitnotiert. Mit $g \approx 2$ gilt für das magnetische Moment des Elektrons mit Glg. (2.517)

$$\boldsymbol{\mu} = -\frac{e}{m_e c} \mathbf{s}. \quad (2.566)$$

Somit erhält man eine Energie

$$-\boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{B}' = -\frac{e}{m_e c} \mathbf{s} \cdot \mathbf{B}' = -\frac{e}{m_e c^2} \mathbf{s} \cdot (\mathbf{v} \times \mathbf{E}). \quad (2.567)$$

Für das E - Feld gilt $\mathbf{E} = \frac{Ze^2}{r^3}$, mit der Definition $\mathbf{l} = \mathbf{r} \times \mathbf{p}$ erhält man die Spin-Bahn - Wechselwirkung

$$V = -\boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{B}' = -\frac{e}{m_e c^2} \mathbf{s} \cdot (\mathbf{v} \times \mathbf{E}) = \frac{Ze^2}{m_e^2 c^2} \frac{\mathbf{l} \cdot \mathbf{s}}{r^3}. \quad (2.568)$$

Eine relativistische quantenmechanische Betrachtung des beschleunigten Elektrons mittels der *Diracgleichung* ergibt an dieser Stelle einen zusätzlichen Faktor $1/2$. Der gesuchte Störoperator lautet also

$$\hat{V} = \frac{Ze^2}{2m_e^2 c^2} \frac{\hat{\mathbf{l}} \cdot \hat{\mathbf{s}}}{\hat{r}^3}. \quad (2.569)$$

Mit dem Gesamtdrehmoment-Operator

$$\hat{j} := \hat{l} + \hat{s} \quad (2.570)$$

kann man dies zu

$$\begin{aligned} \hat{V} &= \frac{Ze^2}{4m_e^2c^2} \frac{\hat{z}\hat{l} \cdot \hat{s}}{\hat{r}^3} = \frac{Ze^2}{4m_e^2c^2} \frac{\hat{z}\hat{l} \cdot \hat{s} + \hat{s}^2 - \hat{s}^2}{\hat{r}^3} = \frac{Ze^2}{4m_e^2c^2} \frac{(\hat{z}\hat{l} + \hat{s}) \cdot \hat{s} - \hat{s}^2}{\hat{r}^3} = \frac{Ze^2}{4m_e^2c^2} \frac{(\hat{j} + \hat{l}) \cdot (\hat{j} - \hat{l}) - \hat{s}^2}{\hat{r}^3} \\ &= \frac{Ze^2}{4m_e^2c^2} \frac{\hat{j}^2 - \hat{l}^2 - \hat{s}^2}{\hat{r}^3} \end{aligned} \quad (2.571)$$

umschreiben. Um hiermit weiterarbeiten zu können, koppelt man die Drehimpuls-Eigenzustände des H-Atoms zu

$$|n, l, m, s, s_z\rangle = |n, l\rangle |l, m, s, s_z\rangle = |n, l\rangle |j, l, s, m_j\rangle = |n, j, l, s, m_j\rangle. \quad (2.572)$$

Da die Drehimpuls-Eigenzustände orthogonal sind und \hat{V} nur auf die Radialkoordinaten wirkt, gilt für die Energiedifferenz

$$\langle n, j, l, s, m_j | \hat{V} | n, j', l', s, m'_j \rangle = \Delta E \delta_{j,j'} \delta_{l,l'} \delta_{m_j,m'_j} \quad (2.573)$$

mit

$$\Delta E = \frac{Ze^2 \hbar^2}{4m_e^2 c^2} \langle n, l | \frac{1}{\hat{r}^3} | n, l \rangle [j(j+1) - l(l+1) - s(s+1)]. \quad (2.574)$$

Es gilt für $l \neq 0$

$$\begin{aligned} \left\langle \frac{1}{\hat{r}^3} \right\rangle &= \int_{\mathbb{R}^3} \frac{1}{r^3} |\psi|^2 d^3 r = \int_{r=0}^{\infty} \int_0^{2\pi} \int_0^{\pi} \frac{1}{r^3} |\psi|^2 r^2 \sin(\vartheta) d\vartheta d\varphi dr \\ &= \int_{r=0}^{\infty} \int_{\varphi=0}^{2\pi} \int_{\vartheta=0}^{\pi} \frac{1}{r} R_{n,l}(r)^2 |Y_{l,m}(\vartheta, \varphi)|^2 \sin(\vartheta) d\vartheta d\varphi dr \\ &= \int_0^{\infty} \frac{1}{r} R_{n,l}(r)^2 dr = \frac{4Z^3}{a_B^3 n^4} \frac{(n-l-1)!}{(n+l)!} \int_0^r \frac{1}{r} \left(\frac{2Zr}{na_B} \right)^{2l} \left[L_{n-l-1, 2l+1} \left(\frac{2Zr}{na_B} \right) \right]^2 \exp \left(-\frac{2Zr}{na_B} \right) dr \\ &= \frac{4Z^3}{a_B^3 n^4} \frac{(n-l-1)!}{(n+l)!} \int_0^{\infty} r^{2l-1} [L_{n-l-1, 2l+1}(r)]^2 \exp(-r) dr. \end{aligned}$$

Man identifiziert

$$m := n - l - 1 \geq 0 \Rightarrow n = m + l + 1, \quad (2.575)$$

$$k := 2l + 1 \geq 3. \quad (2.576)$$

Hieraus folgen die Transformationen

$$n := m + 1 + \frac{1}{2}(k-1) = m + \frac{1}{2}(k+1), \quad (2.577)$$

$$l := \frac{1}{2}(k-1). \quad (2.578)$$

Mit Glg. (A.426) folgt

$$\begin{aligned} &\int_0^{\infty} r^{2l-1} [L_{n-l-1, 2l+1}(r)]^2 \exp(-r) dr = \int_0^{\infty} r^{k-2} [L_{m,k}(r)]^2 \exp(-r) dr \\ &= \frac{(m+k)!}{m!} \frac{2m+1+k}{(k-1)k(k+1)} = \frac{(m+k)!}{m!} \frac{2n}{(k-1)k(k+1)} = \frac{(n+l)!}{(n-l-1)!} \frac{n}{2l(2l+1)(l+1)} \\ &= \frac{(n+l)!}{(n-l-1)!} \frac{n}{4l(l+\frac{1}{2})(l+1)}. \end{aligned} \quad (2.579)$$

Somit gilt

$$\left\langle \frac{1}{r^3} \right\rangle = \frac{Z^3}{a_B^3 n^3 l (l + \frac{1}{2}) (l + 1)} = \frac{Z^3 m_e^3 e^6}{\hbar^6 n^3 l (l + \frac{1}{2}) (l + 1)}. \quad (2.580)$$

Für $l = 0$ ist

$$\left\langle \frac{1}{r^3} \right\rangle \notin \mathbb{R}, \quad (2.581)$$

allerdings ist in diesem Fall die Spin-Bahn-Kopplung wegen $j = l = \frac{1}{2}$ sowieso Null. Somit erhält man mit

$$\frac{Ze^2 \hbar^2}{4m_e^2 c^2} \frac{Z^3 m_e^3 e^6}{\hbar^6 n^3} = \frac{m_e Z^4 e^8}{4 \hbar^4 n^3 c^2} = \frac{m_e c^2}{4n^3} \frac{Z^4 e^8}{\hbar^4 c^4} \quad (2.582)$$

als Zusammenfassung

$$\Delta E = \begin{cases} 0, & l = 0, \\ \frac{m_e c^2 (Za)^4}{4n^3} \frac{j(j+1) - l(l+1) - s(s+1)}{l(l+\frac{1}{2})(l+1)}, & l \neq 0. \end{cases} \quad (2.583)$$

Relativistische Effekte haben also einen Einfluss auf die Eigenenergien im H-Atom und somit auch auf das Spektrum. Somit hat die Spezielle Relativitätstheorie über die Molekülspektren meteorologische Relevanz.

2.3.11.3 Zeitabhängiger Fall

Bisher wurden nur zeitlich konstante Störungen \hat{V} betrachtet, nun wird eine Zeitabhängigkeit $\hat{V}(t)$ zugelassen. Die zeitabhängige Schrödinger-Gleichung wird somit zu

$$\hat{H}(t) |\psi(t)\rangle = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle \quad (2.584)$$

mit dem zeitabhängigen Hamilton-Operator

$$\hat{H}(t) = \hat{H}_0 + \hat{V}(t). \quad (2.585)$$

Die Lösungen $(|\psi_n^{(0)}\rangle, E_n)$ des stationären Problems

$$\hat{H}_0 |\psi_n^{(0)}\rangle = E_n |\psi_n^{(0)}\rangle \quad (2.586)$$

seien wieder bekannt. Die $|\psi_n^{(0)}\rangle$ können mit einem zeitabhängigen Anteil versehen werden, man kann mit einem Bezeichnungsmissbrauch schreiben

$$|\psi_n^{(0)}\rangle = |\psi_n^{(0)}\rangle \exp\left(-i\frac{E_n}{\hbar}t\right). \quad (2.587)$$

Weiter als bis zur ersten Ordnung wird in diesem Abschnitt nicht gegangen. Man setzt nun mit $\lambda \in [0, 1]$

$$\hat{H}(\lambda, t) = \hat{H}_0 + \lambda \hat{V}(t), \quad (2.588)$$

$$|\psi(\lambda, t)\rangle = \sum_{m=1}^{\infty} C_m^{(0)} |\psi_m^{(0)}\rangle \exp\left(-i\frac{E_m}{\hbar}t\right) + \lambda \sum_{m=1}^{\infty} C_m^{(1)}(t) |\psi_m^{(0)}\rangle \exp\left(-i\frac{E_m}{\hbar}t\right) + \mathcal{O}(\lambda^2). \quad (2.589)$$

Damit erhält man

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(\lambda, t)\rangle &= \sum_{m=1}^{\infty} E_m C_m^{(0)} |\psi_m^{(0)}\rangle \exp\left(-i\frac{E_m}{\hbar}t\right) \\ &\quad + \lambda \sum_{m=1}^{\infty} \left(i\hbar \frac{\partial C_m^{(1)}}{\partial t} + C_m^{(1)} E_m \right) |\psi_m^{(0)}\rangle \exp\left(-i\frac{E_m}{\hbar}t\right) + \mathcal{O}(\lambda^2). \end{aligned} \quad (2.590)$$

Setzt man dies in Glg. (2.584) ein, erhält man

$$\begin{aligned} & \hat{H}_o \sum_{m=1}^{\infty} C_m^{(o)} \left| \psi_m^{(o)} \right\rangle \exp \left(-i \frac{E_m}{\hbar} t \right) + \lambda \hat{H}_o \sum_{m=1}^{\infty} C_m^{(1)}(t) \left| \psi_m^{(o)} \right\rangle \exp \left(-i \frac{E_m}{\hbar} t \right) \\ & + \lambda \hat{V}(t) \sum_{m=1}^{\infty} C_m^{(o)} \left| \psi_m^{(o)} \right\rangle \exp \left(-i \frac{E_m}{\hbar} t \right) + \mathcal{O}(\lambda^2) = \sum_{m=1}^{\infty} C_m^{(o)} E_m \left| \psi_m^{(o)} \right\rangle \exp \left(-i \frac{E_m}{\hbar} t \right) \\ & + \lambda \sum_{m=1}^{\infty} \left(i\hbar \frac{\partial C_m^{(1)}}{\partial t} + C_m^{(1)} E_m \right) \left| \psi_m^{(o)} \right\rangle \exp \left(-i \frac{E_m}{\hbar} t \right) + \mathcal{O}(\lambda^2). \end{aligned} \quad (2.591)$$

Die nullte Ordnung ist trivial erfüllt. Sei nun $k \in \mathbb{N}$ mit $k \geq 1$ gegeben und multipliziere die Terme der ersten Ordnung von links mit $\langle \psi_k^{(o)} |$. Man erhält

$$\begin{aligned} & C_k^{(1)}(t) E_k \exp \left(-i \frac{E_k}{\hbar} t \right) + \sum_{m=1}^{\infty} C_m^{(o)} \langle \psi_k^{(o)} | \hat{V}(t) | \psi_m^{(o)} \rangle \exp \left(-i \frac{E_m}{\hbar} t \right) = \left(i\hbar \frac{\partial C_k^{(1)}}{\partial t} + C_k^{(1)} E_k \right) \exp \left(-i \frac{E_k}{\hbar} t \right) \\ \Leftrightarrow & \frac{\partial C_k^{(1)}}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar} \sum_{m=1}^{\infty} C_m^{(o)} \langle \psi_k^{(o)} | \hat{V}(t) | \psi_m^{(o)} \rangle \exp \left(i \frac{E_k - E_m}{\hbar} t \right). \end{aligned} \quad (2.592)$$

Also erhält man für die Beimischung der Zustände

$$C_k^{(1)}(t') = C_k^{(1)}(t_o) - \frac{i}{\hbar} \int_{t_o}^{t'} \sum_{m=1}^{\infty} C_m^{(o)} \langle \psi_k^{(o)} | \hat{V}(t) | \psi_m^{(o)} \rangle \exp \left(i \frac{E_k - E_m}{\hbar} t \right) dt. \quad (2.593)$$

Ist das System zum Zeitpunkt t_o im Zustand n , so ergeben sich

$$\begin{aligned} C_n^{(o)} &= 1, \\ C_{m \neq n}^{(o)} &= 0 \end{aligned} \quad (2.594)$$

und somit

$$C_k^{(1)}(t') = -\frac{i}{\hbar} \int_{t_o}^{t'} \langle \psi_k^{(o)} | \hat{V}(t) | \psi_n^{(o)} \rangle \exp \left(i \frac{E_k - E_n}{\hbar} t \right) dt. \quad (2.595)$$

Hieraus lässt sich die zeitabhängige Lösung

$$|\psi(t)\rangle \approx \left| \psi_n^{(o)} \right\rangle \exp \left(-i \frac{E_n}{\hbar} t \right) + \sum_{k=1}^{\infty} C_k^{(1)}(t) \left| \psi_k^{(o)} \right\rangle \exp \left(-i \frac{E_k}{\hbar} t \right) \quad (2.596)$$

konstruieren. Die Wahrscheinlichkeit, den Zustand $\left| \psi_m^{(o)} \right\rangle$ anzutreffen, ist gegeben durch

$$p_m(t) = \left| \delta_{mn} + C_m^{(1)}(t) \right|^2 \quad (2.597)$$

Um die durch elektromagnetische Wellen induzierte Absorption und Emission zu verstehen, benötigt man Kenntnisse über die Wirkung eines periodischen Störoperators

$$\hat{V}(t) = \hat{V}_o \exp(-i\omega t) + \hat{V}_o^* \exp(i\omega t), \quad (2.598)$$

die Addition des adjungierten Terms garantiert Hermitezität und somit reelle Messgrößen. Setzt man dies in Glg. (2.595) ein, folgt

$$\begin{aligned} i\hbar C_k^{(1)}(t) &= \left\langle \psi_k^{(o)} \left| \hat{V}_o \right| \psi_n^{(o)} \right\rangle \int_o^{\text{exp}} (i(\omega_{k,n} - \omega) t') dt' \\ &+ \left\langle \psi_k^{(o)} \left| \hat{V}_o^* \right| \psi_n^{(o)} \right\rangle \int_o^{\text{exp}} (i(\omega_{k,n} + \omega) t') dt'. \end{aligned} \quad (2.599)$$

dabei wurden $t_0 = 0$ gesetzt und

$$\omega_{k,n} := \omega_k - \omega_n \quad (2.600)$$

definiert. Definiere weiter

$$\Omega_{\pm} := \omega_{k,n} \pm \omega, \quad (2.601)$$

dann ist

$$\begin{aligned} \int_0^{\exp} (i\Omega_{\pm} t') dt' &= \frac{\exp(i\Omega_{\pm} t) - 1}{i\Omega_{\pm}} \\ \Rightarrow \left| \int_0^{\exp} (i\Omega_{\pm} t') dt' \right|^2 &= \left| \frac{\exp(i\Omega_{\pm} t) - 1}{i\Omega_{\pm}} \right|^2 = \frac{1}{\Omega_{\pm}^2} [(\cos(\Omega_{\pm} t) - 1)^2 + \sin^2(\Omega_{\pm} t)] \\ &= \frac{1}{\Omega_{\pm}^2} [\cos^2(\Omega_{\pm} t) + 1 - 2\cos(\Omega_{\pm} t) + \sin^2(\Omega_{\pm} t)] = \frac{2}{\Omega_{\pm}^2} [1 - \cos(\Omega_{\pm} t)] \\ &= \frac{2}{\Omega_{\pm}^2} \left[1 - \cos^2\left(\frac{\Omega_{\pm} t}{2}\right) + \sin^2\left(\frac{\Omega_{\pm} t}{2}\right) \right] = \frac{4\sin^2\left(\frac{\Omega_{\pm} t}{2}\right)}{\Omega_{\pm}^2}. \end{aligned} \quad (2.602)$$

Dies liefert nur einen wesentlichen Beitrag, wenn Ω_{\pm} klein ist, wegen $\Omega_+ = \Omega_- + 2\omega$ trägt daher im Regelfall nur eines der beiden Integrale in Glg. (2.599) zum Ergebnis bei. Mit $\hat{V}_- := \hat{V}_0$ und $\hat{V}_+ := \hat{V}_0^*$ erhält man

$$R_{n \rightarrow k} = \frac{\left| C_k^{(1)}(t) \right|^2}{\hbar^2} \frac{\left| \langle \psi_k^{(0)} | \hat{V}_{\pm} | \psi_n^{(0)} \rangle \right|^2}{\Omega_{\pm}^2 t} \frac{4\sin^2\left(\frac{\Omega_{\pm} t}{2}\right)}{\Omega_{\pm}^2 t}. \quad (2.603)$$

hierbei ist $R_{n \rightarrow k}$ die Wahrscheinlichkeit dafür, dass das System im Zeitintervall $[0, t]$ vom Zustand n in den Zustand k wechselt, geteilt durch die dafür zur Verfügung stehende Zeit. Definiere

$$f(\Omega) := \frac{4\sin^2\left(\frac{\Omega t}{2}\right)}{\Omega^2 t}, \quad (2.604)$$

dann gilt mit Glg. (A.97)

$$\lim_{t \rightarrow \infty} f(\Omega) = 2\pi\delta(\Omega). \quad (2.605)$$

Dies darf man im Fall $t \gg 1/\Omega$ verwenden, es folgt

$$R_{n \rightarrow k} = \frac{2\pi}{\hbar} \left| \langle \psi_k^{(0)} | \hat{V}_{\pm} | \psi_n^{(0)} \rangle \right|^2 \delta(E_k - E_n \pm \hbar\omega). \quad (2.606)$$

Für $E_k > E_n$ ist das Minuszeichen zu verwenden. Im Falle einer zeitunabhängigen Störung $\omega = 0$ folgt

$$R_{n \rightarrow k} = \frac{2\pi}{\hbar} \left| \langle \psi_k^{(0)} | \hat{V}_{\pm} | \psi_n^{(0)} \rangle \right|^2 \delta(E_k - E_n). \quad (2.607)$$

2.3.11.4 Übergänge im H-Atom

Nehme ein Vektorpotential der Form

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}, t) = A_0 e \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t) \quad (2.608)$$

an mit $\omega = ck$ und $e \cdot \mathbf{k} = 0$, hierbei ist e der normierte Polarisationsvektor. Dann folgt

$$\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A} \stackrel{\text{Glg. (A.225)}}{=} -A_0 e \times \mathbf{k} \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t) = A_0 \mathbf{k} \times e \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t). \quad (2.609)$$

Hierdurch wird also eine elektromagnetische Welle beschrieben. Für den Hamilton-Operator folgt

$$\hat{H} = \frac{1}{2m_e} \left(-i\hbar \nabla + \frac{e}{c} \mathbf{A} \right)^2 - \frac{e^2}{r} \stackrel{\text{Glg. (A.226)}}{=} \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m_e} - \frac{e^2}{r} + \frac{e}{m_e c} \hat{\mathbf{A}} \cdot \hat{\mathbf{p}} = \hat{H}_0 + \hat{V}(t) \quad (2.610)$$

mit dem Störoperator

$$\hat{V}(t) = \frac{e}{m_e c} \hat{\mathbf{A}} \cdot \hat{\mathbf{p}}. \quad (2.611)$$

Die im Vektorprodukt quadratischen Terme wurden vernachlässigt. Mit

$$\cos = \frac{\exp(+)}{2} + \frac{\exp(-)}{2} \quad (2.612)$$

kann man schreiben

$$\hat{V}(t) = \hat{V}_o \exp(-i\omega t) + \hat{V}_o^+ \exp(i\omega t), \quad (2.613)$$

hierbei wurde

$$\hat{V}_o = \frac{eA_o}{2m_e c} \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}) \mathbf{e} \cdot \hat{\mathbf{p}} \quad (2.614)$$

eingesetzt. Mit der *Langwellennäherung*

$$\exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}) = 1 + i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} + \dots = 1 + \mathcal{O}(\langle r \rangle / \lambda) \approx 1 \quad (2.615)$$

erhält man

$$\hat{V}_o \approx \frac{eA_o}{2m_e c} \mathbf{e} \cdot \hat{\mathbf{p}}. \quad (2.616)$$

Dies ist hier gerechtfertigt, da man mit $\langle r \rangle \sim a_B$ rechnen kann

$$\frac{\langle r \rangle}{\lambda} \sim \frac{a_B}{\lambda} = \frac{a_B \omega}{2\pi c} = \frac{a_B \Delta E}{2\pi \hbar c} \sim \frac{a_B E_{at}}{20\pi \hbar c} = \frac{\hbar}{m_e a_B 20\pi c} = \frac{e^2}{20\hbar \pi c} \rightarrow \frac{e^2}{4\pi \varepsilon_0 20\hbar \pi c} \sim 10^{-4}. \quad (2.617)$$

Dabei wurde $\Delta E \sim \frac{E_{at}}{10}$ eingesetzt. Mit Glg. (2.607) erhält man

$$R_{a \rightarrow b} = \frac{\pi e^2 A_o^2}{2m_e^2 c^2 \hbar} |\langle b | \mathbf{e} \cdot \hat{\mathbf{p}} | a \rangle|^2 [\delta(E_b - E_a + \hbar\omega) + \delta(E_b - E_a - \hbar\omega)]. \quad (2.618)$$

Die Übergangsraten sind also proportional zu A_o^2 , was wiederum proportional zur Energiedichte des elektromagnetischen Feldes ist. Die Übergangsraten sind also proportional zum Betrag des Matrixelementes

$$M_{b,a} = \langle b | \mathbf{e} \cdot \hat{\mathbf{p}} | a \rangle. \quad (2.619)$$

Dies muss noch etwas umformuliert werden. Zunächst rechnet man

$$[\hat{H}_o, \hat{\mathbf{r}}] = \hat{H}_o \hat{\mathbf{r}} - \hat{\mathbf{r}} \hat{H}_o = -\frac{\hbar^2}{2m_e} \nabla \nabla \cdot \hat{\mathbf{r}} + \hat{\mathbf{r}} \frac{\hbar^2}{2m_e} \Delta. \quad (2.620)$$

Es gilt

$$\begin{aligned} \nabla \cdot (\mathbf{r} \psi) &= 3\psi + \mathbf{r} \cdot \nabla \psi \\ \Rightarrow \nabla^2 (\mathbf{r} \psi) &= 6\nabla \psi + \mathbf{r} \Delta \psi. \end{aligned} \quad (2.621)$$

Somit folgt

$$[\hat{H}_o, \hat{\mathbf{r}}] = -\frac{\hbar^2}{2m_e} 6\nabla \psi = \frac{3\hbar}{im_e} \hat{\mathbf{p}} \Rightarrow \hat{\mathbf{p}} = \frac{im_e}{3\hbar} [\hat{H}_o, \hat{\mathbf{r}}]. \quad (2.622)$$

Somit kann man schreiben

$$M_{b,a} = im_e \frac{E_b - E_a}{3\hbar} \langle b | \mathbf{e} \cdot \hat{\mathbf{r}} | a \rangle. \quad (2.623)$$

Die Eigenzustände im H-Atom sind aus Glg. (2.440) bekannt, es gilt also

$$M_{b,a} \propto \langle n, l, m | \boldsymbol{\epsilon} \cdot \hat{\mathbf{r}} | n, l, m \rangle. \quad (2.624)$$

Auf den Spin wird hier verzichtet. Der Radialanteil liefert keine Auswahlregeln für Δn , daher ist hier nur

$$M_{b,a} \propto \int Y_{l_b, m_b}^* \boldsymbol{\epsilon} \cdot \hat{\mathbf{r}} Y_{l_a, m_a} d\Omega. \quad (2.625)$$

relevant. Man schreibt

$$\boldsymbol{\epsilon} \cdot \hat{\mathbf{r}} = r (\varepsilon_x \sin(\theta) \cos(\varphi) + \varepsilon_y \sin(\theta) \sin(\varphi) + \varepsilon_z \cos(\theta)). \quad (2.626)$$

Aus den Glg.en (A.451) - (A.452) folgt

$$\cos(\theta) Y_{l,m} = a Y_{l-1,m} + \beta Y_{l+1,m}, \quad (2.627)$$

$$\sin(\theta) Y_{l,m} = \gamma e^{-i\varphi} Y_{l-1,m+1} + \delta e^{-i\varphi} Y_{l+1,m+1} \quad (2.628)$$

mit hier nicht relevanten Koeffizienten a, β, γ, δ . Somit hat man

$$\Delta l = l_b - l_a = \pm 1, \quad (2.629)$$

$$\Delta m = 0, \pm 1. \quad (2.630)$$

2.3.11.5 Relativistische Korrekturen im H-Atom

2.3.12 Mehrteilchensysteme

Sei $N \in \mathbb{N}$ mit $N \geq 1$ und seien N Teilchen mit Spin gegeben. Der Zustand eines solchen Systems wird durch eine Wellenfunktion

$$\psi = \psi(x_i) \quad (2.631)$$

beschrieben mit $1 \leq i \leq N$ und $x_i = (\mathbf{r}_i, \sigma_i)$, wobei \mathbf{r}_i den Ort des i -ten Teilchens und σ_i dessen Spin bezeichnet. Man kann sich eine solche Funktion im Falle von Spin-1/2-Teilchen also als 2^N Funktionen $\mathbb{R}^{3N} \rightarrow \mathbb{C}$ vorstellen.¹ Definiere nun für $i, j \in \mathbb{N}$ mit $1 \leq i, j \leq N$ den *Permutationsoperator* $\hat{P}_{i,j}$ durch

$$\hat{P}_{i,j} \psi(\dots, x_i, \dots, x_j, \dots) := \psi(\dots, x_j, \dots, x_i, \dots). \quad (2.632)$$

Dieser Operator vertauscht also die zu zwei Teilchen gehörenden Argumente. Handelt es sich um N gleichartige Teilchen, so ist der Hamiltonian \hat{H} invariant unter Permutation:

$$\hat{P}_{i,j} \hat{H} = \hat{H}. \quad (2.633)$$

Hieraus folgt

$$[\hat{P}_{i,j}, \hat{H}] = 0, \quad (2.634)$$

und das bedeutet die Existenz eines $\lambda \in \mathbb{C}$ mit

$$\hat{P}_{i,j} \psi(x_k) = \lambda \psi(x_k) \quad (2.635)$$

für Eigenfunktionen $\psi(x_k)$ des Hamilton-Operators, welches von i, j abhängen kann, was hier in der Notation vernachlässigt wurde. Es folgt ohnehin durch nochmalige Anwendung desselben Operators

$$\lambda^2 = 1, \quad (2.636)$$

also $\lambda = \pm 1$. Im Fall $\lambda = -1$ spricht man von *Antisymmetrie*, im Fall $\lambda = 1$ von *Symmetrie*. Teilchen mit halbzahligem Spin (Fermionen) haben antisymmetrische Wellenfunktionen, während Teilchen mit ganzzahligem Spin (Bosonen) symmetrische Wellenfunktionen haben. Dies hat weitreichende Implikationen. Nehme an, dass sich ein N -Fermionen-System in einem Zustand befindet, in dem die Teilchen i und j dieselben Orbitale besetzen,

¹Man kann sich leicht klarmachen, dass es nicht möglich ist, eine solche Funktion für ein realistisches System zu tabellieren.

also

$$\psi(\dots, x_i, \dots, x_j, \dots) = \psi(\dots, x_j, \dots, x_i, \dots) \quad (2.637)$$

gilt. Wendet man hierauf nun $\hat{P}_{i,j}$ an, folgt

$$-\psi(\dots, x_i, \dots, x_j, \dots) = \psi(\dots, x_i, \dots, x_j, \dots), \quad (2.638)$$

also $\psi = 0$, was ein Widerspruch zur Normierungsbedingung ist. Zwei Fermionen können also nur dann die gleiche Wellenfunktion haben (das gleiche Orbital einnehmen), wenn sie einen unterschiedlichen Spin habe. Dies ist bei Bosonen nicht der Fall. Diese Abstoßung von Fermionen beruht nicht auf einer Kraft, sondern auf Symmetrieeigenschaften ihrer Wellenfunktion, was als *Pauli-Prinzip* bekannt ist.

2.3.12.1 Molekülspektren

Um die Wechselwirkung von Strahlung mit in der Atmosphäre vorhandener Materie zu berechnen, reicht das Planck'sche Strahlungsgesetz nicht aus. Man braucht auch die Spektren, das heißt die Energieniveaus und Übergangswahrscheinlichkeiten von Molekülen unter Anregung durch Dipolstrahlung. Ein H_2O -Molekül besteht aus zehn Elektronen, um den Zustand der Elektronenhülle bei Diskretisierung jeder Achse in zehn Intervalle (was kaum ausreichen dürfte) abzuspeichern, bräuchte man also bereits

$$N_{\text{points}} = (10^3 \cdot 2)^N = 2^N \cdot 10^{3N} \approx 10^{33} \quad (2.639)$$

Datenpunkte. Es handelt sich um jeweils zwei komplexe Zahlen, also braucht man ca.

$$S = 16 \cdot 10^{33} \approx 10^{22} \text{ Terrabyte} \quad (2.640)$$

an Speicherplatz, was derzeit unrealistisch viel ist. Will man Spektren theoretisch herleiten, muss man sich also Näherungsmethoden überlegen (dies ist fast immer so in der QM). Die gängigsten Verfahren sind:

- Störungstheorie
- Monte-Carlo-Simulation (ein statistisches Verfahren)
- Dichtefunktionaltheorie

2.3.12.2 Chemische Reaktionen

Chemische Reaktionen sind Stoffumwandlungen. Sei ein Gemisch aus $N \in \mathbb{N}$ Komponenten gegeben mit $N \geq 1$ und seien die Teilchendichten durch n_i gegeben mit $1 \leq i \leq N$. Definiere für $1 \leq j, k \leq N$ die Zahl $U_{j,k}$ durch die Rate, mit der sich der Stoff k in den Stoff j umwandelt (Dimension: Teilchen pro Zeit und Volumen). Dann gilt für $1 \leq i \leq N$

$$\frac{dn_i}{dt} = \sum_{j=1}^N U_{i,j} - U_{j,i}. \quad (2.641)$$

Findet dies in der Atmosphäre statt, ändert sich dadurch die Zusammensetzung der Luft und somit auch die Gaskonstante $R_d = \frac{R}{M_d}$. Die Matrix \overleftarrow{U} hängt von den thermodynamischen Größen, dem Strahlungsfeld sowie den vorhandenen Stoffdichten ab.

2.4 Statistische Physik

In der statistischen Physik geht es um makroskopische Systeme. Klassisch wird der Zustand r eines Systems aus N Teilchen durch $2f$ reelle Zahlen

$$r = (q_1, \dots, q_f; p_1, \dots, p_f) \quad (2.642)$$

angegeben, hierbei sind f die Anzahl der Freiheitsgrade, q_i sind die generalisierten Koordinaten und p_i die generalisierten Impulse. Dabei ist $\mathcal{O}(f) = \mathcal{O}(N)$. Als Beispiele eines solchen Systems kämen ein Kristall oder 10^{23} Gasteilchen in einem Kasten in Frage. Anhand dieser Beispiele wird deutlich, dass der mikroskopische Zustand eines makroskopischen Systems nicht relevant ist. Die exakte Geschwindigkeit eines der 10^{23} Teilchen ist egal. Der *Mikrozustand* ist also nicht von Interesse.

Eine deutliche Vereinfachung der Statistik erhält man, wenn man von einem quantenmechanischen System ausgeht. Dies liegt daran, dass ein stationärer Zustand in der Quantenmechanik durch endlich viele diskrete Quantenzahlen festgelegt werden kann, wenn das System in einem endlichen Volumen eingeschlossen ist. Einen Mikrozustand r kann man dann durch endlich viele natürliche Zahlen n_i festlegen,

$$r = (n_i). \quad (2.643)$$

Ein *Makrozustand* M wird durch die Angabe der Wahrscheinlichkeiten P_r für die Mikrozustände r definiert,

$$M := (P_r). \quad (2.644)$$

Hierzu stellt man sich eine Zahl N gleicher Systeme vor, ein sogenanntes *Ensemble*. Dies kann ein gedankliches Konzept sein, um ein einziges System zu verstehen, es kann sich aber auch um N real existierende Systeme handeln, wie zum Beispiel N spinbehaftete Teilchen. Es seien N_r Systeme im Mikrozustand r . Dann kann man die P_r durch

$$P_r := \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{N_r}{N} \quad (2.645)$$

definieren. Nun kann man als einschränkende Voraussetzungen annehmen, dass das System abgeschlossen ist, dass also Teilchenzahl und Energie konstant sind. Außerdem sollen keine Symmetrien bestehen, aus denen weitere einschränkende Erhaltungssätze folgen würden. Insbesondere Impuls- und Drehimpulserhaltung sollen nicht gelten. Man definiert den *Dichteoperator* des Ensembles durch

$$\hat{\rho}(t) := \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N |j\rangle \langle j|. \quad (2.646)$$

Hierbei läuft j über alle Ensemblemitglieder und $|j\rangle$ ist der Zustand des j -ten Systems. Die Zustände $|j\rangle$ müssen nicht orthogonal zueinander sein, aber normiert, insbesondere können mehrere Systeme im gleichen Zustand sein. Sei $(|\psi_k\rangle)$ für $k \geq 1$ eine Orthonormalbasis des Hilbert-Raums, aus dem die $|j\rangle$ -Zustände kommen. Für die Wahrscheinlichkeit P_l , ein zufällig gewähltes Ensemblemitglied im Zustand $|\psi_l\rangle$ anzutreffen, folgt

$$P_l = \frac{N_l}{N} = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N |\langle \psi_l | j \rangle|^2 = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N \langle \psi_l | j \rangle \langle j | \psi_l \rangle = \langle \psi_l | \hat{\rho} | \psi_l \rangle. \quad (2.647)$$

Hierbei wurde N_l als die Anzahl der Systeme interpretiert, die bei einer quantenmechanischen Messung im Zustand $|\psi_l\rangle$ angetroffen werden. Der Makrozustand (P_r) lässt sich also aus dem Dichteoperator ermitteln, daher heißt der Dichteoperator auch *statistischer Operator*. Hieraus folgt weiter

$$\text{tr}(\hat{\rho}) = 1. \quad (2.648)$$

Für einen Erwartungswert $\langle \hat{A} \rangle$ folgt in dem Fall, dass \hat{A} hermitesch ist

$$\begin{aligned} \langle \hat{A} \rangle &= \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N \langle j | \hat{A} | j \rangle = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N \sum_{k=1}^{\infty} \langle j | \psi_k \rangle \langle \psi_k | \hat{A} | j \rangle = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N \sum_{k=1}^{\infty} \langle \psi_k | \hat{A} | j \rangle \langle j | \psi_k \rangle \\ &= \sum_{k=1}^{\infty} \langle \psi_k | \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N \hat{A} | j \rangle \langle j | \psi_k \rangle = \sum_{k=1}^{\infty} \langle \psi_k | \hat{A} \hat{\rho} | \psi_k \rangle = \text{tr}(\hat{A} \hat{\rho}). \end{aligned} \quad (2.649)$$

Seien $|\psi_l\rangle, |\psi_m\rangle$ zwei Zustände, dann gilt

$$\begin{aligned} \langle \psi_l | \hat{\rho} \psi_m \rangle &= \frac{1}{N} \langle \psi_l | \sum_{j=1}^N |j\rangle \langle j | \psi_m \rangle = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N \langle \psi_l | j \rangle \langle j | \psi_m \rangle = \frac{1}{N} \left(\sum_{j=1}^N \langle \psi_m | j \rangle \langle j | \psi_l \rangle \right)^* \\ &= \frac{1}{N} \left(\langle \psi_m | \sum_{j=1}^N |j\rangle \langle j | \psi_l \rangle \right)^* = \langle \psi_m | \hat{\rho} \psi_l \rangle^* = \langle \hat{\rho} \psi_l | \psi_m \rangle. \end{aligned} \quad (2.650)$$

Der Dichteoperator ist also hermitesch. Die letzte Eigenschaft des Dichteoperators, die hier festgehalten werden

soll ist

$$\begin{aligned} \text{tr}(\hat{\rho}^2) &= \langle \hat{\rho} \rangle = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N \langle j | \hat{\rho} | j \rangle = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N \langle j | \frac{1}{N} \sum_{j'=1}^N | j' \rangle \langle j' | j \rangle \\ &= \frac{1}{N^2} \sum_{j,j'=1}^N |\langle j | j' \rangle|^2 \leq 1 \frac{1}{N^2} \sum_{j,j'=1}^N 1 = 1. \end{aligned} \quad (2.651)$$

Es ist also genau dann $\text{tr}(\hat{\rho}^2) = 1$, wenn alle Ensemblemitglieder im gleichen Zustand sind. Dies bezeichnet man als einen *reinen Zustand*, ansonsten spricht man von einem *gemischten Zustand*.

Der Erwartungswert des Hamilton-Operators ist der Erwartungswert der Energie oder kurz die Energie E . Es gilt also

$$E = \text{tr}(\hat{H}\hat{\rho}). \quad (2.652)$$

Mit der zeitabhängigen SG folgt

$$i\hbar \frac{\partial \hat{\rho}}{\partial t} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \hat{H} |j\rangle \langle j| + |j\rangle i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \langle j| \quad (2.653)$$

Mit

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \langle j| = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |j\rangle^+ = - \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |j\rangle \right)^+ = - (\hat{H}|j\rangle)^+ = - \langle j| \hat{H} \quad (2.654)$$

erhält man

$$i\hbar \frac{\partial \hat{\rho}}{\partial t} = [\hat{H}, \hat{\rho}]. \quad (2.655)$$

Dies ist die *von Neumann-Gleichung*.

Ein abgeschlossenes System sei einem konstanten Störoperator \hat{V} ausgesetzt, dann folgt mit Glg. (2.607) für die Übergangsrate $R_{r,r'}$ zwischen zwei Mikrozuständen $|\psi_r\rangle, |\psi_{r'}\rangle$

$$R_{r,r'} = \frac{2\pi}{\hbar} \left| \langle \psi_r | \hat{V} | \psi_{r'} \rangle \right|^2 = R_{r',r}. \quad (2.656)$$

Für die Zeitableitung der Wahrscheinlichkeiten $P_r(t)$ folgt somit

$$\frac{dP_r(t)}{dt} = - \sum_{r'} R_{r,r'} P_r + \sum_{r'} R_{r',r} P_{r'} = \sum_{r'} R_{r,r'} (P_{r'} - P_r). \quad (2.657)$$

Glg. (2.657) nennt man *Mastergleichung*. Definiere

$$H(t) := \sum_{r=1}^{\infty} P_r \ln(P_r). \quad (2.658)$$

Dann gilt

$$\begin{aligned} \frac{dH}{dt} &= \sum_r (\dot{P}_r \ln(P_r) + \dot{P}_r) = \frac{1}{2} \left[\sum_r \dot{P}_r \ln(eP_r) + \sum_{r'} \dot{P}_{r'} \ln(eP_{r'}) \right] \\ &= \frac{1}{2} \sum_{r,r'} R_{r,r'} (P_{r'} - P_r) [\ln(eP_r) - \ln(eP_{r'})] = \frac{1}{2} \sum_{r,r'} R_{r,r'} P_r \left(1 - \frac{P_{r'}}{P_r} \right) \ln \left(\frac{P_{r'}}{P_r} \right) \end{aligned} \quad (2.659)$$

Es gelten $R_{r,r'} P_r \geq 0$ sowie

$$(1 - x) \ln(x) \leq 0. \quad (2.660)$$

Somit gilt

$$\frac{dH}{dt} \leq 0. \quad (2.661)$$

Glg. (2.661) bezeichnet man als *H-Theorem*. Als *Gleichgewichtszustand* ist der Zustand mit konstanten P_r definiert, also mit $\dot{H} = 0$ oder $H = \text{minimal}$. Weiter definiert man die Entropie S durch

$$S := -k_B H \quad (2.662)$$

Über die Entropie ist zu sagen:

Zweiter Hauptsatz der Thermodynamik

Die Entropie S ist im Gleichgewicht maximal. Bei Nicht-Gleichgewichtsprozessen gilt $\frac{dS}{dt} > 0$, dadurch ist eine Zeitrichtung ausgezeichnet. Ein solcher Prozess ist daher irreversibel.

2.4.1 Mikrokanonisches Ensemble

Nach Glg. (2.659) gilt im Gleichgewicht

$$P_r = P_{r'} \quad (2.663)$$

für alle r, r' mit $E_r = E_{r'}$. In einem abgeschlossenen System können definitionsgemäß nur Zustände mit $E_r = E$ erreicht werden.

Ein abgeschlossenes System im Gleichgewicht ist gleich wahrscheinlich in jedem seiner zugänglichen Mikrozustände.

Man kann nun die Energie E des Systems messen, dies geschehe mit einer Genauigkeit $\delta E \gg \Delta E_r$, wobei ΔE_r einen typischen Abstand zwischen den Energieniveaus des Systems darstellt. Dass eine Energie E mit der Genauigkeit δE gemessen wurde, soll so interpretiert werden, dass die wahre Energie E' des Systems im Intervall $[E - \delta E, E]$ liegt. Es gibt somit eine Anzahl von Zuständen r , deren Energien E_r in diesem Intervall liegen und somit mit der Messung verträglich sind. Man definiert die *mikrokanonische Zustandssumme* Ω durch

$$\Omega(E, x) := \sum_{r: E - \delta E \leq E_r < E} 1. \quad (2.664)$$

Hierbei bezeichnet x alle Parameter außer der Energie, die das System makrokopisch festlegen, insbesondere das Volumen. Da alle zugänglichen Mikrozustände gleich wahrscheinlich sind, gilt

$$P_r = \frac{1}{\Omega(E, x)} \cdot \begin{cases} 1, & E - \delta E \leq E_r < E, \\ 0, & \text{sonst} \end{cases} \quad (2.665)$$

Im mikrokanonischen Ensemble, auf welches sich die mikrokanonische Zustandssumme bezieht, sind alle Systeme abgeschlossen und haben gleiche Energien und Teilchenzahlen. Es handelt sich also um ganz bestimmte physikalische Voraussetzungen. Für die Entropie folgt in diesem Fall

$$S(E, x) = -k_B \sum_{r=1}^{\infty} \frac{1}{\Omega(E, x)} \ln \left(\frac{1}{\Omega(E, x)} \right) = k_B \ln [\Omega(E, x)]. \quad (2.666)$$

Für die Energie eines Systems kann man mit Bezug auf eine Orthonormalbasis $(|\psi_k\rangle)$ aus Eigenzuständen des Hamilton-Operators schreiben

$$E = \sum_{k=1}^{\infty} P_k E_k(x). \quad (2.667)$$

Für die Änderung der Energie folgt in linearer Ordnung

Erster Hauptsatz der Thermodynamik

$$\Leftrightarrow dE = \underbrace{E \sum_{k=1}^{\infty} dP_k}_{= \text{Wärme } dQ} + \underbrace{\sum_{k=1}^{\infty} P_k \frac{\partial E(x)}{\partial x} dx}_{= -\text{Arbeit } = -dW}. \quad (2.668)$$

Hierbei wurde für die Ableitung nach x einfach eine partielle Ableitung notiert, im Allgemeinen ist es eine Summe mehrerer partieller Ableitungen, außerdem wurde $E_k = E$ eingesetzt. *Wärme* bedeutet also eine Änderung der Besetzungswahrscheinlichkeiten bei konstanten äußeren Parametern x , *Arbeit* bedeutet eine Änderung der Energie durch Änderung der äußeren Parameter; dies sind begriffliche Definitionen. Ein Differenzial df ist eine Kurznotation für eine lineare Taylor-Entwicklung von f unter Nichtberücksichtigung des Fehlerterms. Da die Energie E als Zustandsgröße nicht von dem Prozess abhängt, der in den Zustand geführt hat, kann o. B. d. A. ein *quasistatischer Prozess* angenommen werden:

$$dE = dQ_{qs} - dW_{qs} \quad (2.669)$$

Bei einem solchen Prozess wird eine Folge von Gleichgewichtszuständen durchlaufen, man kann ihn sich als einen unendlich langsam ablaufenden Prozess vorstellen. Weiter definiert man zu jedem äußeren Parameter x_i eine *verallgemeinerte Kraft* X_i durch

$$X_i := - \sum_{k=1}^{\infty} P_k \frac{\partial E_k(x)}{\partial x_i}. \quad (2.670)$$

Im Gleichgewicht wird dies zu

$$X_i = - \frac{\partial E(x)}{\partial x_i}. \quad (2.671)$$

Bei einem quasistatischen Prozess gilt also

$$dW_{qs} = - \sum_i \frac{\partial E(x)}{\partial x_i} dx_i = \sum_i X_i dx_i. \quad (2.672)$$

Der Druck p ist die verallgemeinerte Kraft des Volumens:

$$p(E, x) := - \sum_{k=1}^{\infty} P_k \frac{\partial E_k(x)}{\partial V} \quad (2.673)$$

Im Fall $x = V$, wenn also der einzige äußere Parameter das Volumen ist, folgt

$$dE = dQ_{qs} - pdV \quad (2.674)$$

Die *Temperatur* T wird durch

$$\frac{1}{T} := \frac{\partial S(E, x)}{\partial E} \quad (2.675)$$

definiert, weiterhin legt man

$$\beta := \frac{1}{k_B T} \quad (2.676)$$

als Abkürzung fest. Glg. (2.670) ist unhandlich, da eine Mittelung über unendlich viele quantenmechanische Zustände erfolgen muss. Um eine alternative Formel herzuleiten, geht man von der mikrokanonischen Zustandssumme

$$\Omega(E, x) = \Omega(E, x_1, x_i) = \sum_{r: E - \delta E \leq E_r < E} 1 \quad (2.677)$$

aus, hierbei steht x_i für alle äußereren Parameter außer x_1 , wobei x_1 willkürlich ausgewählt ist. Es gilt

$$\frac{\partial \ln [\Omega(E, x)]}{\partial x_1} = \frac{\ln [\Omega(E, x_1 + dx_1, x_i)] - \ln [\Omega(E, x_1, x_i)]}{dx_1}. \quad (2.678)$$

Nun rechnet man

$$\Omega(E, x_1 + dx_1, x_i) = \sum_{r: E - \delta E \leq E_r(x_1 + dx_1, x_i) < E} \mathbf{i} = \sum_{r: E - \delta E \leq E_r(x) + dE_r < E} \mathbf{i} \quad (2.679)$$

mit

$$dE_r = \frac{\partial E_r}{\partial x_1} dx_1. \quad (2.680)$$

Man kann

$$dE_r = \overline{dE_r} \quad (2.681)$$

setzen, wobei die Mittelung über alle Mikrozustände des Gleichgewichtszustandes erfolgt:

$$\Omega(E, x_1 + dx_1, x_i) = \sum_{r: E - \overline{dE_r} - \delta E \leq E_r(x) < E - \overline{dE_r}} \mathbf{i} = \Omega(E - \overline{dE_r}, x) \quad (2.682)$$

Wegen

$$X_i = -\frac{\partial \overline{E}}{\partial x_i} \quad (2.683)$$

ist

$$\overline{dE_r} = -X_1 x_1. \quad (2.684)$$

Somit gilt

$$\begin{aligned} \frac{\partial \ln [\Omega(E, x)]}{\partial x_1} &= -\frac{\ln [\Omega(E - \overline{dE_r}, x)] - \ln [\Omega(E, x)]}{\overline{dE_r}/X_1} = \frac{\partial \ln [\Omega(E, x)]}{\partial E} X_1 = \beta X_1 \\ \Rightarrow X_1 &= T \frac{\partial S(E, x)}{\partial x_1}. \end{aligned} \quad (2.685)$$

Für den Druck folgt

$$p = T \frac{\partial S(E, x)}{\partial V} \quad (2.686)$$

Für die Änderung der Entropie gilt

$$dS = \frac{\partial S(E, x)}{\partial E} dE + \sum_i \frac{\partial S(E, x)}{\partial x_i} dx_i = \frac{dE}{T} + \sum_i \frac{X_i}{T} dx_i \quad (2.687)$$

$$\Leftrightarrow dS = \frac{1}{T} (dQ - dW + dW_{qs}) = \frac{dQ_{qs}}{T} \quad (2.688)$$

Sind zwei Systeme A, B mit den mikrokanonischen Zustandssummen $\Omega_A(E_A, x_A)$ und $\Omega_B(E_B, x_B)$ im Gleichgewicht, so gilt für die Energie E des Gesamtsystems

$$E = E_A + E_B. \quad (2.689)$$

Für die Zustandssumme $\Omega(E, x)$ des Gesamtsystems folgt

$$\Omega(E, x) = \Omega_A(E_A, x_A) \Omega_B(E_B, x_B). \quad (2.690)$$

Die Zustandssummen der Subsysteme müssen multipliziert werden, da alle Kombinationen von Mikrozuständen auftreten können. Für die Entropie S des Gesamtsystems folgt

$$S(E, x) = k_B \ln [\Omega_A(E_A, x_A)] + k_B \ln [\Omega_B(E_B, x_B)] = S_A(E_A, x_A) + S_B(E - E_A, x_B). \quad (2.691)$$

Die Entropie ist also additiv. Im Gleichgewicht ist sie maximal:

$$\frac{\partial S}{\partial E_A} = 0 \Rightarrow \frac{\partial S_A}{\partial E_A} + \frac{\partial S_B}{\partial E_A} = \frac{\partial S_A}{\partial E_A} - \frac{\partial S_B}{\partial E_B} = 0 \Rightarrow T_A = T_B \quad (2.692)$$

Befinden sich die Systeme A, B außerdem in x_i -Austausch, erhält man unter der Annahme $x_i = x_{i,A} + x_{i,B}$ die Bedingung

$$\nabla S = 0 \Rightarrow \frac{\partial S}{\partial x_{i,A}} = 0 \Rightarrow \frac{\partial S_A}{\partial x_{i,A}} + \frac{\partial S_B}{\partial x_{i,A}} = \frac{\partial S_A}{\partial x_{i,A}} - \frac{\partial S_B}{\partial x_{i,B}} = 0. \quad (2.693)$$

Hieraus folgt unter der Annahme $T_A = T_B$ die Gleichheit der generalisierten Kräfte

$$X_{i,A} = X_{i,B}. \quad (2.694)$$

Eine Gleichung der Form

$$p = p(T, V, N) \quad (2.695)$$

nennt man *thermische Zustandsgleichung*, während Gleichungen der Form

$$E = E(T, V, N) \quad (2.696)$$

als *kalorische Zustandsgleichungen* bezeichnet werden. Es sei an dieser Stelle auf die in der Thermodynamik übliche Notation

$$\frac{\partial f(x, y, z)}{\partial x} = \left(\frac{\partial f}{\partial x} \right)_{y,z} \quad (2.697)$$

für partielle Ableitungen hingewiesen. Die *Wärmekapazität* eines Stoffes ist definiert durch

$$C^{(p)} := \left(\frac{dQ_{qs}}{dT} \right)_p \quad (2.698)$$

bzw.

$$C^{(V)} := \left(\frac{dQ_{qs}}{dT} \right)_V, \quad (2.699)$$

je nachdem, ob bei dem Prozess der Druck oder das Volumen konstantgehalten wird. Mit Glg. (2.688) folgt

$$C^{(p)} = T \left(\frac{\partial S}{\partial T} \right)_p, \quad (2.700)$$

$$C^{(V)} = T \left(\frac{\partial S}{\partial T} \right)_V. \quad (2.701)$$

Die *spezifische Wärmekapazität* eines Systems mit der Masse m ist definiert durch

$$c^{(p)} := \frac{1}{m} C^{(p)} \quad (2.702)$$

und analog für $c^{(V)}$.

2.4.2 Kanonisches und großkanonisches Ensemble

Das *kanonische Ensemble* besteht aus Systemen A , die im Wärmeaustausch mit großen, sie umgebenden Systemen B stehen, sogenannten *Badsystemen*. Es besteht jedoch kein Teilchen- oder x_i -Austausch. Das aus A und B bestehende Gesamtsystem sei abgeschlossen, sodass das mikrokanonische Ensemble verwendet werden kann. Dann gilt für die Gesamtenergie

$$E = E_A + E_B = \text{const.} \quad (2.703)$$

Für die mikrokanonische Zustandssummen Ω des Gesamtsystems gilt

$$\Omega = \Omega(E, x). \quad (2.704)$$

Das Gesamtsystem ist gleich wahrscheinlich in jedem seiner zugänglichen Mikrozustände anzutreffen. Die Anzahl der Zustände $n(E_A)$ mit einer festen Energie E_A des Systems A ist gegeben durch

$$n(E_A) = \Omega_A(E_A, x_A) \Omega_B(E_B, x_B), \quad (2.705)$$

wobei Ω_A die mikrokanonische Zustandssumme des Systems A ist und Ω_B diejenige des Systems B . Die Wahrscheinlichkeit, im System A einen Zustand r mit einer Energie $E_r = E_A$ anzutreffen ist die Wahrscheinlichkeit

$$P(E_A) = \frac{n_A}{\Omega(E, x)} = \frac{\Omega_A(E_A, x_A) \Omega_B(E_B, x_B)}{\Omega(E, x)}, \quad (2.706)$$

das System A bei einer Energie E_A vorzufinden, dividiert durch die Anzahl dieser gleich wahrscheinlichen Zustände:

$$P_r = \frac{P(E_A)}{\Omega_A(E_A, x_A)} = \frac{\Omega_B(E - E_A, x - x_A)}{\Omega(E, x)} \quad (2.707)$$

Dabei wurden $E_B = E - E_A$ und $x_B = x - x_A$ eingesetzt. Wegen $E_B \gg E_A$ kann man den Zähler nach E_A um $E_A = 0$ entwickeln:

$$\ln [\Omega_B(E - E_A, x - x_A)] = \ln [\Omega_B(E, x - x_A)] - \beta E_A + \mathcal{O}(E_A^2) \quad (2.708)$$

Dabei ist

$$\beta = \frac{1}{k_B T_K} \quad (2.709)$$

mit der Temperatur des Wärmebades zu bilden, die aber gleich der Temperatur T des Gesamtsystems ist, da sich dieses im Gleichgewicht befindet (s. Glg. (2.692)). Unter Vernachlässigung der Terme höherer Ordnung gilt

$$P_r = \frac{\Omega_B(E, x - x_A)}{\Omega(E, x)} e^{-\beta E_r} = \frac{1}{Z} e^{-\beta E_r}. \quad (2.710)$$

$Z = \frac{\Omega(E, x - x_A)}{\Omega_B(E, x)}$ ist die kanonische Zustandssumme, diese fungiert als Normierungskonstante und stellt

$$\sum_r P_r = 1 \quad (2.711)$$

sicher:

$$Z = \sum_r e^{-\beta E_r} \quad (2.712)$$

Im *größkanonischen Ensemble* ist nicht nur Wärme-, sondern auch Teilchenaustausch mit dem System B möglich. Dann gilt zusätzlich

$$N = N_A + N_B = \text{const.} \quad (2.713)$$

für die Teilchenzahl. Für die Anzahl der Zustände $n(E_A, N_A)$, bei denen das System A die Energie E_A und die Teilchenzahl N_A hat, gilt

$$n(E_A, N_A) = \Omega_A(E_A, N_A, x_A) \Omega_B(E_B, N_B, x_B). \quad (2.714)$$

Die Wahrscheinlichkeit $P(E_A, N_A)$, im System A einen Zustand r mit der Energie $E_r = E_A$ und der Teilchenzahl $N_r = N_A$ anzutreffen, ist gegeben durch die Wahrscheinlichkeit

$$P(E_A, N_A) = \frac{n(E_A, N_A)}{\Omega(E, x)} = \frac{\Omega_A(E_A, N_A, x_A) \Omega_B(E_B, N_B, x_B)}{\Omega(E, x)}, \quad (2.715)$$

das System A bei einer Energie E_A und Teilchenzahl N_A vorzufinden, dividiert durch die Anzahl dieser gleich wahrscheinlichen Zustände:

$$P_r = \frac{P(E_A, N_A)}{\Omega_A(E_A, N_A, x_A)} = \frac{\Omega_B(E - E_A, N - N_A, x_B)}{\Omega(E, x)} \quad (2.716)$$

Dabei wurden $E_B = E - E_A$, $N_B = N - N_A$ und $x_B = x - x_A$ eingesetzt. Wegen $E_B \gg E_A$ und $N_B \gg N_A$ kann man wieder den Zähler entwickeln:

$$\begin{aligned} \ln [\Omega_B(E - E_A, N - N_A, x - x_A)] &= \ln [\Omega_B(E, N, x - x_A)] - \beta E_A - \frac{i}{k_B} \frac{\partial S}{\partial N} N_A \\ &\quad + \mathcal{O}(E_A^2, N_A^2, E_A N_A). \end{aligned} \quad (2.717)$$

Man definiert die negative generalisierte Kraft der Teilchenzahl durch das *chemische Potential*

$$\mu := -T \frac{\partial S(E, N, x)}{\partial N}. \quad (2.718)$$

Unter Vernachlässigung der Terme höherer Ordnung gilt somit

$$P_r = \frac{\Omega_B(E, N, x - x_A)}{\Omega(E, x)} e^{-\beta(E_r - \mu N_r)} = \frac{i}{Y} e^{-\beta(E_r - \mu N_r)} \quad (2.719)$$

$Y = \frac{\Omega(E, x)}{\Omega_B(E, N, x - x_A)}$ ist die großkanonische Zustandssumme, diese fungiert als Normierungskonstante und stellt

$$\sum_r P_r = i \quad (2.720)$$

sicher:

$$Y = \sum_r e^{-\beta(E_r - \mu N_r)} \quad (2.721)$$

2.4.3 Thermodynamische Potentiale

Ein *thermodynamisches Potential* ist eine Zustandsgröße, aus der man durch partielles Differenzieren alle Zustandsgrößen ermitteln kann. Als äußere Parameter werden in diesem Abschnitt nur das Volumen V sowie die Teilchenzahl N betrachtet. Man definiert außer der Energie folgende thermodynamische Potentiale:

$$F := E - ST \quad (\text{freie Energie}) \quad (2.722)$$

$$H := E + pV \quad (\text{Enthalpie}) \quad (2.723)$$

$$G := E - ST + pV \quad (\text{Gibbspotential, freie Enthalpie}) \quad (2.724)$$

$$J := E - ST - \mu N \quad (\text{großkanonisches Potential}) \quad (2.725)$$

Für die Differenziale folgt mit $dE = dQ - pdV + \mu dN$

$$dF = -SdT - pdV + \mu dN, \quad (2.726)$$

$$dH = TdS + Vdp + \mu dN, \quad (2.727)$$

$$dG = -SdT + Vdp + \mu dN, \quad (2.728)$$

$$dJ = -SdT - pdV - Nd\mu. \quad (2.729)$$

Hieraus lassen sich folgende Aussagen ablesen:

$$\left(\frac{\partial E}{\partial S} \right)_{V,N} = T \quad (2.730)$$

$$\left(\frac{\partial E}{\partial V} \right)_{S,N} = -p \quad (2.731)$$

$$\left(\frac{\partial E}{\partial N} \right)_{S,V} = \mu \quad (2.732)$$

$$\left(\frac{\partial F}{\partial T} \right)_{V,N} = -S \quad (2.733)$$

$$\left(\frac{\partial F}{\partial V} \right)_{T,N} = -p \quad (2.734)$$

$$\left(\frac{\partial F}{\partial N} \right)_{T,V} = \mu \quad (2.735)$$

$$\left(\frac{\partial H}{\partial S} \right)_{p,N} = T \quad (2.736)$$

$$\left(\frac{\partial H}{\partial p} \right)_{S,N} = V \quad (2.737)$$

$$\left(\frac{\partial H}{\partial N} \right)_{S,p} = \mu \quad (2.738)$$

$$\left(\frac{\partial G}{\partial T} \right)_{p,N} = -S \quad (2.739)$$

$$\left(\frac{\partial G}{\partial p} \right)_{T,N} = V \quad (2.740)$$

$$\left(\frac{\partial G}{\partial N} \right)_{T,p} = \mu \quad (2.741)$$

$$\left(\frac{\partial J}{\partial T} \right)_{V,\mu} = -S \quad (2.742)$$

$$\left(\frac{\partial J}{\partial V} \right)_{T,\mu} = -p \quad (2.743)$$

$$\left(\frac{\partial J}{\partial \mu} \right)_{T,V} = -N \quad (2.744)$$

Dies sind jeweils drei Aussagen für die partiellen Ableitungen von E, F, H, G und J . Indem man die Gleichheit der zweiten partiellen Ableitungen anwendet, lassen sich daraus 15 nichttriviale thermodynamische Relationen

ableiten, die man *Maxwell-Relationen* nennt:

$$\left(\frac{\partial^* E}{\partial V \partial S} \right)_N = \left(\frac{\partial^* E}{\partial S \partial V} \right)_N \Rightarrow \left(\frac{\partial T}{\partial V} \right)_{S,N} = - \left(\frac{\partial p}{\partial S} \right)_{V,N} \quad (2.745)$$

$$\left(\frac{\partial^* E}{\partial N \partial S} \right)_V = \left(\frac{\partial^* E}{\partial S \partial N} \right)_V \Rightarrow \left(\frac{\partial T}{\partial N} \right)_{S,V} = \left(\frac{\partial \mu}{\partial S} \right)_{N,V} \quad (2.746)$$

$$\left(\frac{\partial^* E}{\partial N \partial V} \right)_S = \left(\frac{\partial^* E}{\partial V \partial N} \right)_S \Rightarrow - \left(\frac{\partial p}{\partial N} \right)_{V,S} = \left(\frac{\partial \mu}{\partial V} \right)_{N,S} \quad (2.747)$$

$$\left(\frac{\partial^* F}{\partial V \partial T} \right)_N = \left(\frac{\partial^* F}{\partial T \partial V} \right)_N \Rightarrow \left(\frac{\partial S}{\partial V} \right)_{T,N} = \left(\frac{\partial p}{\partial T} \right)_{V,N} \quad (2.748)$$

$$\left(\frac{\partial^* F}{\partial N \partial T} \right)_V = \left(\frac{\partial^* F}{\partial T \partial N} \right)_V \Rightarrow - \left(\frac{\partial S}{\partial N} \right)_{T,V} = \left(\frac{\partial \mu}{\partial T} \right)_{N,V} \quad (2.749)$$

$$\left(\frac{\partial^* F}{\partial N \partial V} \right)_T = \left(\frac{\partial^* F}{\partial V \partial N} \right)_T \Rightarrow - \left(\frac{\partial p}{\partial N} \right)_{V,T} = \left(\frac{\partial \mu}{\partial V} \right)_{N,T} \quad (2.750)$$

$$\left(\frac{\partial^* H}{\partial p \partial S} \right)_N = \left(\frac{\partial^* H}{\partial S \partial p} \right)_N \Rightarrow \left(\frac{\partial T}{\partial p} \right)_{S,N} = \left(\frac{\partial V}{\partial S} \right)_{p,N} \quad (2.751)$$

$$\left(\frac{\partial^* H}{\partial N \partial S} \right)_p = \left(\frac{\partial^* H}{\partial S \partial N} \right)_p \Rightarrow \left(\frac{\partial T}{\partial N} \right)_{S,p} = \left(\frac{\partial \mu}{\partial S} \right)_{N,p} \quad (2.752)$$

$$\left(\frac{\partial^* H}{\partial N \partial p} \right)_S = \left(\frac{\partial^* H}{\partial p \partial N} \right)_S \Rightarrow \frac{V}{N} = \left(\frac{\partial V}{\partial N} \right)_{p,S} = \left(\frac{\partial \mu}{\partial p} \right)_{N,S} \quad (2.753)$$

$$\left(\frac{\partial^* G}{\partial p \partial T} \right)_N = \left(\frac{\partial^* G}{\partial T \partial p} \right)_N \Rightarrow - \left(\frac{\partial S}{\partial p} \right)_{T,N} = \left(\frac{\partial V}{\partial T} \right)_{p,N} \quad (2.754)$$

$$\left(\frac{\partial^* G}{\partial N \partial T} \right)_p = \left(\frac{\partial^* G}{\partial T \partial N} \right)_p \Rightarrow - \frac{S}{N} = - \left(\frac{\partial S}{\partial N} \right)_{T,p} = \left(\frac{\partial \mu}{\partial T} \right)_{N,p} \quad (2.755)$$

$$\left(\frac{\partial^* G}{\partial N \partial p} \right)_T = \left(\frac{\partial^* G}{\partial p \partial N} \right)_T \Rightarrow \left(\frac{\partial V}{\partial N} \right)_{p,T} = \left(\frac{\partial \mu}{\partial p} \right)_{N,T} \quad (2.756)$$

$$\left(\frac{\partial^* J}{\partial T \partial V} \right)_\mu = \left(\frac{\partial^* J}{\partial V \partial T} \right)_\mu \Rightarrow \left(\frac{\partial p}{\partial T} \right)_{\mu,V} = \left(\frac{\partial S}{\partial V} \right)_{\mu,T} \quad (2.757)$$

$$\left(\frac{\partial^* J}{\partial T \partial \mu} \right)_V = \left(\frac{\partial^* J}{\partial \mu \partial T} \right)_V \Rightarrow \left(\frac{\partial N}{\partial T} \right)_{\mu,V} = \left(\frac{\partial S}{\partial \mu} \right)_{T,V} \quad (2.758)$$

$$\left(\frac{\partial^* J}{\partial V \partial \mu} \right)_T = \left(\frac{\partial^* J}{\partial \mu \partial V} \right)_T \Rightarrow \left(\frac{\partial N}{\partial V} \right)_{\mu,T} = \left(\frac{\partial p}{\partial \mu} \right)_{T,V} \quad (2.759)$$

Kennt man die mikroskopische Struktur eines Systems, kann man je nach physikalischer Voraussetzung die Entropie, die mikrokanonische Zustandssumme oder die großkanonische Zustandssumme bestimmen. Die Frage ist, wie man aus den Zustandssummen makroskopische Größen, wie Kompressibilitäten oder Wärmekapazitäten ermitteln kann. Hierzu muss man eines der thermodynamischen Potentiale durch die Zustandssumme des Systems ausdrücken können. Zunächst wird das kanonische Ensemble betrachtet. In diesem Fall sind (T, V, N) oder

alternativ (β, V, N) festgelegt. Es gilt

$$d\ln [Z(\beta, V, N)] = \frac{\partial \ln(Z)}{\partial \beta} d\beta + \frac{\partial \ln(Z)}{\partial V} dV + \frac{\partial \ln(Z)}{\partial N} dN. \quad (2.760)$$

Nun werden die partiellen Ableitungen der Zustandssumme Glg. (2.712) berechnet:

$$\frac{\partial \ln(Z)}{\partial \beta} = -\frac{1}{Z} \sum_r E_r \exp(-\beta E_r) = -E \quad (2.761)$$

$$\frac{\partial \ln(Z)}{\partial V} = -\frac{\beta}{Z} \sum_r \frac{\partial E_r(V, N)}{\partial V} \exp(-\beta E_r) = -\beta \frac{\overline{\partial E_r}}{\partial V} = \beta p \quad (2.762)$$

$$\frac{\partial \ln(Z)}{\partial N} = -\frac{\beta}{Z} \sum_r \frac{\partial E_r(V, N)}{\partial N} \exp(-\beta E_r) = -\beta \frac{\overline{\partial E_r}}{\partial N} = -\beta \mu \quad (2.763)$$

Es gilt somit

$$\begin{aligned} d\ln(Z(\beta, V, N)) &= -Ed\beta + \beta pdV - \beta \mu dN \\ \Rightarrow d(\ln(Z) + \beta E) &= \beta(dE + pdV - \mu dN) = \frac{1}{k_B} \left(\frac{dE}{T} + \frac{p}{T} dV - \frac{\mu}{T} dN \right) \end{aligned} \quad (2.764)$$

Durch Vergleich mit Glg. (2.687) erhält man

$$k_B d[\ln(Z) + \beta E] = dS \Rightarrow S = k_B [\ln(Z) + \beta E] + C. \quad (2.765)$$

Die Konstante C ergibt sich zu Null, was hier nicht gezeigt werden soll, damit folgt

$$F = E - TS = -k_B T \ln(Z(T, V, \mu)). \quad (2.766)$$

Im großkanonischen Ensemble sind (T, V, μ) festgelegt, man erhält das Differenzial

$$d\ln[Y(\beta, V, \mu)] = \frac{\partial \ln(Y)}{\partial \beta} d\beta + \frac{\partial \ln(Y)}{\partial V} dV + \frac{\partial \ln(Y)}{\partial \mu} d\mu. \quad (2.767)$$

Für die partiellen Ableitungen berechnet man mit der Zustandssumme Glg. (2.721)

$$\frac{\partial \ln(Y)}{\partial \beta} = -\frac{1}{Y} \sum_r (E_r - \mu N_r) \exp(-\beta(E_r - \mu N_r)) = -E + \mu N, \quad (2.768)$$

$$\frac{\partial \ln(Y)}{\partial V} = -\frac{\beta}{Y} \sum_r \frac{\partial E_r(V, N)}{\partial V} \exp(-\beta(E_r - \mu N_r)) = -\beta \frac{\overline{\partial E_r}}{\partial V} = \beta p, \quad (2.769)$$

$$\frac{\partial \ln(>) }{\partial \mu} = \frac{\beta}{Y} \sum_r N_r \exp(-\beta(E_r - \mu N_r)) = \beta \overline{N_r} = \beta N. \quad (2.770)$$

Es ist somit

$$\begin{aligned} d\ln[Y(\beta, V, \mu)] &= (-E + \mu N) d\beta + \beta pdV + \beta N d\mu \\ \Leftrightarrow d[\ln(Y) + \beta E - \beta \mu N] &= \beta(dE + pdV - \mu dN) = \frac{dS}{k_B}. \end{aligned} \quad (2.771)$$

Damit gilt

$$S = k_B [\ln(Y) + \beta E - \beta \mu N] \Leftrightarrow k_B T \ln(Y) = TS - E + \mu N. \quad (2.772)$$

Eine hier mögliche Konstante ist ebenfalls Null. Durch Vergleich mit Glg. (2.725) folgt

$$J = -k_B T \ln(Y(T, V, \mu)). \quad (2.773)$$

Durch die Glg.en (2.766) und (2.773) ist eine Verbindung zwischen mikroskopischer Statistik und makroskopischer Thermodynamik gegeben.

2.4.4 Ideales Gas

Ein *ideales Gas* ist ein Gas, in dem die Teilchen nicht miteinander wechselwirken. Der Hamilton-Operator eines idealen Gases aus N Teilchen lautet

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^N -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_i + V(\mathbf{r}_i) = \sum_{i=1}^N \hat{H}_i, \quad (2.774)$$

es handelt sich um eine Überlagerung von Einteilchen-Hamilton-Operatoren

$$\hat{H}_i = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_i + V(\mathbf{r}_i). \quad (2.775)$$

$V(\mathbf{r}_i)$ ist das bekannte Wandpotential

$$V(\mathbf{r}_i) = \begin{cases} 0, & \mathbf{r}_i \in V, \\ \infty, & \text{sonst,} \end{cases} \quad (2.776)$$

wobei V das Volumen ist, auf das die Teilchen beschränkt sind. Hier sei $V = L^3$ ein Würfel der Kantenlänge L . Dies entspricht einem 3D-Potentialtopf, s. Absch. 2.3.2. Die Einteilchen - Lösung lautet

$$\psi(\mathbf{r}_i) \propto \sin(k_{3i-2}x) \sin(k_{3i-1}y) \sin(k_{3i}z). \quad (2.777)$$

Hierbei gilt für $k_{3i-2}, k_{3i-1}, k_{3i}$ die Randbedingung

$$\frac{L p_i}{\hbar} = k_i L = n_i \pi. \quad (2.778)$$

mit $n_i \in \mathbb{N}$ mit $n \geq 1$. $p_i = \hbar k_i$ ist der Impuls. Die Teilchen dringen nicht in die Wand ein, haben also keine potentielle Energie. Somit gilt für die Gesamtenergie des Systems

$$E = \frac{1}{2m} \sum_{i=1}^{3N} p_i^2. \quad (2.779)$$

Um die mikrokanonische Zustandssumme des idealen Gases zu bestimmen, geht man von $\delta E = E$ aus:

$$\Omega(E, V, N) = \sum_{E_r < E} \dots \sum_{n_1=1,2,\dots, E_r < E} \dots \sum_{n_{3N}=1,2,\dots, E_r < E} \approx \frac{1}{2^{3N}} \int_{E_r < E} \dots \int_{E_r < E} dn_1 \dots dn_{3N}. \quad (2.780)$$

Wegen $\overline{n_i} \gg 1$ wurden im letztem Schritt die Summen durch Integrale ersetzt. Der Faktor $1/2^{3N}$ entsteht durch die Einbeziehung negativer Werte bei der Integration. Man kann weiter umformen

$$\Omega(E, V, N) = \frac{V^N}{(2\pi\hbar)^{3N}} \int \sum_{p_1^2 < 2mE} \dots \int \sum_{p_{3N}^2 < 2mE} dp_1 \dots dp_{3N}. \quad (2.781)$$

Das verbleibende $3N$ -dimensionale Integral ist das Volumen einer $3N$ -dimensionalen Kugel mit Radius $\sqrt{2mE}$, sodass man Glg. (A.303) einsetzen kann:

$$\Omega(E, V, N) = \frac{V^N}{(2\pi\hbar)^{3N}} \frac{2\pi^{3N/2}}{(3N/2)!} (2m)^{3N/2} E^{3N/2} = 2 \left[\frac{2\pi m}{(2\pi\hbar)^2} \right]^{3N/2} \frac{E^{3N/2}}{(3N/2)!} V^N. \quad (2.782)$$

Mit der Stirling-Formel Glg. (A.125) erhält man

$$\begin{aligned}\Omega(E, V, N) &\approx \sqrt{\frac{2}{\pi}} \left[\frac{4\pi m}{(2\pi\hbar)^2} \right]^{3N/2} e^{3N/2} \left(\frac{2}{3N} \right)^{\frac{3N}{2} + \frac{1}{2}} E^{3N/2} V^N \\ &= \frac{2}{\sqrt{3\pi N}} \left[\frac{8\pi me^{5/3}}{3(2\pi\hbar)^2} \right]^{3N/2} V^N \left(\frac{E}{N} \right)^{3N/2}.\end{aligned}\quad (2.783)$$

Dieses Ergebnis ist noch nicht korrekt, es ist noch eine wichtige Modifikation anzubringen. Die N Teilchen sind quantenmechanisch nicht unterscheidbar, was bedeutet, dass sich beim Vertauschen zweier Teilchen nichts ändert. Es sind also jeweils $N!$ Zustände gleich, weshalb man

$$\Omega \rightarrow \frac{\Omega}{N!} \quad (2.784)$$

ersetzen muss. Es gilt damit

$$\Omega(E, V, N) = \sqrt{\frac{2}{3\pi^2}} \frac{1}{N} \left[\frac{8\pi me^{5/3}}{3(2\pi\hbar)^2} \right]^{3N/2} \left(\frac{V}{N} \right)^N \left(\frac{E}{N} \right)^{3N/2}. \quad (2.785)$$

Für die Entropie folgt

$$\begin{aligned}\frac{S(E, V, N)}{k_B} &= \frac{1}{2} \ln \left(\frac{2}{3\pi^2} \right) - \ln(N) + \frac{3N}{2} \ln(c) + N \ln \left(\frac{V}{N} \right) + \frac{3N}{2} \ln \left(\frac{E}{N} \right) \\ &\approx \frac{3N}{2} \ln(c) + N \ln \left(\frac{V}{N} \right) + \frac{3N}{2} \ln \left(\frac{E}{N} \right) - \ln(N) \\ &\approx \frac{3N}{2} \ln(c) + N \ln \left(\frac{V}{N} \right) + \frac{3N}{2} \ln \left(\frac{E}{N} \right)\end{aligned}\quad (2.786)$$

mit

$$c := \frac{2me^{5/3}}{3\pi\hbar^2}. \quad (2.787)$$

Man erhält die *kalorische Zustandsgleichung idealer Gase*

$$\frac{1}{k_B T} = \frac{\partial \ln(\Omega(E, V, N))}{\partial E} = \frac{3}{2} \frac{N}{E} \Rightarrow E = \frac{3}{2} N k_B T. \quad (2.788)$$

Weiterhin gilt

$$\frac{p}{T} = k_B \frac{\partial S(E, V, N)}{\partial V} = k_B N \frac{1}{V}. \quad (2.789)$$

Dies ergibt die *thermische Zustandsgleichung idealer Gase*

$$pV = Nk_B T. \quad (2.790)$$

Für die isochore Wärmekapazität des idealen Gases folgt mit Glg. (2.788)

$$C^{(V)} = \frac{3}{2} k_B N. \quad (2.791)$$

Somit kann man für die Energie E notieren

$$E = C^{(V)} T. \quad (2.792)$$

Für die isobare spezifische Wärmekapazität gilt mit Glg. (2.700)

$$C^{(p)} = T \left(\frac{\partial S}{\partial T} \right)_p = k_B TN \frac{\partial}{\partial T} \left(\ln \left(\frac{k_B T}{p} \right) + \frac{3}{2} \ln \left(\frac{3}{2} N k_B T \right) \right) = k_B TN \left(\frac{1}{T} + \frac{3}{2} \frac{1}{T} \right) = \frac{5}{2} N k_B. \quad (2.793)$$

Für die Enthalpie H des idealen Gases folgt

$$H = E + pV = \frac{5}{2} N k_B T = C^{(p)} T. \quad (2.794)$$

Weiterhin gilt

$$c^{(p)} - c^{(v)} = \frac{N}{m} k_B = \frac{N}{m N_A} R = R_s. \quad (2.795)$$

Eine äquivalente Formulierung von Glg. (2.790) ist

$$p = \frac{N k_B T}{V} = \frac{n N_A k_B T}{V} = \frac{n R T}{V} = \frac{m R T}{V M} = \varrho R_s T \quad (2.796)$$

mit der individuellen Gaskonstante $R_s := \frac{R}{M}$.

Die Zustandsgleichung gilt für ein Gas, nicht für ein Gasgemisch. Die Luft besteht jedoch aus verschiedenen Gasen. Nun soll die Zustandsgleichung auf solch ein Gemisch erweitert werden. Sei also ein Gas mit $N \in \mathbb{N}$ Komponenten gegeben. Für $1 \leq i \leq N$ sei p_i der Partialdruck der i -ten Gaskomponente. Da keine WWen zwischen den Komponenten existieren, gilt dann:

$$p = \sum_{i=1}^N p_i = \sum_{i=1}^N \varrho_i R_s T = \frac{T R}{V} \sum_{i=1}^N \frac{m_i}{M_i} = T R \varrho \sum_{i=1}^N \frac{m_i}{m} \frac{1}{M_i}. \quad (2.797)$$

Mit der Definition

$$M := \frac{1}{\sum_{i=1}^N \frac{m_i}{m} \frac{1}{M_i}} \quad (2.798)$$

wird

$$p = \varrho \frac{R}{M} T = \varrho R_s T \quad (2.799)$$

auch für ein Gasgemisch. Die mittlere molare Masse nach Glg. (2.798) kann man einfach ausrechnen, indem man die Molmassen der Bestandteile mit ihren Volumenanteilen gewichtet:

$$M = \frac{1}{\sum_{i=1}^N \frac{m_i}{m} \frac{n_i}{n}} = \frac{\sum_{i=1}^N n_i M_i}{\sum_{i=1}^N n_i} = \sum_{i=1}^N \frac{n_i}{n} M_i, \quad (2.800)$$

hierbei ist n_i die Stoffmenge der i -ten Komponente und n die Gesamtstoffmenge. In Termen der Massendichten kann man notieren

$$M = \frac{m}{n} = \frac{m}{\sum_i \frac{m_i}{M_i}} = \frac{\varrho}{\sum_i \frac{\varrho_i}{M_i}} = \frac{1}{\frac{1}{\varrho} \sum_i \frac{\varrho_i}{M_i}}. \quad (2.801)$$

Für die molare Masse feuchter Luft M_h gilt

$$M_h = \frac{1}{\frac{\varrho_d}{M_d \varrho_h} + \frac{\varrho_v}{\varrho_h} \frac{1}{M_v}}. \quad (2.802)$$

Man hat also

$$\frac{\mathbf{I}}{M_h} = \frac{\mathbf{I}}{M_d} \left(\mathbf{I} - \frac{\varrho_v}{\varrho_h} \right) + \frac{\varrho_v}{\varrho_h} \frac{\mathbf{I}}{M_v}. \quad (2.803)$$

Die individuelle Gaskonstante feuchter Luft ist also

$$R_h = R_d \left[\mathbf{I} - \frac{\varrho_v}{\varrho_h} + \frac{\varrho_v}{\varrho_h} \frac{M_d}{M_v} \right]. \quad (2.804)$$

Man definiert weiter die *virtuelle Temperatur* T_v als diejenige Temperatur, bei der trockene Luft bei gleichem Druck die gleiche Dichte hätte wie feuchte Luft. Als Gleichung bedeutet dies

$$\begin{aligned} R_h \varrho T &= R_d \varrho T_v \Rightarrow T_v = \frac{R_h}{R_d} T = T \left(\mathbf{I} - \frac{\varrho_v}{\varrho_h} + \frac{\varrho_v}{\varrho_h} \frac{M_d}{M_v} \right) \\ &= T \left[\mathbf{I} + \frac{\varrho_v}{\varrho_h} \left(\frac{\mathbf{I}}{\varepsilon} - \mathbf{I} \right) \right]. \end{aligned} \quad (2.805)$$

Die Differenz

$$\Delta T_v := T_v - T = T \frac{\varrho_v}{\varrho_h} \left(\frac{\mathbf{I}}{\varepsilon} - \mathbf{I} \right) \quad (2.806)$$

bezeichnet man als *virtuellen Temperaturzuschlag*.

Nun sollen noch die *Feuchtemäße* besprochen werden. Die Dichte ϱ_v (Kondensationsprodukte werden hier vernachlässigt) bezeichnet man auch als *absolute Feuchte* und der Dampfdruck wurde bereits eingeführt. Zunächst wird die *relative Feuchte* U durch

$$U := \frac{p_v}{p_v^{(S)}} \quad (2.807)$$

mit p_v als Partialdruck des Wasserdampfes und $p_v^{(S)}$ als Sättigungsdampfdruck definiert. Man legt weiter die *spezifische Feuchte* q durch

$$q := \frac{\varrho_v}{\varrho} \quad (2.808)$$

fest. Das *Mischungsverhältnis* r wird durch

$$r := \frac{\varrho_v}{\varrho_d} \quad (2.809)$$

definiert. Ein hochgestelltes S an den Symbolen bedeutet, dass von Sättigung ausgegangen wird. Einige nützliche Umrechnungen lauten

$$\begin{aligned} q &= \frac{p_v R_h T}{R_v T p} = \frac{p_v R_h}{p R_v} = \frac{p_v}{p} \frac{R_h}{R_v} \left[\mathbf{I} - \frac{\varrho_v}{\varrho_h} + \frac{\varrho_v}{\varrho_h} \frac{M_d}{M_v} \right] \\ &= \frac{p_v}{p} (\varepsilon (\mathbf{I} - q) + q) = \frac{p_v}{p} (q (\mathbf{I} - \varepsilon') + \varepsilon') \\ \Rightarrow q \left(\mathbf{I} + (\varepsilon' - \mathbf{I}) \frac{p_v}{p} \right) &= \varepsilon' \frac{p_v}{p} \Rightarrow q = \frac{\varepsilon'}{\frac{p_v}{p} + \varepsilon' - \mathbf{I}}, \end{aligned} \quad (2.810)$$

$$r = \frac{\varrho_v}{\varrho_d} = \frac{p_v R_d T}{R_v T p_d} = \frac{p_v}{p_d} \varepsilon', \quad (2.811)$$

$$r = \frac{\varrho_v}{\varrho - \varrho_v} = \frac{q}{\mathbf{I} - q} = \frac{\frac{\varepsilon'}{\frac{p_v}{p} + \varepsilon' - \mathbf{I}}}{\mathbf{I} - \frac{\varepsilon'}{\frac{p_v}{p} + \varepsilon' - \mathbf{I}}} = \frac{\mathbf{I}}{\frac{p_v \varepsilon'}{p_v \varepsilon' + p - p_v} + \mathbf{I} - \frac{1}{\varepsilon'} - \mathbf{I}} = \frac{\varepsilon'}{\frac{p}{p_v} - \mathbf{I}}. \quad (2.811)$$

Häufige Näherungen sind

$$q \approx \frac{\varepsilon'}{\frac{p}{p_v} - 1} = r, \quad (2.812)$$

$$q \approx \varepsilon' \frac{p_v}{p}, \quad (2.813)$$

$$r \approx \varepsilon' \frac{p_v}{p}. \quad (2.814)$$

2.4.5 Klassische Systeme

Klassische Phasenraumkoordinaten sind kontinuierlich und daher statistisch schwer zu fassen. Leichter sind halbklassische Herleitungen, bei denen man von der QM ausgeht und anschließend den klassischen Übergang $\hbar \rightarrow 0$ durchführt.

N Teilchen seien in einem kubischen Volumen $V = L^3$ eingeschlossen. Für jede Wellenvektor-Komponente der Einteilchen-Wellenfunktionen gilt

$$k_n L = n\pi \Leftrightarrow k_n = \frac{n\pi}{L} \quad (2.815)$$

mit $n \in \mathbb{N}$ und $n \geq 1$. Integriert man über den gesamten k -Raum, kann man die Summen durch Integrale ersetzen:

$$\sum_k \dots = \frac{V^N}{(2\pi)^{3N}} \int \dots \int dk_1 \dots dk_{3N} \quad (2.816)$$

Den Faktor $1/2$ vor jedem Integral erhält man durch Einbeziehung negativer k -Werte bei der Integration. Im Impulsraum erhält man

$$\sum_k \dots = \frac{V^N}{(2\pi\hbar)^{3N}} \int \dots d^3 p. \quad (2.817)$$

Nun soll dies auf den Phasenraum verallgemeinert werden. Man betrachte ein Teilchen in einem 1D-Potentialtopf $0 \leq x \leq L$ mit $L > 0$, dort existieren Lösungen der SG der Form

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(n \frac{\pi}{L} x\right), \quad (2.818)$$

hierbei sei $n \in \mathbb{N}$ mit $n \geq 1$, die Energie-Eigenwerte sind durch

$$E_n = \frac{\hbar^2 n^2 \pi^2}{2mL^2} \quad (2.819)$$

gegeben. Für das Phasenraumvolumen $V(E)$ eines Zustandes mit der Energie E gilt

$$V(E) = \int_0^L \int_{p^2/2m \leq E} dp dx = L \sqrt{2mE}. \quad (2.820)$$

Für eine gegebene Energie $E \gg 1$ ist die Anzahl der Zustände $N(E)$ mit Eigenenergien $E_n \leq E$ näherungsweise gegeben durch

$$N(E) \approx \frac{L}{\pi\hbar} \sqrt{2mE}. \quad (2.821)$$

Man erhält also

$$\frac{V(E)}{N(E)} = \frac{2L\sqrt{2mE}}{\sqrt{2mE}} \frac{\pi\hbar}{L} = 2\pi\hbar. \quad (2.822)$$

Dieses Ergebnis gilt allgemein, das heißt auch bei komplizierteren Potentialen. Im Fall von f Freiheitsgraden nimmt ein Mikrozustand das Phasenraumvolumen $(2\pi\hbar)^f$ ein. Summiert man über alle Mikrozustände r und ersetzt

dies wieder durch ein Integral, erhält man

$$\sum_r \dots = \frac{1}{(2\pi\hbar)^f} \int \dots dx dp. \quad (2.823)$$

Es ergibt sich ein Mittelungsoperator

$$\sum_r P_r \dots = \frac{1}{(2\pi\hbar)^f} \int \varphi'(x, p) \dots dx dp \quad (2.824)$$

mit den Wahrscheinlichkeiten P_r der Mikrozustände und einer modifizierten Wahrscheinlichkeitsdichte $\varphi'(x, p)$.

2.4.5.1 Maxwell-Verteilung

Setzt man in Glg. (2.824) die kanonische Zustandssumme

$$P_r = \frac{1}{Z} \exp\left(-\frac{E_r}{k_B T}\right) \quad (2.825)$$

ein, erhält man

$$\frac{1}{Z} \sum_r \exp\left(-\frac{E_r}{k_B T}\right) \dots = \frac{1}{Z(2\pi\hbar)^f} \int \exp\left(-\frac{E(x, p)}{k_B T}\right) \dots dx dp \quad (2.826)$$

Hängt die Integration nur vom Impuls ab, folgt

$$\frac{1}{Z} \sum_r \exp\left(-\frac{E_r}{k_B T}\right) \dots = \frac{V}{Z(2\pi\hbar)^f} \int \exp\left(-\frac{E(p)}{k_B T}\right) \dots dp \quad (2.827)$$

Man interpretiert

$$\varphi(p) = \frac{V}{Z(2\pi\hbar)^f} \exp\left(-\frac{E(p)}{k_B T}\right) \quad (2.828)$$

als Wahrscheinlichkeitsdichte. Nun betrachtet man genau ein Teilchen und nimmt kartesische Impulse an, sodass gilt

$$\varphi(p) = \frac{4\pi V}{z(2\pi\hbar)^3} \exp\left(-\frac{p^2}{2mk_B T}\right) p^2 \quad (2.829)$$

Für die kanonische Zustandssumme z dieses einzelnen Teilchens folgt

$$z(T, V) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} V \int_0^\infty 4\pi \exp\left(-\frac{p^2}{2mk_B T}\right) p^2 dp = \frac{V}{2\pi^2 \hbar^3} \int_0^\infty \exp\left(-\frac{p^2}{2mk_B T}\right) p^2 dp. \quad (2.830)$$

Mit Glg. (A.113) folgt

$$z(T, V) = \frac{V}{8\pi^2 \hbar^3} \sqrt{\pi (2mk_B T)^3} = \frac{V}{\hbar^3} \left(\frac{mk_B T}{2\pi}\right)^{3/2}. \quad (2.831)$$

Damit folgt

$$\varphi(p) = \frac{\hbar^3}{V} \left(\frac{2\pi}{mk_B T}\right)^{3/2} \frac{4\pi V}{(2\pi\hbar)^3} \exp\left(-\frac{p^2}{2mk_B T}\right) p^2 = \sqrt{\frac{2}{m^3 \pi k_B^3 T^3}} \exp\left(-\frac{p^2}{2mk_B T}\right) p^2. \quad (2.832)$$

Die Geschwindigkeits-Verteilung lautet somit

$$\rho(v) = \sqrt{\frac{2m^3}{\pi k_B^3 T^3}} \exp\left(-\frac{mv^2}{2k_B T}\right) v^2. \quad (2.833)$$

Dies ist die *Maxwell-Verteilung*. Das Maximum v_{\max} erhält man aus der Bedingung

$$0 = 2ve^{-\frac{mv^2}{2k_B T}} - \frac{mv^3}{k_B T} e^{-\frac{mv^2}{2k_B T}} \Leftrightarrow v_{\max} = \sqrt{\frac{2k_B T}{m}}. \quad (2.834)$$

Setzt man für m die molare Masse trockener Luft sowie 20° C ein, erhält man $v_{\max} \approx 4 \cdot 10^2 \text{ m/s}$. Der Erwartungswert dieser Verteilung ist

$$\bar{v} = \sqrt{\frac{2m^3}{\pi k_B^3 T^3}} \int_0^\infty e^{-\frac{mv^2}{2k_B T}} v^3 dv. \quad (2.835)$$

Mit $C = \frac{m}{2k_B T}$ in Glg. (A.114) folgt

$$\bar{v} = \sqrt{\frac{2m^3}{\pi k_B^3 T^3}} \frac{2k_B^2 T^2}{m^2} = \sqrt{\frac{8k_B T}{\pi m}}. \quad (2.836)$$

Die entsprechende vektorielle Wahrscheinlichkeitsdichte $\rho(\mathbf{v})$ ist

$$\rho(\mathbf{v}) = \left(\frac{m}{2\pi k_B T}\right)^{3/2} \exp\left(-\frac{mv^2}{2k_B T}\right). \quad (2.837)$$

Wichtig ist außerdem der Erwartungswert der Relativgeschwindigkeit zweier Teilchen gleicher Masse. Für diese gilt

$$\mathbf{v}_{\text{rel}} = \mathbf{v}_2 - \mathbf{v}_1. \quad (2.838)$$

Für die Wahrscheinlichkeitsdichte $\rho(\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2)$ zweier Teilchengeschwindigkeiten $\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2$ gilt

$$\rho(\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2) = \left(\frac{m}{2\pi k_B T}\right)^3 \exp\left(-\frac{m(v_1^2 + v_2^2)}{2k_B T}\right). \quad (2.839)$$

Hieraus erhält man mit den Abkürzungen

$$a := \left(\frac{m}{2\pi k_B T}\right)^{3/2}, \quad (2.840)$$

$$b := \frac{m}{2k_B T} \quad (2.841)$$

die Relation

$$\begin{aligned} \rho(\mathbf{v}_{\text{rel}}) &= a^2 \int \exp\left[-b(v_1^2 + v_2^2 + v_{\text{rel}}^2 + 2v_{1,x}v_{\text{rel},x} + 2v_{1,y}v_{\text{rel},y} + 2v_{1,z}v_{\text{rel},z})\right] dv_1^3 \\ &= a^2 e^{-bv_{\text{rel}}^2} \int \exp\left[-2b(v_1^2 + v_{1,x}v_{\text{rel},x} + v_{1,y}v_{\text{rel},y} + v_{1,z}v_{\text{rel},z})\right] dv_1^3 \\ &= a^2 e^{-bv_{\text{rel}}^2} \int \exp\left[-2b\left((v_{1,x} + \frac{v_{\text{rel},x}}{2})^2 + \dots - \frac{v_{\text{rel}}^2}{4}\right)\right] dv_1^3 \\ &= a^2 e^{-\frac{b}{2}v_{\text{rel}}^2} \int e^{-2bv_1^2} dv_1^3 = ae^{-\frac{b}{2}v_{\text{rel}}^2} \int ae^{-b(\sqrt{2}v_1)^2} dv_1^3 = ae^{-\frac{b}{2}v_{\text{rel}}^2} \frac{1}{2^{3/2}}. \end{aligned} \quad (2.842)$$

Der letzte Schritt folgt aus der Normierung der Verteilung Glg. (2.837). Somit gilt für die Wahrscheinlichkeitsdichte des Betrags der Relativgeschwindigkeit

$$\rho(v_{\text{rel}}) = \frac{4\pi a}{2^{3/2}} e^{-\frac{b}{2}v_{\text{rel}}^2} v_{\text{rel}}^2. \quad (2.843)$$

Für den Erwartungswert folgt

$$\overline{v_{\text{rel}}} = \int_0^\infty \frac{4\pi a}{2^{3/2}} e^{-\frac{b}{2} v_{\text{rel}}^2} v_{\text{rel}}^3 dv_{\text{rel}} = \sqrt{2} \int_0^\infty 4\pi a e^{-bv_{\text{rel}}^2} v_{\text{rel}}^3 dv_{\text{rel}} = \sqrt{2}\bar{v}. \quad (2.844)$$

2.4.5.2 Kinetisches Gasmodell

Bei einem Streuexperiment fällt eine Stromdichte j (einfallende Teilchen pro Fläche und Zeit) auf ein Ziel. Multipliziert man die Stromdichte mit einer Fläche, erhält man einen Teilchenstrom. Man definiert den *Wirkungsquerschnitt* σ durch

$$j\sigma := \frac{dN_{\text{str}}}{dt}, \quad (2.845)$$

er entspricht also der Fläche, an der effektiv Teilchen gestreut werden. Dies wird nun auf ein Gas aus Teilchen angewendet, die harte Kugeln mit Durchmesser d sind. Es gilt in diesem Fall

$$\sigma = \pi d^2. \quad (2.846)$$

Ein Teilchen lege den Weg l zurück, dabei stößt es an N Teilchen:

$$N = n\sigma l \quad (2.847)$$

Dabei ist n die Teilchendichte und σl ist das Volumen eines Zylinders mit Radius d , in dem Stoßpartner getroffen werden. Für die *mittlere Stoßzeit* τ gilt somit

$$1 = n\sigma\overline{v_{\text{rel}}}\tau \stackrel{(2.844)}{\Leftrightarrow} \tau = \frac{1}{\sqrt{2}n\sigma\bar{v}}. \quad (2.848)$$

Für die mittlere freie Weglänge λ folgt

$$\lambda = \frac{1}{\sqrt{2}n\sigma}. \quad (2.849)$$

Inhomogene Eigenschaften eines Gases werden durch Transportprozesse angeglichen. Dies soll hier anhand eines einfachen Modells nachvollzogen werden, die ermittelten Werte für die Transportkonstanten sind als Schätzungen zu verstehen. Sei q also eine beliebige Eigenschaft des Gases. q hängt nur von z ab, $q = q(z)$. Die Geschwindigkeitsverteilung sei isotrop, was hier dadurch repräsentiert werde, dass gerade $1/6$ aller Teilchen in jede kartesische Koordinatenrichtung fliegt. Dabei transportieren sie ihre Eigenschaften im Mittel eine Länge λ . Somit erhält man für die Stromdichte j_z bei $z = z_0$

$$j_z = \frac{\text{Transport}}{\text{Zeit} \times \text{Fläche}} = \frac{1}{6} ((n\bar{v}q)(z_0 - \lambda) - (n\bar{v}q)(z_0 + \lambda)) \approx \frac{1}{6} \frac{\partial (n\bar{v}q)}{\partial z} (-2\lambda) = -\frac{\lambda}{3} \frac{\partial (n\bar{v}q)}{\partial z}. \quad (2.850)$$

Dies kann man notieren als

$$j_z = -C \frac{\partial q}{\partial z}, \quad (2.851)$$

wenn man annimmt, dass q nicht mit anderen Größen korreliert. Für $q = 1$ und homogenes v erhält man *Diffusion*,

$$C \rightarrow D \approx \frac{\bar{v}\lambda}{3}, \quad (2.852)$$

D ist die *Diffusionskonstante*. Mit der Kontinuitätsgleichung

$$\frac{\partial n}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial z} (j_z) \quad (2.853)$$

folgt die *Diffusionsgleichung*

$$\frac{\partial n}{\partial t} = D \frac{\partial^2 n}{\partial z^2}. \quad (2.854)$$

bzw. in 3D

$$\frac{\partial n}{\partial t} = D \Delta n. \quad (2.855)$$

Setzt man $q = mu$ ein mit u als Strömungsgeschwindigkeit in x-Richtung, so untersucht man die Impulsstromdichte. u erhält man durch Mittelung der Teilchengeschwindigkeiten, dabei soll $u \ll \bar{v}$ gelten.

$$\begin{aligned} j_z &= \frac{\text{Impuls}}{\text{Zeit x Fläche}} = \frac{1}{6} ((n\bar{v}mu)(z_0 - \lambda) - (n\bar{v}mu)(z_0 + \lambda)) \approx \frac{1}{6} \frac{\partial(n\bar{v}mu)}{\partial z} (-2\lambda) \\ &= -\frac{\lambda m n \bar{v}}{3} \frac{\partial u}{\partial z}, \end{aligned} \quad (2.856)$$

wobei \bar{v} und n als homogen angenommen werden. Befindet sich das Geschwindigkeitsfeld $u(z)$ zwischen zwei horizontalen Platten, wobei die untere ortsfest ist und die obere mit konstanter, positiver Geschwindigkeit in x-Richtung bewegt wird, so muss pro Fläche A eine Kraft

$$\frac{F}{A} = \eta \frac{\partial u}{\partial z} \quad (2.857)$$

aufgewendet werden, um das Strömungsfeld aufrechtzuerhalten. Diese Gleichung definiert die *dynamische Viskosität* η . Der horizontale Impuls fließt hierbei in $-z$ -Richtung, bei Stationarität gilt somit

$$\eta \approx \frac{n \lambda \bar{v} m}{3}. \quad (2.858)$$

Innere Reibung in einem Fluid ist also diffusiver Impulstransport aufgrund der Viskosität. Ist c die Wärmekapazität pro Teilchen, ist cT die Wärmeenergie pro Teilchen. Setzt man $q = cT$ an, erhält man

$$\begin{aligned} j_z &= \frac{\text{Wärme}}{\text{Zeit x Fläche}} = \frac{1}{6} ((n\bar{v}cT)(z_0 - \lambda) - (n\bar{v}cT)(z_0 + \lambda)) \approx \frac{1}{6} \frac{\partial(n\bar{v}cT)}{\partial z} (-2\lambda) \\ &= -\frac{\lambda c n \bar{v}}{3} \frac{\partial T}{\partial z}, \end{aligned} \quad (2.859)$$

Hieraus folgt

$$\frac{\partial T}{\partial t} \approx -\frac{\lambda \bar{v}}{3} \frac{\partial T}{\partial z}. \quad (2.860)$$

Die Größe

$$\alpha \approx \frac{\lambda \bar{v}}{3} \quad (2.861)$$

nennt man *Temperaturleitfähigkeit*, diese ist im kinetischen Gasmodell gleich der Diffusionskonstanten. Auch für die Wärmestromdichte lässt sich eine Kontinuitätsgleichung anschreiben, solange keine neuen Freiheitsgrade in der Materie angeregt werden:

$$\begin{aligned} \frac{\partial(ncT)}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{j}_{\text{Wärme}} &= 0 \\ \Leftrightarrow \frac{\partial T}{\partial T} &= \alpha \Delta T \end{aligned} \quad (2.862)$$

Dies ist die *Wärmeleitungsgleichung*.

2.4.6 Phasenübergänge

Eine Phase ist eine makroskopische Erscheinungsform von Materie, beispielsweise fest, flüssig oder gasförmig. Jedoch auch innerhalb eines Festkörpers kann es unterschiedliche Phasen geben, die sich beispielsweise in ihren magnetischen Eigenschaften oder Gitterstrukturen unterscheiden. Zunächst geht man von einem Zwei - Phasen - Gleichgewicht aus, beispielsweise bestehend aus flüssigem Wasser und Wasserdampf. Die flüssige Phase sei mit 1 bezeichnet, die gasförmige Phase mit 2. Das Gesamtsystem befindet sich im thermodynamischen Gleichgewicht, sodass (p, T) in beiden Systemen gleich ist. Die Subsysteme sind offen, es findet also Teilchenaustausch statt. Die

Gleichgewichtsbedingung nach Glg. (2.694) lautet dann

$$\mu_1(T, p) = \mu_2(T, p), \quad (2.863)$$

wobei μ das chemische Potential bezeichnet. Man interessiert sich nun für denjenigen Druck $p_S(T)$, bei dem beide Phasen koexistieren. Dies bedeutet

$$\mu_1(T, p_S(T)) = \mu_2(T, p_S(T)). \quad (2.864)$$

Dies ist eine implizite Gleichung an die unbekannte Funktion $p_S(T)$. Man differenziert die Gleichung total nach T :

$$\frac{\partial \mu_1(T, p)}{\partial T} + \frac{\partial \mu_1(T, p)}{\partial p} \frac{dp_S(T)}{dT} = \frac{\partial \mu_2(T, p)}{\partial T} + \frac{\partial \mu_2(T, p)}{\partial p} \frac{dp_S(T)}{dT} \quad (2.865)$$

Nun setzt man die Glg.en (2.753) und (2.755) ein:

$$-\frac{S_1}{N_1} + \frac{V_1}{N_1} \frac{dp_S}{dT} = -\frac{S_2}{N_2} + \frac{V_2}{N_2} \frac{dp_S}{dT} \quad (2.866)$$

Es gilt für eine Zustandsgröße Z

$$\frac{Z_i}{N_i} = \frac{Z_i}{m_i} \frac{m_i}{N_i} = z_i M_i \quad (2.867)$$

mit der Masse m_i und der spezifischen Größe

$$z_i := \frac{Z_i}{m_i}. \quad (2.868)$$

Damit folgt mit den Definitionen $\Delta s := s_2 - s_1$ und $\Delta v := v_2 - v_1$

$$\Delta s = \Delta v \frac{dp_S}{dT}. \quad (2.869)$$

Man kann noch die spezifische Phasenübergangswärme

$$c := T \Delta s \quad (2.870)$$

verwenden:

$$\frac{dp_S}{dT} = \frac{c}{T \Delta v} \quad (2.871)$$

Dies ist die *Clausius-Clapeyron-Gleichung*. Diese Gleichung ist exakt lösbar für einfache Funktionen $c = c(T)$. Für das Volumen pro Teilchen v gilt

$$v = \frac{V}{N} = \frac{V}{n N_A} = \frac{V M}{M n N_A} = \frac{M}{N_A \varphi}, \quad (2.872)$$

dies ist mit der Dichte $\varphi = \varphi_l$ beispielsweise auf eine Flüssigkeit anwendbar. Für ein ideales Gas gilt

$$v = \frac{R_s T}{p} = \frac{R_s T}{p_S}, \quad (2.873)$$

somit folgt

$$T \Delta v = \frac{R_s T^2}{p_S} - \frac{MT}{N_A \varphi_l} \Rightarrow \frac{1}{T \Delta v} = \frac{p_S N_A \varphi_l}{N_A \varphi_l R_s T^2 - p_S M T}. \quad (2.874)$$

Somit kann man im Fall einer Flüssigkeit und eines idealen Gases notieren

$$\frac{dp_S}{dT} = \frac{cp_S N_A \varphi_l}{N_A \varphi_l R_s T^2 - p_S M T}. \quad (2.875)$$

Eine in der Meteorologie wird häufig die Näherung

$$T \Delta v \approx \frac{R_s T^2}{p_S} \quad (2.876)$$

gemacht, damit folgt

$$\frac{1}{p_S} \frac{dp_S}{dT} = \frac{c}{R_s T^2}. \quad (2.877)$$

Im Falle einer temperaturunabhängigen Phasenübergangsenthalpie c kann man dies analytisch lösen, in diesem Fall gilt

$$p_S = p_S(T) = k \exp\left(-\frac{T_0}{T}\right), \quad (2.878)$$

denn damit folgt

$$\frac{dp_S}{dt} = \frac{T_0}{T^2} p_S. \quad (2.879)$$

Dies impliziert

$$T_0 = \frac{c}{R_s}, \quad (2.880)$$

die Konstante k bleibt an dieser Stelle unbestimmt.

In Bezug auf die Atmosphäre interessiert vorwiegend die Sättigungsdampfdruckkurve von Wasser. Da die Verdampfungs- bzw. Sublimationswärme von Wasser in analytisch nicht genau bestimmbarer Weise temperaturabhängig ist, liegt für Wasser kein exakter Ausdruck für die Sättigungsdampfdruckkurve vor. Abhilfe schaffen hier die in [11] empfohlenen Formeln. Über flüssigem Wasser gilt für $T \in [-45, 60]^\circ \text{C}$

$$e(t) = 6,112 \exp\left(\frac{17,62t}{243,12+t}\right), \quad (2.881)$$

über Eis gilt für $T \in [-65, 0]^\circ \text{C}$

$$e(t) = 6,112 \exp\left(\frac{22,46t}{272,62+t}\right), \quad (2.882)$$

wobei t die Temperatur in $^\circ \text{C}$ und e den jeweiligen Sättigungsdampfdruck in hPa bezeichnet.

2.4.7 Photonengas

Man stelle sich einen Hohlraum der Temperatur T vor, der im Gleichgewicht mit elektromagnetischer Strahlung steht. Gesucht ist die spektrale Energiedichte $u(\omega)$ im Hohlraum. Die Eigenschaften elektromagnetischer Wellen wurden in Absch. 2.2.1 besprochen. Es handelt sich um Transversalwellen. Zeigt der Wellenvektor in z-Richtung, $\mathbf{k} = k \mathbf{e}_z$, folgt im Fall stehender Wellen für das elektrische Feld

$$\mathbf{E}(z, t) = (E_{0,x} \mathbf{e}_x + E_{0,y} \mathbf{e}_y) \sin(kz) \sin(\omega t). \quad (2.883)$$

Eventuelle Phasen wurden vernachlässigt. Das B-Feld kann hieraus bestimmt werden. Der Hohlraum sei kubisch mit dem Volumen $V = L^3$, weiter seien die Wände metallisch. In diesem Fall verschwindet die Parallelkomponente des elektrischen Feldes an der Oberfläche, denn sonst würden Ströme angeregt und Energie würde dissipiert. Hieraus folgen die diskreten k -Werte

$$k_i L = i\pi \Leftrightarrow k_i = \frac{\pi}{L} i \quad (2.884)$$

mit $i \in \mathbb{N}$ und $i \geq 1$, negative Werte von i müssen vernachlässigt werden, weil dadurch keine neuen Lösungen entstehen. Summen über k_i -Werte können wieder durch Integrale ersetzt werden:

$$\sum_{k_i} \dots = \frac{L}{\pi} \int_0^\infty \dots dk = \frac{L}{2\pi} \int_{-\infty}^\infty \dots dk. \quad (2.885)$$

Für eine Summe über alle Moden im Hohlraum gilt

$$\sum_{m=1}^2 \sum_{\mathbf{k}} \dots = \frac{2V}{(2\pi)^3} \int \dots d^3 k. \quad (2.886)$$

m läuft dabei über die zwei möglichen Polarisationsrichtungen. Für die Energien $E = E(\mathbf{k}, m)$ gilt nach Glg. (2.200)

$$E(\mathbf{k}, m) = \hbar\omega(k) = \hbar ck. \quad (2.887)$$

Ein Mikrozustand r des Systems ist durch die Angabe der Besetzungszahlen

$$r = (n_{\mathbf{k}, m}) \quad (2.888)$$

gegeben, also die Anzahl der Anregungen für jede Schwingungsmodus, eine Anregung ist ein Photon. Für die Energie $E_r(V)$ des Mikrozustandes ergibt sich

$$E_r(V) = \sum_{m, \mathbf{k}} \hbar\omega(k) n_{\mathbf{k}, m} = \hbar c \sum_{\mathbf{k}, m} k n_{\mathbf{k}, m}. \quad (2.889)$$

Nun sind die mittleren Besetzungszahlen $\bar{n}_{\mathbf{k}, m}$ zu ermitteln. Hierfür geht man aus von der großkanonischen Zustandssumme eines Systems ohne Polaristionsfreiheitsgrad, also $m = 1$:

$$\begin{aligned} Y &= \sum_r \exp[-\beta(E_r - \mu N_r)] = \sum_{n_{\mathbf{p}_1}=0}^{\infty} \exp[-\beta(E_{\mathbf{p}_1} - \mu) n_{\mathbf{p}_1}] \cdot \sum_{n_{\mathbf{p}_2}=0}^{\infty} \exp[-\beta(E_{\mathbf{p}_2} - \mu) n_{\mathbf{p}_2}] \cdot \dots \\ &\stackrel{(A.7)}{=} \prod_{\mathbf{p}} \frac{1}{1 - \exp(-\beta(E_{\mathbf{p}} - \mu))}. \end{aligned} \quad (2.890)$$

Es folgt

$$\begin{aligned} \bar{n}_{\mathbf{p}_i} &= \frac{1}{Y} \sum_r n_{\mathbf{p}_i} \exp[-\beta(E_r - \mu N_r)] = \frac{1}{Y} \sum_{n_{\mathbf{p}_1}=0}^{\infty} \dots \sum_{n_{\mathbf{p}_i}=0}^{\infty} \dots n_{\mathbf{p}_i} \exp[-\beta(E_{\mathbf{p}_i} - \mu) n_{\mathbf{p}_i}] \dots \\ &= \frac{1}{Y} \sum_{n_{\mathbf{p}_i}=0}^{\infty} \dots \left(\frac{1}{\beta} \frac{\partial}{\partial \mu} \sum_{n_{\mathbf{p}_i}=0}^{\infty} \exp[-\beta(E_{\mathbf{p}_i} - \mu) n_{\mathbf{p}_i}] \right) \dots = \frac{1}{Y} \sum_{n_{\mathbf{p}_i}=0}^{\infty} \dots \left(\frac{1}{\beta} \frac{\partial}{\partial \mu} \frac{1}{1 - \exp[-\beta(E_{\mathbf{p}_i} - \mu)]} \right) \dots \\ &= \frac{1}{Y} \sum_{n_{\mathbf{p}_i}=0}^{\infty} \dots \left(\frac{\exp[-\beta(E_{\mathbf{p}_i} - \mu)]}{(1 - \exp[-\beta(E_{\mathbf{p}_i} - \mu)])^2} \right) \dots = \frac{\exp[-\beta(E_{\mathbf{p}_i} - \mu)]}{1 - \exp[-\beta(E_{\mathbf{p}_i} - \mu)]}. \end{aligned} \quad (2.891)$$

Dies ist die *Bose-Verteilung*, sie gilt für Teilchen mit ganzzahligem Spin:

$$\bar{n}_{\mathbf{p}} = \frac{1}{e^{\beta(E_{\mathbf{p}} - \mu)} - 1} \quad (2.892)$$

Die Energien $E_r(V)$ hängen nicht von der Phononenanzahl N ab, daher gilt

$$\mu = \frac{\partial E_r(V)}{\partial N} = 0, \quad (2.893)$$

das chemische Potential verschwindet. Somit gilt

$$\bar{n}_{k,m} = \frac{\mathbf{I}}{\exp(\beta E_k) - \mathbf{I}}. \quad (2.894)$$

Es folgt

$$\begin{aligned} E(T, V) = \overline{E_r(T, V)} &= \sum_{m,k} E_k \bar{n}_k = \frac{2V}{(2\pi)^3} \int \frac{\hbar ck}{\exp(\beta \hbar ck) - \mathbf{I}} d^3 k = \frac{2V}{(2\pi)^3} 4\pi \int_0^\infty \frac{\hbar ck^3}{\exp(\beta \hbar ck) - \mathbf{I}} dk \\ &= V \int_0^\infty \underbrace{\frac{\hbar}{c^3 \pi^2} \frac{\omega^3}{\exp(\beta \hbar \omega) - \mathbf{I}} d\omega}_{=u(\omega)}. \end{aligned} \quad (2.895)$$

$$u(\omega) = \frac{\hbar}{\pi^2 c^3} \frac{\omega^3}{\exp\left(\frac{\hbar\omega}{k_B T}\right) - \mathbf{I}}. \quad (2.896)$$

Dies ist das *Planck'sche Strahlungsgesetz*. Die Vorstellungen dieses Abschnitts sind sehr speziell, jedoch gilt die Planck'sche Verteilung immer, wenn Materie der Temperatur T mit elektromagnetischer Strahlung im Gleichgewicht steht. Von diesem Gleichgewicht ist aufgrund der hohen Geschwindigkeit der Wellen (Lichtgeschwindigkeit) immer auszugehen. Es kann jedoch Abweichungen im Spektrum geben, beispielsweise Absorptionslinien. Innerhalb eines Hohlraums im thermischen Gleichgewicht ist die Strahlung isotrop, daher gilt für die spektrale Strahldichte

$$J(\omega) = \frac{u(\omega)}{4\pi} c = \frac{\hbar}{4\pi^3 c^2} \frac{\omega^3}{\exp\left(\frac{\hbar\omega}{k_B T}\right) - \mathbf{I}}. \quad (2.897)$$

Die spektrale Intensität $I(\omega)$ einer strahlenden Oberfläche berechnet berechnet sich daraus zu

$$I(\omega) = \int_{\vartheta=0}^{\pi/2} \int_{\varphi=0}^{2\pi} J(\omega) \cos(\vartheta) \sin(\vartheta) d\vartheta d\varphi = 2\pi \frac{\mathbf{I}}{2} J(\omega) = \frac{\hbar}{4\pi^2 c^2} \frac{\omega^3}{\exp\left(\frac{\hbar\omega}{k_B T}\right) - \mathbf{I}}. \quad (2.898)$$

Integriert man dies über das gesamte Spektrum, folgt für die abgestrahlte Leistungsdichte

$$\frac{P}{A} = \int_0^\infty I(\omega) d\omega = \frac{\hbar}{4\pi^2 c^2} \int_0^\infty \frac{\omega^3}{\exp\left(\frac{\hbar\omega}{k_B T}\right) - \mathbf{I}} d\omega = \frac{k_B^4 T^4}{4\pi^2 c^2 \hbar^3} \int_0^\infty \frac{x^3}{e^x - \mathbf{I}} dx \quad (2.899)$$

Mit Glg. (A.107) folgt

$$P = P(T) = \frac{k_B^4 \pi^2}{6 \circ c^2 \hbar^3} T^4. \quad (2.900)$$

Dies ist das *Stefan-Boltzmann-Gesetz*, man definiert

$$\sigma := \frac{k_B^4 \pi^2}{6 \circ c^2 \hbar^3} \quad (2.901)$$

als die *Stefan-Boltzmann-Konstante*. Reale Körper emittieren bei einer Temperatur T in die durch ϑ und φ vorgegebene Richtung bei einer Kreisfrequenz ω eine von $J(\omega, T)$ um den Faktor

$$\varepsilon = \varepsilon(\omega, T, \vartheta, \varphi) \quad (2.902)$$

abweichende spektrale Strahldichte:

$$J_{\text{real}}(\omega, T, \vartheta, \varphi) = \varepsilon(\omega, T, \vartheta, \varphi) J(\omega, T). \quad (2.903)$$

Den Faktor ε bezeichnet man als *Emissivität*. Man stelle sich eine kleine Fläche dA auf der inneren Oberfläche des Hohlraums vor. Diese Fläche absorbiert eine Leistungsdichte

$$\frac{dP_{\text{abs}}}{dA} = \int_{\omega=0}^{\infty} \int_{\vartheta=0}^{\pi/2} \int_{\varphi=0}^{2\pi} a(\omega, T, \vartheta, \varphi) J(\omega, T) \cos(\vartheta) \sin(\vartheta) d\varphi d\vartheta d\omega, \quad (2.904)$$

hierbei wurde der Absorptionskoeffizient $a(\omega, T, \vartheta, \varphi)$ eingeführt. Da von einem thermodynamischen Gleichgewicht ausgegangen wird, gilt für die emittierte Leistungsdichte

$$\frac{dP_{\text{emt}}}{dA} = \int_{\omega=0}^{\infty} \int_{\vartheta=0}^{\pi/2} \int_{\varphi=0}^{2\pi} \varepsilon(\omega, T, \vartheta, \varphi) J(\omega, T) \cos(\vartheta) \sin(\vartheta) d\varphi d\vartheta d\omega = \frac{dP_{\text{abs}}}{dA}. \quad (2.905)$$

Daraus folgt

$$\int_{\omega=0}^{\infty} \int_{\vartheta=0}^{\pi/2} \int_{\varphi=0}^{2\pi} (\varepsilon(\omega, T, \vartheta, \varphi) - a(\omega, T, \vartheta, \varphi)) J(\omega, T) \cos(\vartheta) \sin(\vartheta) d\varphi d\vartheta d\omega = 0. \quad (2.906)$$

Da die spektrale Energiedichte des Hohlraums konstant ist, gilt sogar

$$\int_{\vartheta=0}^{\pi/2} \int_{\varphi=0}^{2\pi} [\varepsilon(\omega, T, \vartheta, \varphi) - a(\omega, T, \vartheta, \varphi)] \sin(\vartheta) \cos(\vartheta) d\varphi d\vartheta = 0. \quad (2.907)$$

Definiert man

$$\varepsilon(\omega, T) := \int_{\vartheta=0}^{\pi/2} \int_{\varphi=0}^{2\pi} \varepsilon(\omega, T, \vartheta, \varphi) \sin(\vartheta) \cos(\vartheta) d\varphi d\vartheta. \quad (2.908)$$

und analog für den Absorptionskoeffizienten, folgt

$$\varepsilon(\omega, T) = a(\omega, T). \quad (2.909)$$

Nun betrachtet man spezifisch die durch ϑ und φ vorgegebene Richtung. Hier geht von dA die spektral Strahldichte

$$\begin{aligned} J_{\text{out}}(\omega, T) &= J(\omega, T) \\ &= J(\omega, T) \left(\varepsilon(\omega, T, \vartheta, \varphi) + \int_{\varphi'=0}^{2\pi} \int_{\vartheta'=0}^{\pi/2} s(\vartheta', \varphi', \vartheta, \varphi, \omega, T) \cos(\vartheta') \sin(\vartheta') d\vartheta' d\varphi' \right) \end{aligned} \quad (2.910)$$

aus. Der Klammerausdruck ergibt sich zu Eins. Dabei wurde der *Streuquerschnitt* $s(\vartheta', \varphi', \vartheta, \varphi, \omega, T)$ definiert. Er beschreibt, in welchem Maße Strahlung, die aus der Richtung (ϑ', φ') einfällt, in die Richtung (ϑ, φ) umgelenkt wird, ohne zwischendurch absorbiert und wieder emittiert zu werden. Für die einfallende spektrale Strahldichte gilt

$$\begin{aligned} J_{\text{in}}(\omega, T) &= J(\omega, T) \\ &= J(\omega, T) \left(a(\omega, T, \vartheta, \varphi) + \int_{\varphi'=0}^{2\pi} \int_{\vartheta'=0}^{\pi/2} s(\vartheta, \varphi, \vartheta', \varphi', \omega, T) \cos(\vartheta') \sin(\vartheta') d\vartheta' d\varphi' \right) \end{aligned} \quad (2.911)$$

Der Klammerausdruck muss sich wieder zu Eins ergeben. Da die Maxwell-Gleichungen genau wie die Schrödinger-Gleichung invariant gegen Zeitumkehr sind, gilt

$$s(\vartheta, \varphi, \vartheta', \varphi', \omega, T) = s(\vartheta', \varphi', \vartheta, \varphi, \omega, T). \quad (2.912)$$

Daraus folgt

$$\varepsilon(\omega, T, \vartheta, \varphi) = a(\omega, T, \vartheta, \varphi) \quad (2.913)$$

Dies bezeichnet man als *Kirchhoff'sches Strahlungsgesetz*. Da ein Körper nie mehr als die auf ihn treffende Strahlung absorbieren kann, gilt $a \leq 1$, somit folgt

$$a \leq 1. \quad (2.914)$$

Körper mit $\varepsilon(\vartheta, \varphi, \omega) = 1$ bezeichnet man als *schwarze Körper*, das Stefan-Boltzmann-Gesetz gilt also nur für schwarze Körper.

3 HERRSCHENDE GLEICHUNGEN

Die herrschenden Gleichungen bilden das die zeitliche Entwicklung der Atmosphäre festlegende Gleichungssystem. Zunächst muss jedoch ihr Zustand beschrieben werden können.

3.1 Zustand der Atmosphäre

Ein Teilchen ist ein kleines Luftvolumen ΔV , was so groß ist, dass im langzeitlichen Mittel eine so große Anzahl Gasmoleküle darin enthalten ist, dass die Mittelung, die in der Herleitung der Navier-Stokes-Gleichungen gemacht wird, als gut genug anzusehen ist. Die Atmosphäre $A \subseteq \mathbb{R}^3$ offen ist die Gashülle der Erde. Die Offenheit ist sinnvoll, damit in jedem Punkt eine Richtungsableitung in jede Richtung möglich ist. Die Definition der Obergrenze hängt vom zu behandelnden Problem ab. An der Untergrenze wird die Atmosphäre durch die Erdoberfläche begrenzt, inklusive der dort stattfindenden Bewegungen, somit ist die Menge A zeitabhängig, $A = A(t)$. Alle meteorologischen Felder werden als so oft differenzierbar vorausgesetzt, wie es für die Rechnungen benötigt wird. *Luft* besteht aus *trockener Luft* und *Tracern*. Zu diesen zählen:

- Wasserdampf
- flüssiges oder festes Wasser
- Aerosole, die nicht aus Wasser bestehen
- in variabler Konzentration vorhandene gasförmige Komponenten

Feuchte Luft ist eine Mischung aus trockener Luft und Wasserdampf. Die Anzahl der berücksichtigten *Tracerklassen*, insbesondere der *Kondensatklassen* wird dann als genügend angesehen, wenn falsche Vorhersagen nicht mehr auf Grobheiten im für die Vorhersage verwendeten Gleichungssystem, sondern auf Fehler in den Anfangs- und/oder Randbedingungen zurückzuführen sind. Folgende Zustandsgrößen werden definiert:

- Die Dichte trockener Luft $\varrho_d : A \rightarrow \mathbb{R}$ wird definiert durch

$$\varrho_d := \frac{\mathbf{I}}{\Delta V} \sum_{i=1}^{N_d} m_i^{(d)}. \quad (3.1)$$

Hierbei ist N_d die Anzahl der Gasatome außer H_2O und anderen gesondert betrachteten Spurengasen, die im Volumen ΔV vorhanden sind, und die $m_i^{(d)}$ sind ihre Massen.

- Der *Windvektor* $\mathbf{U} : A \rightarrow \mathbb{R}^3$ wird definiert durch

$$\mathbf{U} := \frac{\mathbf{I}}{\sum_{j=1}^{N_g} m_j^{(g)}} \sum_{i=1}^{N_g} m_i^{(g)} \mathbf{v}_i^{(g)}, \quad (3.2)$$

wobei $\mathbf{v}_i^{(g)}$ die Geschwindigkeit des i -ten Moleküls des gasförmigen Anteils der Luft in ΔV ist.

- Die Dichten der Tracerklassen $\varrho_i : A \rightarrow \mathbb{R}$ werden analog zu ϱ_d definiert.
- Die $Q_i : A \rightarrow \mathbb{R}$ seien die Ladungsdichten der Tracer.
- Die Massenstromdichte $j_i : A \rightarrow \mathbb{R}^3$ der i -ten Tracerklasse wird definiert durch

$$j_i := \varrho_i \sum_{k=1}^{N_i} \mathbf{v}_k^{(i)}, \quad (3.3)$$

wobei $\mathbf{v}_k^{(i)}$ die Geschwindigkeit des k -ten Teilchens der entsprechenden Tracerklasse in ΔV ist.

- Die Temperatur $T : A \rightarrow \mathbb{R}$ sei diejenige der feuchten Luft.
- Die Temperatur $T_i : A \rightarrow \mathbb{R}$ sei diejenige der i -ten Tracerklasse, alle Teilchen einer Klasse sollen die gleiche Temperatur haben. Die gasförmigen Tracer haben die Temperatur der feuchten Luft.

- $p : A \rightarrow \mathbb{R}$ sei der Druck.
- Weiterhin betrachtet man das Feld der spektralen Strahldichte $L_A : A \times [0, \infty) \times [0, \pi] \times [0, 2\pi] \rightarrow \mathbb{R}$.
- Das *elektrische Feld E* sowie die *magnetische Flussdichte B* müssen ebenfalls berücksichtigt werden (z. B. für Gewitter und die *Ionosphäre*).

Die Gesamtheit all dieser Größen ist ein *atmosphärischer Zustand Z*. Ziel dieses Kapitels ist die Formulierung prognostischer Gleichungen so, dass durch Anfangsbedingungen und Randbedingungen die Zustandstrajektorie festgelegt ist. Dabei wird jeder Zustand als quasistationärer Zustand betrachtet. Durch thermodynamische Zustandsgleichungen oder weitere diagnostische Gleichungen, die aus genäherten oder ungenäherten Relationen zwischen den Elementen von Z hervorgehen, kann ein Zustand bereits durch eine echte Teilmenge von Z oder durch eine Bijektion auf dieser Teilmenge festgelegt sein.

Die i -te Kondensatklaasse habe die *mikroskopische Dichte* ρ'_i , damit ist beispielsweise die Dichte des Wassers $\sim 10^3 \text{ kgm}^{-3}$ gemeint in Abgrenzung zur über ein Teilchen gemittelten Dichte. Die ρ'_i werden als Konstanten angenommen, die nicht von äußereren Bedingungen abhängen, für sie gilt

$$\rho'_i = \frac{m_i}{V_i}, \quad (3.4)$$

wobei m_i die Masse der Komponente i ist und V_i das von ihr eingenommene Volumen. Die Dichte der Luft ergibt sich allgemein zu

$$\rho = \frac{m_g + \sum_{i \in \{\text{Kondensatklassen}\}} m_i}{V_g + \sum_{i \in \{\text{Kondensatklassen}\}} V_i}. \quad (3.5)$$

Für die Dichte des Anteils ρ_i gilt allgemein

$$\rho_i = \frac{m_i}{V} = \frac{m_i}{V_g + \sum_{i \in \{\text{Kondensatklassen}\}} V_i}. \quad (3.6)$$

Für die Dichte ρ_g der gasförmigen Luft gilt

$$\rho_g = \frac{m_g}{V} = \frac{m_g}{V_g + \sum_{i \in \{\text{Kondensatklassen}\}} V_i}. \quad (3.7)$$

Für die mikroskopischen Dichten der gasförmigen Luft erhält man

$$\begin{aligned} \rho'_g &= \frac{m_g}{V_g} = \frac{m_g}{V - \sum_{i \in \{\text{Kondensatklassen}\}} V_i} = \frac{1}{\frac{V}{m_g} - \sum_{i \in \{\text{Kondensatklassen}\}} \frac{V_i}{m_g}} \\ &= \frac{1}{\frac{1}{\rho_g} - \sum_{i \in \{\text{Kondensatklassen}\}} \frac{V_i}{m_i} \frac{m_i}{m_g}} = \frac{\rho_g}{1 - \sum_{i \in \{\text{Kondensatklassen}\}} \frac{\rho_i}{\rho'_i}}. \end{aligned} \quad (3.8)$$

Die mikroskopische Dichte des Wasserdampfes ρ'_v bezeichnet man auch als *mikroskopische Feuchte*. Für sie gilt analog

$$\rho'_v = \frac{m_v}{V_g} = \frac{\rho_v}{1 - \sum_{i \in \{\text{Kondensatklassen}\}} \frac{\rho_i}{\rho'_i}}. \quad (3.9)$$

Für die Zustandsgleichung von Luft gilt somit

$$p = T_g R_g \rho'_g. \quad (3.10)$$

3.2 Forcings und Zeitableitungen

Phasenübergangsraten spielen für den Ersten Hauptsatz der Thermodynamik eine Rolle, da sie mit latenten Wärmeflüssen verbunden sind, genauso wie für die Kontinuitätsgleichungen, die sie Massenflüsse sind. Der Erste Hauptsatz wird jedoch materiell für ein bestimmtes Teilchen formuliert und nicht lokalzeitlich wie die Kontinuitätsgleichung. Es stellt sich die Frage, ob bei den Phasenübergangsraten eine Unterscheidung zwischen totaler und lokalzeitlicher Ableitung auftritt, da es sich bei diesen Größen ja auch um Zeitableitungen handelt. Um diese Frage zu beantworten, stelle man sich ein Messgerät vor, welches die Masse $m(t)$ misst, die bis zu einem Zeitpunkt $t > 0$ in einem ortsfesten Kontrollvolumen V die Phase gewechselt habe. Für die Phasenübergangsrate q misst man

$$q = \frac{m(t)}{tV}. \quad (3.11)$$

Man stelle sich ein zweites Messgerät vor, was die Masse $m'(t)$ misst, die bis zu einem Zeitpunkt $t > 0$ in einem mit dem Windfeld mitbewegten Teilchen $V'(t)$ die Phase gewechselt hat. Es sei $V'(0) = V(0)$. Dann misst dieses Messgerät für die Phasenübergangsrate

$$q' = \frac{m'(t)}{tV'(t)}. \quad (3.12)$$

Im Fall $t \rightarrow 0$ geht $V' \rightarrow V$. Daher gilt

$$\begin{aligned} \lim_{t \rightarrow 0} (q - q') &= \lim_{t \rightarrow 0} \left[\frac{m(t)}{Vt} - \frac{m'(t)}{V'(t)t} \right] = \lim_{t \rightarrow 0} \frac{m(t)}{Vt} - \lim_{t \rightarrow 0} \frac{m'(t)}{V'(t)t} \\ &= \frac{1}{V} \lim_{t \rightarrow 0} \frac{m(t)}{t} \lim_{t \rightarrow 0} \frac{1}{V'(t)} \lim_{t \rightarrow 0} \frac{m'(t)}{t} \\ &= \frac{1}{V} \lim_{t \rightarrow 0} \frac{m(t)}{t} - \frac{1}{V} \lim_{t \rightarrow 0} \frac{m'(t)}{t} = \frac{1}{V} \lim_{t \rightarrow 0} \frac{m(t) - m'(t)}{t} \end{aligned} \quad (3.13)$$

nach den Rechenregeln für Funktionsgrenzwerte. Mit der wahren orts- und zeitabhängigen Kondensationsrate $q_r(\mathbf{r}, t)$ kann man

$$m(t) = \int_0^t \int_V q_r(\mathbf{r}, t) d^3 r dt' \quad (3.14)$$

sowie

$$m'(t) = \int_0^t \int_{V'(t)} q_r(\mathbf{r}, t) d^3 r dt' \quad (3.15)$$

notieren. Damit erhält man

$$\begin{aligned} m(t) - m'(t) &= \int_0^t \int_V q_r(\mathbf{r}, t) d^3 r dt' - \int_0^t \int_{V'(t)} q_r(\mathbf{r}, t) d^3 r dt' \\ &= \int_0^t \left[\int_V q_r(\mathbf{r}, t) d^3 r - \int_{V'(t)} q_r(\mathbf{r}, t) d^3 r \right] dt'. \end{aligned} \quad (3.16)$$

Nach dem Hauptsatz der Differenzial- und Integralrechnung folgt

$$\lim_{t \rightarrow 0} \frac{m(t) - m'(t)}{t} = \frac{1}{V} \lim_{t \rightarrow 0} \left[\int_V q_r(\mathbf{r}, t) d^3 r - \int_{V'(t)} q_r(\mathbf{r}, t) d^3 r \right] = 0. \quad (3.17)$$

Also ist $q - q' = 0$ für den Grenzfall $t \rightarrow 0$. Für die Phasenübergangsraten misst man also im System des Teilchens das Gleiche wie im ruhenden System, sodass hier die Unterscheidung zwischen totaler und lokalzeitlicher Zeitableitung nicht auftritt. Dies gilt analog für alle anderen Quellstärken und Forcings.

3.3 Kontinuitätsgleichungen

Die Kontinuitätsgleichung ist die Bilanzgleichung der Masse. Sei $\Omega \subseteq \mathbb{R}^3$ eine offene Teilmenge, ϱ eine Dichte und j die entsprechende Flussdichte. Dann gilt mit dem Gaußchen Satz und einer Quelldichte Q

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial t} \int_{\Omega} \varrho d^3 r &= - \int_{\partial \Omega} j \cdot d\mathbf{n} + \int_{\Omega} Q d^3 r = - \int_{\Omega} \nabla \cdot j - Q d^3 r \\ \Rightarrow \int_{\Omega} \frac{\partial \varrho}{\partial t} + \nabla \cdot j - Q d^3 r &= 0.\end{aligned}\quad (3.18)$$

Da der Integrand stetig ist, ist selbiger bereits homogen und konstant gleich Null. Gilt nämlich $\left| \frac{\partial \varrho}{\partial t} + \nabla \cdot j - Q \right| > \varepsilon > 0$ an einer Stelle $\mathbf{r}_0 \in \Omega$, so existiert eine offene Umgebung $\omega \subseteq \Omega$ mit $\mathbf{r}_0 \in \omega$ und $\int_{\omega} \frac{\partial \varrho}{\partial t} + \nabla \cdot j - Q d^3 r \neq 0$ im Widerspruch zu Glg. (3.18). Es gilt somit

$$\frac{\partial \varrho}{\partial t} + \nabla \cdot j = Q. \quad (3.19)$$

In Termen des spezifischen Volumens a kann man dies als

$$\begin{aligned}-\frac{1}{a^2} \frac{\partial a}{\partial t} - \frac{1}{a^2} \mathbf{U} \cdot \nabla a + \frac{1}{a} \nabla \cdot \mathbf{U} &= 0 \\ \frac{\partial a}{\partial t} &= a \nabla \cdot \mathbf{U} - \mathbf{U} \cdot \nabla a.\end{aligned}\quad (3.20)$$

notieren. Dies notiert man nun separat für alle Komponenten der Luft:

$$\frac{\partial \varrho_d}{\partial t} + \nabla \cdot j_d = Q_d \quad (3.21)$$

$$\frac{\partial \varrho_v}{\partial t} + \nabla \cdot j_v = Q_v \quad (3.22)$$

$$\frac{\partial \varrho_i}{\partial t} + \nabla \cdot j_i = Q_i \quad (3.23)$$

Dabei gelten

$$j_d = \varrho_d \mathbf{U} - D_d \nabla \varrho_d, \quad (3.24)$$

$$j_v = \varrho_v \mathbf{U} - D_v \nabla \varrho_v. \quad (3.25)$$

Die D_d, D_v sind die Diffusionskoeffizienten für trockene bzw. feuchte Luft. Man kann zunächst

$$Q_d = 0 \quad (3.26)$$

festhalten. Nun sollen die Q_x in den Glg.en (3.21) - (3.23) genauer angegeben werden. Es gibt fünf Prozesse, die zu ihnen beitragen:

- Diffusion
- Phasenübergänge
- Kollisionen
- Zerfälle
- bei Gasen, Ionen und Elektronen auch chemische Reaktionen und Strahlungswechselwirkung

Der letzte Punkt wird im Rest des Abschnitts ausgeklammert, hier soll es nur um die Kondensate gehen. Diffusion gibt es nur bei den gasförmigen Bestandteilen, also tritt in Q_d ein Term $D_d \Delta \varrho_d$ und in Q_v ein Term $D_v \Delta \varrho_v$ auf, hierbei sind D_d und D_v die Diffusionskoeffizienten von trockener Luft bzw. Wasserdampf in Luft. Trockene Luft ist von den übrigen Prozessen nicht betroffen, sodass

$$Q_d = D_d \Delta \varrho_d \quad (3.27)$$

gilt.

Treffen sich zwei Partikel der Kondensatklassen j und k , so kann man eine Wahrscheinlichkeit $0 \leq P_{j,k} \leq 1$ dafür angeben, dass sie danach einen Partikel bilden. Dieser hat eine wohldefinierte Klasse $R_{j,k}$. Weiterhin sei $\sigma_{j,k}$ der Wirkungsquerschnitt der Kollisionen von Partikeln der Klassen j und k . Sind j beispielsweise Kugeln mit Radius r_j und k Kugeln mit Radius r_k , so gilt $\sigma_{j,k} = \pi (r_j + r_k)^2$. Die gemittelte Relativgeschwindigkeit zwischen den Teilchen der Klassen j und k sei $\overline{v}_{\text{rel}}(j, k)$. Dann durchfliegt ein Partikel der Klasse j in der Zeit t relativ zu den Partikeln der Klasse k ein Volumen $\sigma_{j,k} \overline{v}_{\text{rel}}(j, k) t$. Die mittlere Stoßzeit $\tau_{j,k}$ ist dadurch definiert, dass man fordert, dass sich in diesem Volumen genau ein Teilchen der Klasse k aufhält, also

$$n_k \sigma_{j,k} \overline{v}_{\text{rel}}(j, k) \tau_{j,k} = 1. \quad (3.28)$$

Alle Teilchen der Gruppe j nehmen an Stoßprozessen teil, deshalb ist die Gesamt-Stoßrate von Teilchen j mit Partikeln k gegeben durch

$$\frac{n_j}{\tau_{j,k}} = n_j n_k \sigma_{j,k} \overline{v}_{\text{rel}}(j, k). \quad (3.29)$$

Ist \tilde{m}_i die Masse der Teilchen der Gruppe $i = R_{j,k}$, so ergibt sich eine entsprechende Quellstärke

$$\tilde{m}_i \sigma_{j,k} n_j n_k \overline{v}_{\text{rel}}(j, k) P_{j,k}. \quad (3.30)$$

Weiterhin muss auch ein negativer Anteil der Quellstärke berücksichtigt werden, der dadurch zustande kommt, dass Teilchen ihrer ursprünglichen Kondensatklaasse verlorengehen, wenn sie sich mit anderen Teilchen verbinden. Dies führt zu

$$Q_i^{(\text{Kollisionen})} = \tilde{m}_i \sum_j \sum_{k \leq j} \sigma_{j,k} n_j n_k \overline{v}_{\text{rel}}(j, k) P_{j,k} (\delta_{i,R_{j,k}} - \delta_{j,i} - \delta_{k,i}). \quad (3.31)$$

Dies erfordert wegen Massenerhaltung, dass die Teilchenmassen \tilde{m}_i ganzzahlige Vielfache einer minimalen Masse sind, damit bei Kollisionen keine Masse artifiziell verschwindet oder entsteht.

Nun werden Zerfallsprozesse untersucht. Für die Änderung einer Teildichthe n_j durch Zerfälle gilt

$$dn_j = -n_j \lambda_j dt \Leftrightarrow \frac{dn_j}{dt} = -\lambda_j n_j, \quad (3.32)$$

hierbei ist λ_j die Zerfallskonstante. Das Produkt des Zerfalls sei mit einer Wahrscheinlichkeit $Z_{j,k,l}$ ein Teilchen der Klasse k und eines der Klasse l , hierbei gilt die Normierung

$$1 = \sum_k \sum_{l \leq k} Z_{j,k,l}, \quad (3.33)$$

wobei $Z_{j,j,l} = Z_{j,k,j} = 0$ sein soll, das heißt das Produkt eines Zerfalls darf nicht gleich dem Edukt sein. Es müssen für jede Kondensatklaasse i wieder positive und negative Terme beachtet werden, sodass gilt

$$Q_i^{(\text{Zerfälle})} = \tilde{m}_i \sum_j \sum_k \sum_{l \leq k} \lambda_j n_j Z_{j,k,l} (\delta_{i,k} + \delta_{i,l} - \delta_{j,i}). \quad (3.34)$$

Abschließend werden Phasenübergänge behandelt. Diese können auf drei Arten stattfinden. Erstens können Kondensation und Resublimation direkt zum Entstehen neuer Teilchen der Klasse i führen bzw. können Verdampfung und Sublimation zu deren Zerstörung führen. Die entsprechenden Massenflussdichten werden mit $\tilde{q}'_{v,i}$ im ersten und $\tilde{q}'_{i,v}$ im zweiten Fall bezeichnet. Durch diesen Prozess erhält man Terme

$$Q_v^{(\pm \text{Entstehung})} = \sum_j \tilde{q}'_{j,v} - \tilde{q}'_{v,j}, \quad (3.35)$$

$$Q_i^{(\pm \text{Entstehung})} = \tilde{q}'_{v,i} - \tilde{q}'_{i,v}. \quad (3.36)$$

Große Kondensationsprodukte wie Hagelkörner entstehen nicht instantan, sondern sie wachsen, u. a. durch Kondensation bzw. Resublimation von Wasserdampf an kleineren Partikeln. In umgekehrter Weise können sie auch wieder vergehen. Während eines Zeitintervalls Δt kondensiere oder resublimiere innerhalb eines Volumens

ΔV eine Masse m_i an Partikeln der Klasse i . Diese wachsen dadurch und werden schwerer, jedoch wurde in Absch. 3.1 festgelegt, dass alle Partikel der Klasse i die gleiche Masse \tilde{m}_i haben sollen. Ist dies der einzige Prozess der stattfindet, gilt wegen Massenerhaltung

$$\varrho_{g(i)}(t) \Delta V + m_i = \varrho_{g(i)}(t + \Delta t) \Delta V. \quad (3.37)$$

Hierbei ist $g(i)$ diejenige Kondensatklasse, die aus i durch Wachstum entsteht. Damit folgt

$$\frac{\partial \varrho_{g(i)}}{\partial t} = \frac{1}{\Delta V} \frac{dm_i}{dt} =: \tilde{q}_{v,i}''. \quad (3.38)$$

Dies ist zunächst verwirrend, weil durch Kondensation an Partikeln i die Dichte $\varrho_{g(i)}$ verändert wird; dies resultiert daraus, dass bei dieser Art des Phasenübergangs keine neuen Teilchen der Klasse i entstehen. Im Fall von Verdunstung oder Sublimation erhält man

$$\frac{\partial \varrho_{d(i)}}{\partial t} =: \tilde{q}_{i,v}'', \quad (3.39)$$

wobei $d(i)$ die Kondensatklasse ist, die aus i durch Schrumpfung entsteht.

Drittens können sich Kondensate durch Gefrieren oder Schmelzen ineinander Umwandeln, die entsprechenden Quellstärken seien mit $\tilde{q}_{j,k}'''$ bezeichnet. Man erhält

$$Q_i^{(\text{Umwandlung})} = \sum_j \tilde{q}_{j,i}''' - \tilde{q}_{i,j}'''. \quad (3.40)$$

Die Quellstärken stellen sich zusammenfassend folgendermaßen dar:

$$Q_d = D_d \Delta \varrho_d \quad (3.41)$$

$$Q_v = \sum_i \left(\tilde{q}_{i,v}' - \tilde{q}_{v,i}' + \tilde{q}_{i,v}'' - \tilde{q}_{v,i}'' \right) + D_v \Delta \varrho_v \quad (3.42)$$

$$\begin{aligned} Q_i = & \tilde{m}_i \sum_j \sum_{k \leq j} \sigma_{j,k} n_j n_k \overline{v_{\text{rel}}}(j, k) P_{j,k} (\delta_{i,R_{j,k}} - \delta_{j,i} - \delta_{k,i}) + \tilde{q}_{v,i}' - \tilde{q}_{i,v}' \\ & + \tilde{m}_i \sum_j \sum_k \sum_{l \leq k} \lambda_j n_j Z_{j,k,l} (\delta_{i,k} + \delta_{i,l} - \delta_{j,i}) + \left(\tilde{q}_{g(i),v}'' + \tilde{q}_{v,d(i)}'' \right) + \sum_j \tilde{q}_{j,i}''' - \tilde{q}_{i,j}''' \end{aligned} \quad (3.43)$$

Die genaue Berechnung der $P_{j,k}$, λ_j und $Z_{j,k,l}$ sowie der Phasenübergangsraten ist Aufgabe kleinskaligerer numerischer Methoden und würde das Ziel dieses Buches übersteigen, dies ist analog zu den Spektren.

Nun müssen noch die Massenflussdichten j_i angegeben werden. v_i sei die Gleichgewichts-Sinkgeschwindigkeit der Partikel i , dann kann man von

$$j_i = \varrho_i \mathbf{U} - \mathbf{k}_{\varrho_i} v_i \quad (3.44)$$

ausgehen. Für den Niederschlag P_i der Kondensatklasse i gilt

$$P_i = -j_i(\varepsilon_{\text{SFC}}), \quad (3.45)$$

wobei sich SFC auf die Erdoberfläche bezieht. Diese Gleichungen sind auch auf Aerosole anwendbar.

Häufig wird auch die spezifische Feuchte $q = \varrho_i / \varrho$ verwendet (Def. s. Glg. (2.808)), da sie im Falle einer mit dem Windfeld advehierten Komponente i eine Erhaltungsgröße ist:

$$\frac{Dq}{Dt} = -\frac{q}{\varrho} \frac{D\varrho}{Dt} + \frac{1}{\varrho} \frac{D\varrho_i}{Dt} = q \nabla \cdot \mathbf{U} - q \nabla \cdot \mathbf{U} = 0 \quad (3.46)$$

Die Quellterme von q sind diejenigen von ϱ_i dividert durch die Dichte des Mediums ϱ .

3.4 Impulsgleichung

Der Impuls \mathbf{p} eines Teilchens ΔV mit N_h Gasmolekülen und N_c Kondensatkernen ist durch

$$\mathbf{p} = \sum_{i=1}^{N_h+N_c} m_i \mathbf{U}_i \stackrel{\text{Glg. (3.2)}}{=} \mathbf{U} \sum_{j=1}^{N_h} m_j + \sum_{j=N_h+1}^{N_h+N_c} m_j (\mathbf{U} + \Delta \mathbf{U}_j), \quad (3.47)$$

Hierbei ist $\Delta \mathbf{U}_j$ die als dichteunabhängig angenommene Sinkgeschwindigkeit der entsprechenden Kondensatklasse. Man kann in Inertialsystemen das Zweite Newton'sche Axiom notieren:

$$\frac{D\mathbf{p}}{Dt} = \rho \Delta V \frac{D}{Dt} \mathbf{U} = \mathbf{F}_{\text{int}} + \mathbf{F}_{\text{ext}} \quad (3.48)$$

Die Kraft ergibt sich als Summe interner Kräfte und externer Kräfte. Unter der Annahme, dass die internen Kräfte aus paarweisen Wechselwirkungen der Teilchen bestehen, die das Dritte Newton'sche Axiom erfüllen, gilt

$$\mathbf{F}_{\text{int}} = \sum_{i,j=1}^N \mathbf{F}_{i,j} = \sum_{i=1}^N \sum_{j=i+1}^N \mathbf{F}_{i,j} + \mathbf{F}_{j,i} \stackrel{\text{Newton III}}{=} 0. \quad (3.49)$$

Hierbei ist $\mathbf{F}_{i,j}$ die Kraft auf das i -te Teilchen aufgrund des j -ten Teilchens. Für \mathbf{F}_{ext} kommen zwei Arten von Kräften in Frage:

- Kraftfelder ferner Ladungs- und Massenverteilungen
- Wechselwirkungen mit Nachbarpartikeln

Unter den ersten Punkt fällt gewöhnlich nur das Schwerefeld. Für die Gewichtskraft \mathbf{F}_g gilt

$$\mathbf{F}_g = \sum_{i=1}^N m_i \mathbf{g} = \rho \Delta V \mathbf{g}. \quad (3.50)$$

Für die Kraft, die aufgrund des Drucks auf die offene Kugel $\Omega := B_r(\mathbf{r}_o)$ mit Radius r mit $\Delta V = \frac{4}{3}\pi r^3$ und Mittelpunkt \mathbf{r}_o wirkt, gilt

$$\mathbf{F}_p = - \int_{\partial \Delta V} p dA. \quad (3.51)$$

Man geht hier von einem kugelförmigen Teilchen aus, dann folgt

$$\mathbf{F}_p = - \int_{\partial \Delta V} p r^2 \mathbf{n} d\omega \approx - \int_{\partial \Delta V} (p(\mathbf{r}_o) + \mathbf{r} \cdot \nabla p) r^2 \mathbf{n} d\omega \quad (3.52)$$

mit $d\omega$ als Raumwinkelement. Für die Ausführung der Integration richtet man ∇p o. B. d. A. an der z-Achse aus, sodass gilt

$$\nabla p = |\nabla p| \mathbf{e}_z. \quad (3.53)$$

Daraus folgt mit $p_o := p(\mathbf{r}_o)$

$$\begin{aligned} \mathbf{F}_p &= - \int_{\partial \Delta V} (p_o + \mathbf{r} \cdot \nabla p) r r d\omega = -r \int_{\partial \Delta V} (\mathbf{r} \cdot \nabla p) \mathbf{r} d\omega = -r^2 |\nabla p| \int_{\partial \Delta V} \cos \{\nabla p, \mathbf{r}\} \mathbf{r} d\omega \\ &= -r^3 |\nabla p| \int_{\vartheta=0}^{\pi} \int_{\varphi=0}^{2\pi} \cos(\vartheta) \sin(\vartheta) \begin{pmatrix} \sin(\vartheta) \cos(\varphi) \\ \sin(\vartheta) \sin(\varphi) \\ \cos(\vartheta) \end{pmatrix} d\varphi d\vartheta \\ &= -r^3 \nabla p \cdot \pi \int_0^{\pi} \cos^2(\vartheta) \sin(\vartheta) d\vartheta = r^3 \nabla p \cdot \pi \left[\frac{1}{3} \cos^3(\vartheta) \right]_0^{\pi} = -\frac{4}{3} \pi r^3 \nabla p = -\Delta V \nabla p. \end{aligned} \quad (3.54)$$

Diese Kraft bezeichnet man als *Druckgradientenkraft*. Man erhält

$$\rho \Delta V \frac{D}{Dt} \mathbf{U} = \rho \Delta V \mathbf{g} - \Delta V \nabla p, \quad (3.55)$$

stellt man dies nach der Beschleunigung des Teilchens $\frac{DU}{Dt}$ um, erhält man

$$\frac{DU}{Dt} = -\frac{\mathbf{I}}{\rho} \nabla p + \mathbf{g}. \quad (3.56)$$

Diese Gleichung bezeichnet man als *Euler-Gleichung*.

Bei einer alternativen Herleitung betrachtet man eine makroskopische offene Menge $\Omega \subseteq \mathbb{R}^3$, der Impuls \mathbf{p} in dieser Menge ergibt sich zu

$$\mathbf{p} = \int_{\Omega} \rho U d^3 r. \quad (3.57)$$

An dieser Stelle führt man den *Impulsflussdichtetensor* Π durch

$$\Pi_{i,j} := \rho U_i U_j \quad (3.58)$$

für $1 \leq i, j \leq 3$ ein. Für $1 \leq i \leq 3$ ist

$$\Pi \cdot \mathbf{e}_i = \sum_{j=1}^3 \rho U_j U_i e_j = U_i \rho \mathbf{U} \quad (3.59)$$

der Fluss der Impulsdichte in \mathbf{e}_i -Richtung. Für einen allgemeinen Einheitsvektor \mathbf{e} ist $\Pi \cdot \mathbf{e}$ der Fluss der Impulsdichte in \mathbf{e} -Richtung. Somit gilt mit den Feststellungen des Absch.s 3.2

$$\begin{aligned} \frac{\partial \mathbf{p}}{\partial t} &= \int_{\Omega} \frac{\partial (\rho \mathbf{U})}{\partial t} d^3 r = \int_{\Omega} -\nabla p + \rho \mathbf{g} d^3 r - \int_{\partial \Omega} \Pi \cdot d\mathbf{n} \\ &\Rightarrow \int_{\Omega} \frac{\partial (\rho \mathbf{U})}{\partial t} d^3 r = \int_{\Omega} -\nabla p + \rho \mathbf{g} - \nabla \cdot \Pi d^3 r \\ &\Rightarrow \int_{\Omega} \frac{\partial (\rho \mathbf{U})}{\partial t} + \nabla p + \nabla \cdot \Pi - \rho \mathbf{g} d^3 r = 0. \end{aligned} \quad (3.60)$$

Somit gilt bereits

$$\frac{\partial (\rho \mathbf{U})}{\partial t} + \nabla p + \nabla \cdot \Pi - \rho \mathbf{g} = 0. \quad (3.61)$$

Für die Divergenz von Π folgt

$$\begin{aligned} (\nabla \cdot \Pi)_i &= \sum_{j=1}^3 \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho U_i U_j) = \sum_{j=1}^3 U_i U_j \frac{\partial \rho}{\partial x_j} + \rho U_j \frac{\partial U_i}{\partial x_j} + \rho U_i \frac{\partial U_j}{\partial x_j} \\ &= U_i \mathbf{U} \cdot \nabla \rho + \rho (\mathbf{U} \cdot \nabla) U_i + \rho U_i \nabla \cdot \mathbf{U}, \end{aligned} \quad (3.62)$$

also gilt

$$\nabla \cdot \Pi = \mathbf{U} (\mathbf{U} \cdot \nabla \rho + \rho \nabla \cdot \mathbf{U}) + (\rho \mathbf{U} \cdot \nabla) \mathbf{U}. \quad (3.63)$$

Somit folgt

$$\rho \frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} + \mathbf{U} \frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla p + \mathbf{U} (\mathbf{U} \cdot \nabla \rho + \rho \nabla \cdot \mathbf{U}) + (\rho \mathbf{U} \cdot \nabla) \mathbf{U} - \rho \mathbf{g} = 0. \quad (3.64)$$

Mit der Kontinuitätsgleichung erhält man schlussendlich

$$\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} + (\mathbf{U} \cdot \nabla) \mathbf{U} = -\frac{\mathbf{I}}{\rho} \nabla p + \mathbf{g}. \quad (3.65)$$

3.4.1 Scheinkräfte

Die Newton'schen Axiome gelten nur in Inertialsystemen. In Bezug auf die Erde betrachtet man den Erdmittelpunkt als unbeschleunigt, auch wenn er um die Sonne kreist, und betrachtet nur die Rotation der Erde. Sei durch $(\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2, \mathbf{e}_3)$ die Basis der ruhenden Koordinaten bezeichnet (vgl. Absch. A.9). Wenn man Beschleunigungen in diesem KS misst, kann man sie über das Zweite Newton'sche Axiom mit den wirkenden Kräften verknüpfen. Wählt man jedoch eine mit der Winkelgeschwindigkeit der Erde rotierende Basis, entstehen weitere Beschleunigungsterme, die sich nicht durch physikalische Kräfte ergeben. Für die Basis der globalen Koordinaten gilt in ruhenden Koordinaten

$$\mathbf{e}_x(t) = \begin{pmatrix} \cos(\omega t) \\ \sin(\omega t) \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (3.66)$$

$$\mathbf{e}_y(t) = \begin{pmatrix} -\sin(\omega t) \\ \cos(\omega t) \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (3.67)$$

$$\mathbf{e}_z(t) = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (3.68)$$

mit der Winkelgeschwindigkeit der Erdrotation $\boldsymbol{\omega} = (0, 0, \omega)^T$. Sei ein Teilchen mit dem Ortsvektor $\mathbf{r} = \mathbf{r}(t) = x(t)\mathbf{e}_x(t) + y(t)\mathbf{e}_y(t) + z(t)\mathbf{e}_z(t)$ gegeben. Dann gilt für die Geschwindigkeit

$$\mathbf{U} = \dot{\mathbf{r}} = \dot{x}\mathbf{e}_x + \dot{y}\mathbf{e}_y + \dot{z}\mathbf{e}_z + x\dot{\mathbf{e}}_x + y\dot{\mathbf{e}}_y + z\dot{\mathbf{e}}_z. \quad (3.69)$$

Für die Zeitableitungen der Basisvektoren gilt

$$\dot{\mathbf{e}}_x = \omega \begin{pmatrix} -\sin(\omega t) \\ \cos(\omega t) \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \omega \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} \cos(\omega t) \\ \sin(\omega t) \\ 0 \end{pmatrix} = \boldsymbol{\omega} \times \mathbf{e}_x, \quad (3.70)$$

$$\dot{\mathbf{e}}_y = \omega \begin{pmatrix} -\cos(\omega t) \\ -\sin(\omega t) \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \omega \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} -\sin(\omega t) \\ \cos(\omega t) \\ 0 \end{pmatrix} = \boldsymbol{\omega} \times \mathbf{e}_y, \quad (3.71)$$

$$\dot{\mathbf{e}}_z = 0 = \boldsymbol{\omega} \times \mathbf{e}_z. \quad (3.72)$$

Damit schreibt sich der Geschwindigkeitsvektor als

$$\mathbf{U} = \mathbf{U}' + x\boldsymbol{\omega} \times \mathbf{e}_x + y\boldsymbol{\omega} \times \mathbf{e}_y + z\boldsymbol{\omega} \times \mathbf{e}_z = \mathbf{U}' + \boldsymbol{\omega} \times \mathbf{r}, \quad (3.73)$$

dabei wurde für die im gestrichenen System gemessene Geschwindigkeit verkürzend $\mathbf{U}' = \dot{x}\mathbf{e}_x + \dot{y}\mathbf{e}_y + \dot{z}\mathbf{e}_z$ geschrieben und die Linearität des Vektorprodukts Glg.en (A.154) - (A.155) ausgenutzt. Das Zweite Newton'sche Axiom ist eine Aussage über die Beschleunigung $\frac{D\mathbf{U}}{Dt}$, also leitet man die obige Gleichung noch einmal zeitlich ab:

$$\frac{D\mathbf{U}}{Dt} = \left(\frac{D\mathbf{U}'}{Dt} \right)' + \boldsymbol{\omega} \times \mathbf{U}' + \boldsymbol{\omega} \times (\mathbf{U}' + \boldsymbol{\omega} \times \mathbf{r}) = \left(\frac{D\mathbf{U}'}{Dt} \right)' + 2\boldsymbol{\omega} \times \mathbf{U}' + \boldsymbol{\omega} \times (\boldsymbol{\omega} \times \mathbf{r}), \quad (3.74)$$

dabei ist $\left(\frac{D\mathbf{U}'}{Dt} \right)'$ die im rotierenden System gemessene Beschleunigung. Man interessiert sich für die Beschleunigung in globalen Koordinaten, also für den Vektor $\left(\frac{D\mathbf{U}'}{Dt} \right)'$.

$$\left(\frac{D\mathbf{U}'}{Dt} \right)' = \frac{D\mathbf{U}}{Dt} - 2\boldsymbol{\omega} \times \mathbf{U}' - \boldsymbol{\omega} \times (\boldsymbol{\omega} \times \mathbf{r}) \quad (3.75)$$

Der ortsabhängige Term $-\boldsymbol{\omega} \times (\boldsymbol{\omega} \times \mathbf{r})$ ist die Zentrifugalbeschleunigung, der geschwindigkeitsabhängige Term $-2\boldsymbol{\omega} \times \mathbf{U}'$ ist die Coriolis-Beschleunigung. Für die IS-Beschleunigung $\frac{D\mathbf{U}}{Dt}$ sind dabei die Beschleunigungen einzusetzen, die sich nach dem Zweiten Newton'schen Axiom aus den Kräften ergeben. Insbesondere sei darauf hingewiesen, dass die Coriolis-Kraft keine Arbeit leistet, da sie senkrecht auf dem Geschwindigkeitsvektor steht.

3.4.2 Reibung

Die Reibungskraft entsteht durch die Bewegung der Teilchen relativ zueinander, während die Durckgradientenkraft schon im ruhenden Fall vorhanden ist. Sei ein Geschwindigkeitsfeld $\mathbf{v} = (v_1, v_2, v_3)^T$ gegeben. Man betrachte ein

Teilchen der Ausdehnung $(\Delta x, \Delta y, \Delta z)$ mit Mittelpunkt am Ursprung. Die Reibungskraft f , die in x-Richtung auf das Teilchens wirkt, kann als Summe von drei Kräften

$$f = f_x + f_y + f_z \quad (3.76)$$

aufgefasst werden. Hierbei ist f_x die Komponente, die an den beiden Flächen des Teilchens $\perp e_x$ auftritt usw. Für f_x kann man mit der in Absch. 2.4.5.2 definierten *dynamischen Viskosität* η schreiben

$$\begin{aligned} f_x &= -\eta \frac{\partial v_1}{\partial x} \left(-\frac{\Delta x}{2} \right) \Delta y \Delta z + \eta \frac{\partial v_1}{\partial x} \left(\frac{\Delta x}{2} \right) \Delta y \Delta z = \eta V \frac{\frac{\partial v_1}{\partial x} \left(\frac{\Delta x}{2} \right) - \frac{\partial v_1}{\partial x} \left(-\frac{\Delta x}{2} \right)}{\Delta x} \\ &\stackrel{\Delta \text{ sehr klein}}{=} \eta V \frac{\partial^2 v_1}{\partial x^2}, \end{aligned} \quad (3.77)$$

hierbei ist und $V := \Delta x \Delta y \Delta z$ das Volumen. Für f_y gilt

$$\begin{aligned} f_y &= -\eta \frac{\partial v_1}{\partial y} \left(-\frac{\Delta y}{2} \right) \Delta x \Delta z + \eta \frac{\partial v_1}{\partial y} \left(\frac{\Delta y}{2} \right) \Delta x \Delta z = \eta V \frac{\frac{\partial v_1}{\partial y} \left(\frac{\Delta y}{2} \right) - \frac{\partial v_1}{\partial y} \left(-\frac{\Delta y}{2} \right)}{\Delta y} \\ &\stackrel{\Delta \text{ sehr klein}}{=} \eta V \frac{\partial^2 v_1}{\partial y^2}, \end{aligned} \quad (3.78)$$

analog für f_z . Daher ist

$$f = \eta V \Delta v_1, \quad (3.79)$$

für die Gesamt-Reibungskraft \mathbf{F} gilt

$$\mathbf{F} = \eta V \Delta \mathbf{v}. \quad (3.80)$$

Der Reibungstensor $\tilde{\Pi} \in \mathbb{R}^{3 \times 3}$ ist definiert durch

$$\tilde{\Pi}_{i,j} := -\eta \frac{\partial v_i}{\partial x_j} \quad (3.81)$$

für $1 \leq i, j \leq 3$ in Abgrenzung zum Impulsflussdichtetensor in Absch. 3.4. Die Kraft \mathbf{F} ergibt sich als negative Divergenz dieses Tensors:

$$\mathbf{F} = -V \nabla \cdot \tilde{\Pi} \quad (3.82)$$

Daher folgt für die Reibungsbeschleunigung

$$\mathbf{a} = -\frac{1}{\rho} \nabla \cdot \tilde{\Pi}. \quad (3.83)$$

Die Größe

$$r := \frac{\eta}{\rho} \quad (3.84)$$

bezeichnet man als *kinematische Viskosität*, ihr Wert ist nur von der Zusammensetzung des Fluids abhängig. Der Wert für trockene Luft beträgt $0,15 \cdot 10^{-4} \text{ m}^2/\text{s}$ [12]. Die Reibungsbeschleunigung im Windfeld ist damit gleich

$$\mathbf{a} = r \Delta \mathbf{U}. \quad (3.85)$$

Eine Skalenanalyse der Reibungsbeschleunigung für die synoptische Skala ergibt $10^{-5} 10^{-11} = 10^{-16} \text{ m/s}^2$, die typische Beschleunigung ist 10^{-4} m/s^2 , die Reibung ist also auf der synoptischen Skala zwölf Größenordnungen kleiner als die Beschleunigung und damit komplett vernachlässigbar. Sie hat nichtsdestotrotz eine wichtige thermodynamische Bedeutung, da sie für die Dissipation kinetischer Energie verantwortlich ist. Die dissipierte kinetische Energie wird in thermische Energie umgewandelt. Fluide ohne Reibung bezeichnet man als *ideale Fluide*.

Für die Reibung werden häufig andere als der mit Glg. (3.85) erhaltene Ausdruck verwendet. Daher wird in

den Herleitungen von nun an meist ein allgemeiner Ausdruck

$$\mathbf{F}_R = \begin{pmatrix} F_{R,x} \\ F_{R,y} \\ F_{R,z} \end{pmatrix} \equiv \begin{pmatrix} \mathbf{F}_R^{(H)} \\ F_{R,z} \end{pmatrix} \quad (3.86)$$

für die Reibungsbeschleunigung mitgeführt. Dies ist trotz der relativen Kleinheit der Reibung in der Atmosphäre aufgrund der ihrer Bedeutung für die Energiekaskade sinnvoll.

3.4.3 Addition der Kräfte

Setzt man Glg. (3.75) und Glg. (3.85) in Glg. (3.56) ein, so ergibt sich

$$\frac{DU}{Dt} = -\frac{\mathbf{I}}{\rho} \nabla p + \mathbf{U} \times \mathbf{f} + \mathbf{g} + r \Delta \mathbf{U}. \quad (3.87)$$

$\mathbf{f} := \mathbf{z}\omega$ ist der *Coriolis-Vektor*. Mit einer Umbenennung wurde außerdem mit $\frac{DU}{Dt}$ die Beschleunigung $\left(\frac{DU'}{Dt}\right)'$ bezeichnet, s. Glg. (3.75). \mathbf{U} ist die im rotierenden System gemessene Geschwindigkeit. Der Term der Zentrifugalbeschleunigung wurde in \mathbf{g} absorbiert.

Man kann die Beschleunigung $\frac{DU}{Dt}$ noch aufteilen in eine lokalzeitliche Ableitung $\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t}$ und einen advektiven Anteil:

$$\frac{DU}{Dt} = \frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} + (\mathbf{U} \cdot \nabla) \mathbf{U} \quad (3.88)$$

Für den advektiven Anteil gilt mit Glg. (A.234)

$$(\mathbf{U} \cdot \nabla) \mathbf{U} = \frac{\mathbf{I}}{2} \nabla (\mathbf{U} \cdot \mathbf{U}) - \mathbf{U} \times (\nabla \times \mathbf{U}). \quad (3.89)$$

Definiert man die *spezifische kinetische Energie* k durch

$$k := \frac{\mathbf{I}}{2} \mathbf{U}^2, \quad (3.90)$$

folgt

$$\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} = -\frac{\mathbf{I}}{\rho} \nabla p + \mathbf{U} \times (\mathbf{f} + \nabla \times \mathbf{U}) - \nabla k + \mathbf{g} + r \Delta \mathbf{U}. \quad (3.91)$$

Nun wird Gleichung (3.87) komponentenweise bezüglich der ortsabhängigen Orthonormalbasis der Kugelkoordinaten notiert. Für den Vektor \mathbf{f} gilt

$$\mathbf{f} = |\mathbf{f}| \begin{pmatrix} \cos^0(\varphi) \\ \sin^0(\varphi) \end{pmatrix} =: \begin{pmatrix} f^0 \\ f^1 \\ f^2 \end{pmatrix}. \quad (3.92)$$

$f := \mathbf{k} \cdot \mathbf{f}$ bezeichnet man als den *Coriolis-Parameter*. Damit folgt

$$\mathbf{U} \times \mathbf{f} = \begin{pmatrix} fv - f'w \\ -fu \\ f'u \end{pmatrix}. \quad (3.93)$$

Setzt man dies in die Bewegungsgleichung ein, folgt

$$\frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial x} + v \frac{\partial u}{\partial y} + w \frac{\partial u}{\partial z} - \frac{u v \tan(\varphi)}{a+z} + \frac{u w}{a+z} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial x} - f' w + f v + F_{R,x}, \quad (3.94)$$

$$\frac{\partial v}{\partial t} + u \frac{\partial v}{\partial x} + v \frac{\partial v}{\partial y} + w \frac{\partial v}{\partial z} + \frac{u^2 \tan(\varphi)}{a+z} + \frac{v w}{a+z} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial y} - f u + F_{R,y}, \quad (3.95)$$

$$\frac{\partial w}{\partial t} + u \frac{\partial w}{\partial x} + v \frac{\partial w}{\partial y} + w \frac{\partial w}{\partial z} - \frac{u^2 + v^2}{a+z} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial z} - g + f' u + F_{R,z}. \quad (3.96)$$

3.4.4 Randbedingungen

Will man ein hydrodynamisches Gleichungssystem auf ein System Ω anwenden, benötigt man Randbedingungen. Ω sei durch kondensierte Materie begrenzt. Sei \mathbf{n} ein Normalenvektor auf $\partial\Omega$, dann gilt als Randbedingung für das Windfeld \mathbf{U}

$$\mathbf{U} \cdot \mathbf{n} = 0, \quad (3.97)$$

da Teilchen nicht den festen Rand $\partial\Omega$ überwinden können. Man bezeichnet dies als *kinematische Randbedingung*. Am Oberrand der Atmosphäre fordert man diese Randbedingung häufig ebenfalls, was keine physikalische Realität ist, sondern eine notwendige Zwangsmaßnahme. Eine andere häufig verwendete Randbedingung ist

$$\mathbf{U}(\partial\Omega) = 0, \quad (3.98)$$

was man als *Adhäsionsbedingung* bezeichnet. Dies ist als Parametrisierung der kinematischen Randbedingung für kleinskalige Effekte bei rauer Oberfläche zu verstehen. Der Begriff *Bodenreibung* bezeichnet den Einfluss der Gültigkeit der kinematischen Randbedingung an der Erdoberfläche auf die Dynamik eines Geofluids. Ist eine Phasengrenzfläche in Bewegung, wie beispielsweise die Meeresoberfläche, fordert man, dass in jedem Medium die Normalkomponente der Geschwindigkeit gegen einen gemeinsamen Grenzwert konvergiert, wenn man sich dieser nähert. Für die Parallelkomponenten muss dies i. A. jedoch nicht gelten.

Ist das Druckfeld stetig, so gilt an einer Phasengrenze A

$$\lim_{r \uparrow A} p = \lim_{r \downarrow A} p, \quad (3.99)$$

wobei die zwei Grenzwerte für die unterschiedlichen Seiten der Phasengrenzfläche stehen. Dies gilt bis auf eine eventuell vorhandene Oberflächenspannung, bei der es sich ja gerade um eine Diskontinuität im Druckfeld an einer Grenzfläche handelt. Glg. (3.99) bezeichnet man als *dynamische Randbedingung*.

3.4.5 Näherungen

3.4.5.1 Flachgeofluide

Die Erdatmosphäre hat eine Dicke von weniger als einem Prozent des Erdradius, wenn man die sehr dünne Luft oberhalb der Stratosphäre vernachlässigt. Solche Fluide bezeichnet man als *Flachgeofluide*, das Wort *flach* bezieht sich dabei nicht auf die Tiefe des Fluids allein, sondern auf das Verhältnis zwischen der Tiefe und dem Radius des Planeten, auf dem sich das Fluid befindet. Man nähert daher

$$r \approx a \quad (3.100)$$

für den Abstand r vom Mittelpunkt der Erde. Man lässt jedoch Vertikalgeschwindigkeiten $w \neq 0$ zu. Die Bedeutung dieser scheinbar widersprüchlichen Voraussetzung kann man sich an einer harmonischen Schwingung $A = \hat{A} \sin(\omega t)$ verdeutlichen. Die Amplitude der Ableitung \dot{A} unterscheidet sich um den Faktor ω von der Amplitude der Schwingung selbst. Im Allgemeinen kann daher die Amplitude einer Auslenkung klein sein (dies entspricht hier der Dicke des Geofluids), ihre Änderung jedoch groß (dies entspricht hier der Vertikalgeschwindigkeit). Das Gleichungssystem für Flachgeofluide lautet also

$$\frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial x} + v \frac{\partial u}{\partial y} + w \frac{\partial u}{\partial z} - \frac{uvtan(\varphi)}{a} + \frac{uw}{a} = -\frac{i}{\rho} \frac{\partial p}{\partial x} - f'w + fv + F_{R,x}, \quad (3.101)$$

$$\frac{\partial v}{\partial t} + u \frac{\partial v}{\partial x} + v \frac{\partial v}{\partial y} + w \frac{\partial v}{\partial z} + \frac{u^2tan(\varphi)}{a} + \frac{vw}{a} = -\frac{i}{\rho} \frac{\partial p}{\partial y} - fu + F_{R,y}, \quad (3.102)$$

$$\frac{\partial w}{\partial t} + u \frac{\partial w}{\partial x} + v \frac{\partial w}{\partial y} + w \frac{\partial w}{\partial z} - \frac{u^2 + v^2}{a} = -\frac{i}{\rho} \frac{\partial p}{\partial z} - g + f'u + F_{R,z}. \quad (3.103)$$

3.4.5.2 Streichen der vertikalen Coriolis-Beschleunigung

Die einzigen beiden realen Kräfte in den Impulsgleichungen Glg.en (3.94) - (3.96) sind die Schwerkraft und die Druckgradientenkraft. Nimmt man einen verschwindenden Druckgradienten an, so ist die einzige verbleibende Kraft die Schwere, und diese ist ein Gradientenfeld. Daher ist die spezifische Gesamtenergie $e = e_{\text{kin}} + \varphi$ mit E_{kin} als kinetischer Energie und φ als Geopotential in diesem Fall erhalten. Es ist

$$e = \frac{1}{2} \mathbf{U}^2 + gz \quad (3.104)$$

$$\Rightarrow \frac{De}{Dt} = \mathbf{U} \cdot \frac{DU}{Dt} + gw = u \frac{Du}{Dt} + v \frac{Dv}{Dt} + w \frac{Dw}{Dt} + gw = \frac{u^2vtan(\varphi)}{a+z} - \frac{u^2w}{a+z} - f'wu + fvu - \frac{u^2vtan(\varphi)}{a+z} - \frac{v^2w}{a+z} - fuv + w \frac{u^2 + v^2}{a+z} + f'u w - gw + gw = 0, \quad (3.105)$$

hierbei wurden im letzten Schritt die Bewegungsgleichungen eingesetzt. Die individuelle mechanische Energie eines Teilchens ändert sich also nur aufgrund des Druckgradienten. Ersetze nun $a+z \rightarrow a$. Es ist in Glg. (3.96) $\mathcal{O}(f'u) = \mathcal{O}(g)/10^4$, daher wird dieser Term vernachlässigt. Damit Glg. (3.105) nicht verletzt wird, muss auch der Term mit f' in Glg. (3.112) gestrichen werden, er ist auf der synoptischen Skala ca. hundertmal kleiner als fv . Man erhält folgendes Gleichungssystem:

$$\frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial x} + v \frac{\partial u}{\partial y} + w \frac{\partial u}{\partial z} - \frac{uvtan(\varphi)}{a+z} + \frac{uw}{a+z} = -\frac{i}{\rho} \frac{\partial p}{\partial x} + fv + F_{R,x}, \quad (3.106)$$

$$\frac{\partial v}{\partial t} + u \frac{\partial v}{\partial x} + v \frac{\partial v}{\partial y} + w \frac{\partial v}{\partial z} + \frac{u^2tan(\varphi)}{a+z} + \frac{vw}{a+z} = -\frac{i}{\rho} \frac{\partial p}{\partial y} - fu + F_{R,y}, \quad (3.107)$$

$$\frac{\partial w}{\partial t} + u \frac{\partial w}{\partial x} + v \frac{\partial w}{\partial y} + w \frac{\partial w}{\partial z} - \frac{u^2 + v^2}{a+z} = -\frac{i}{\rho} \frac{\partial p}{\partial z} - g + F_{R,z}. \quad (3.108)$$

3.4.5.3 Vereinfachung der Krümmungsterme

Ebenso sind die Terme uw/a , vw/a ca. hundertmal kleiner als die Terme mit $\tan(\varphi)$, sie können gestrichen werden. Aus Glg. (3.105) folgt, dass dann auch der Term $(u^2 + v^2)/(a+z)$ in der z-Komponente Glg. (3.96) gestrichen werden muss. Das entstehende Gleichungssystem lautet

$$\frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial x} + v \frac{\partial u}{\partial y} + w \frac{\partial u}{\partial z} - \frac{uvtan(\varphi)}{a+z} = -\frac{i}{\rho} \frac{\partial p}{\partial x} - f'w + fv + F_{R,x}, \quad (3.109)$$

$$\frac{\partial v}{\partial t} + u \frac{\partial v}{\partial x} + v \frac{\partial v}{\partial y} + w \frac{\partial v}{\partial z} + \frac{u^2tan(\varphi)}{a+z} = -\frac{i}{\rho} \frac{\partial p}{\partial y} - fu + F_{R,y}, \quad (3.110)$$

$$\frac{\partial w}{\partial t} + u \frac{\partial w}{\partial x} + v \frac{\partial w}{\partial y} + w \frac{\partial w}{\partial z} = -\frac{i}{\rho} \frac{\partial p}{\partial z} - g + f'u + F_{R,z}. \quad (3.111)$$

3.4.5.4 Zusammenfassung der Vereinfachungen

Kombiniert man die Flachgeofluidapproximation mit der Vereinfachung der Coriolis-Beschleunigung und den vereinfachten Krümmungstermen, folgt

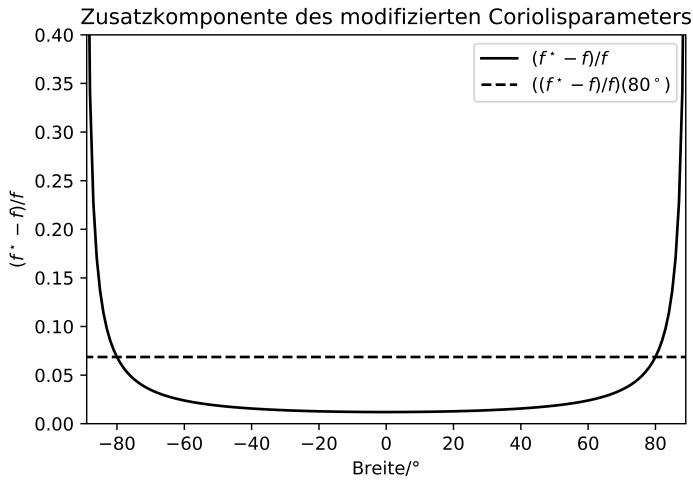


Abbildung 3.1: Die Zusatzkomponente von f^* als Funktion der Breite. Der Wert bei $\varphi = \pm 85^\circ$ ist zusätzlich eingetragen. Es wurde von einer Windgeschwindigkeit von $u = 10 \text{ m/s}$ ausgegangen.

$$\frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial x} + v \frac{\partial u}{\partial y} + w \frac{\partial u}{\partial z} - \frac{u v \tan(\varphi)}{a} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial x} + fv + F_{R,x}, \quad (3.112)$$

$$\frac{\partial v}{\partial t} + u \frac{\partial v}{\partial x} + v \frac{\partial v}{\partial y} + w \frac{\partial v}{\partial z} + \frac{u^2 \tan(\varphi)}{a} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial y} - fu + F_{R,y}, \quad (3.113)$$

$$\frac{\partial w}{\partial t} + u \frac{\partial w}{\partial x} + v \frac{\partial w}{\partial y} + w \frac{\partial w}{\partial z} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial z} - g + F_{R,z}. \quad (3.114)$$

3.4.5.5 Modifizierter Coriolis-Parameter

Alle bisher gemachten Näherungen sind global anwendbar. Bei der in diesem Abschnitt gemachten Approximation ist dies nicht mehr der Fall. Man definiert den modifizierten Coriolis-Parameter f^* durch

$$f^* := f \left(1 + \frac{u}{2a\omega \cos(\varphi)} \right). \quad (3.115)$$

f^* ist dabei, anders als f , auch vom Geschwindigkeitsfeld abhängig und beschreibt nicht mehr nur die Coriolis-Kraft. Damit lassen sich die Glg.en (3.112) - (3.113) kürzer notieren als

$$\frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial x} + v \frac{\partial u}{\partial y} + w \frac{\partial u}{\partial z} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial x} + f^* v + F_{R,x}, \quad (3.116)$$

$$\frac{\partial v}{\partial t} + u \frac{\partial v}{\partial x} + v \frac{\partial v}{\partial y} + w \frac{\partial v}{\partial z} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial y} - f^* u + F_{R,y}. \quad (3.117)$$

Für alle dynamischen Überlegungen kann man, zumindest bis in Breiten von 80 Grad, von $f^* = f$ ausgehen. Dies wird in Abb. 3.1 veranschaulicht. Damit erhält man folgende vereinfachte horizontale Bewegungsgleichungen:

$$\frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial x} + v \frac{\partial u}{\partial y} + w \frac{\partial u}{\partial z} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial x} + fv + F_{R,x} \quad (3.118)$$

$$\frac{\partial v}{\partial t} + u \frac{\partial v}{\partial x} + v \frac{\partial v}{\partial y} + w \frac{\partial v}{\partial z} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial y} - fu + F_{R,y} \quad (3.119)$$

Anschaulich bedeutet die Vernachlässigung der Krümmungssterme, dass die Dynamik der Erdatmosphäre (außer

in den hohen Breiten) die eines ebenen, rotierenden Fluides mit y -abhängiger Winkelgeschwindigkeit ist. An den Polen divergieren die Krümmungssterme, dies ist allerdings keine Eigenschaft der Erde, sondern des verwendeten Koordinatensystems. Da man dieses beliebig ausrichten kann, kann man für alle regionalen Betrachtungen die Krümmungssterme vernachlässigen. In einem globalen Modell jedoch nicht.

3.4.5.6 Flachwassergleichungen

Das einfachste Gleichungssystem der Geofluidynamik mit Zeitableitungen ist das der *Flachwassergleichungen* (SWEs, engl. *shallow water equations*). Um dieses herzuleiten, geht man von den Glg.en (3.118) - (3.119) aus und nimmt eine homogene Dichte an, außerdem ignoriert man die Reibung. Damit wird die Kontinuitätsgleichung zu

$$\nabla \cdot \mathbf{U} = 0. \quad (3.120)$$

Das Fluid habe weiterhin eine Oberfläche, an dieser gelte $p = 0$. Die Tiefe des Mediums sei $h = h(x, y, t)$ und der Grund habe die z-Koordinate $b = b(x, y)$. Damit erhält man durch Integration der hydrostatischen Grundgleichung

$$p(z) = -(0 - p(z)) = -(p(b+h) - p(z)) = - \int_z^{b+h} \frac{\partial p}{\partial z} dz = g\rho \int_z^{b+h} dz = (b+h-z)g\rho. \quad (3.121)$$

Somit folgt

$$\frac{\partial p}{\partial x} = g\rho \frac{\partial}{\partial x} (b+h) \quad (3.122)$$

und analog in y-Richtung. Verschwindet die vertikale Scherung der Horizontalbewegung $(\frac{\partial u}{\partial z}, \frac{\partial v}{\partial z})^T$ global zu einem beliebigen Zeitpunkt, so verschwindet auch die lokalzeitliche Tendenz der vertikalen Scherung. Somit ist das Geschwindigkeitsfeld dann zu allen Zeitpunkten höhenunabhängig. Hiervon wird nun ausgegangen. Damit verschwinden die Terme der vertikalen Geschwindigkeitsadvektion. Nun kann man die Kontinuitätsgleichung trivial integrieren:

$$h\nabla \cdot \mathbf{V} = \int_b^{b+h} \nabla \cdot \mathbf{V} dz = - \int_b^{b+h} \frac{\partial w}{\partial z} dz = -w(b+h) + w(b) \quad (3.123)$$

Die Annahme, dass die Horizontalgeschwindigkeit nicht geschert ist und die die Integration Glg. (3.123) ermöglicht hat, gibt den Flachwassergleichungen ihren Namen. Bei großen Tiefen kann hiervon nämlich anschaulicherweise nicht mehr ausgegangen werden. In Absch. 6.3.1 wird über diese Annahme hinausgegangen. Behandelt man Wellen, so kann man die Flachwassergleichungen verwenden, falls

$$\text{Wellenlänge} \gg \text{Tiefe}, \quad (3.124)$$

$$\text{Wellenhöhe} \ll \text{Tiefe} \quad (3.125)$$

gelten, was für die Tide (außer in Randmeeren) sowie die Dünung auf offener See der Fall sein kann.

In der Tiefe b gilt die kinematische Randbedingung:

$$w(b) = \frac{dz}{dt}(b) = \frac{db}{dt} = \mathbf{V} \cdot \nabla_H b \quad (3.126)$$

An der Oberfläche gilt

$$w(b+h) = \frac{D}{Dt}(b+h) = \frac{\partial h}{\partial t} + \mathbf{V} \cdot \nabla_H (b+h). \quad (3.127)$$

Setzt man dies in Glg. (3.123) ein, erhält man

$$h\nabla_H \cdot \mathbf{V} = -\frac{\partial h}{\partial t} - \mathbf{V} \cdot \nabla_H h. \quad (3.128)$$

Somit erhält man folgendes Gleichungssystem:

$$\frac{\partial \mathbf{V}}{\partial t} + (\mathbf{V} \cdot \nabla) \mathbf{V} = -g \nabla_H (h + b) - f(y) \mathbf{k} \times \mathbf{V} \quad (3.129)$$

$$\frac{\partial h}{\partial t} + \nabla_H \cdot (h \mathbf{V}) = 0 \quad (3.130)$$

3.4.5.6.1 Linearisierung Nimmt man einen homogenen Untergrund b an, sowie eine mittlere Tiefe D , der eine Störung d überlagert ist, und vernachlässigt alle nichtlinearen Terme, folgt

$$\frac{\partial \mathbf{V}}{\partial t} = -g \nabla d - f \mathbf{k} \times \mathbf{V}, \quad (3.131)$$

$$\frac{\partial d}{\partial t} + D \nabla \cdot \mathbf{V} = 0. \quad (3.132)$$

3.5 Generalisierte Vertikalkoordinaten

Eine generalisierte Vertikalkoordinate μ wird definiert durch eine Transformation $\mu \leftrightarrow z$. Diese Abbildung ist i. A. von den horizontalen Koordinaten abhängig: $z = z(\varphi, \lambda, \mu)$. Schreibt man für ein Skalarfeld ψ in geographischen Koordinaten mit geodätischer bzw. generalisierter Vertikalkoordinate

$$\psi(\varphi, \lambda, z(\varphi, \lambda, \mu)) = \tilde{\psi}(\varphi, \lambda, \mu), \quad (3.133)$$

so folgt für die Gradienten in diesen Koordinaten

$$\nabla \psi = \begin{pmatrix} \frac{\partial \psi}{\partial \varphi} \\ \frac{\partial \psi}{\partial \lambda} \\ \frac{\partial \psi}{\partial z} \end{pmatrix}, \quad (3.134)$$

$$\nabla \tilde{\psi} = \begin{pmatrix} \frac{\partial \tilde{\psi}}{\partial \varphi} \\ \frac{\partial \tilde{\psi}}{\partial \lambda} \\ \frac{\partial \tilde{\psi}}{\partial \mu} \end{pmatrix}. \quad (3.135)$$

Es gilt

$$\frac{\partial \tilde{\psi}}{\partial \lambda} = \frac{d}{d\lambda} \psi(\varphi, \lambda, z(\varphi, \lambda, \mu)) = \nabla \psi \cdot \begin{pmatrix} \frac{d\varphi}{d\lambda} \\ \frac{d\lambda}{d\lambda} \\ \frac{dz}{d\lambda} \end{pmatrix} = \nabla \psi \cdot \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ \frac{\partial z}{\partial \lambda} \end{pmatrix} = \frac{\partial \psi}{\partial \lambda} + \frac{\partial z}{\partial \lambda} \frac{\partial \psi}{\partial z}. \quad (3.136)$$

Die Ableitungen nach λ sind proportional zu den Ableitungen nach x . Damit folgt

$$\frac{\partial \tilde{\psi}}{\partial x} = \frac{\partial \psi}{\partial x} + \frac{\partial z}{\partial x} \frac{\partial \psi}{\partial z}. \quad (3.137)$$

Unterschlägt man in der Notation den Unterschied von ψ und $\tilde{\psi}$ und kennzeichnet anstatt dessen konstantgehaltene Größen durch Indizes, so erhält man

$$\left(\frac{\partial \psi}{\partial x} \right)_\mu = \left(\frac{\partial \psi}{\partial x} \right)_z + \left(\frac{\partial z}{\partial x} \right)_\mu \frac{\partial \psi}{\partial z}. \quad (3.138)$$

z und μ sind in der Herleitung vertauschbar, daher gilt genauso

$$\left(\frac{\partial \psi}{\partial x} \right)_z = \left(\frac{\partial \psi}{\partial x} \right)_\mu + \left(\frac{\partial \mu}{\partial x} \right)_z \frac{\partial \psi}{\partial \mu}. \quad (3.139)$$

In den herrschenden Gleichungen treten partielle Ableitungen $\frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial z}$ auf, hierbei wurde bisher z als Vertikalkoordinate verwendet. Will man auf eine generalisierte Koordinate μ transformieren, nutzt man die Kettenregel und

stellt Glg. (3.138) um:

$$\frac{\partial \psi}{\partial z} = \frac{\partial \mu}{\partial z} \frac{\partial \psi}{\partial \mu} \quad (3.140)$$

$$\left(\frac{\partial \psi}{\partial x} \right)_z = \left(\frac{\partial \psi}{\partial x} \right)_\mu - \left(\frac{\partial z}{\partial x} \right)_\mu \frac{\partial \mu}{\partial z} \frac{\partial \psi}{\partial \mu} \quad (3.141)$$

Analog auch in y-Richtung. Die materielle Ableitung $\frac{D}{Dt}$ ist unabhängig von der Vertikalkoordinate. Die horizontale materielle Ableitung $\frac{D_H}{Dt}$ (s. Glg. (A.185)) jedoch ist abhängig vom Koordinatensystem. z ist in obiger Herleitung nicht ausgezeichnet, daher kann z durch eine beliebige Vertikalkoordinate r ersetzt werden.

3.5.1 p-System

Im p-System verwendet man den Druck p als Vertikalkoordinate, was bei Hydrostatik wegen $\frac{\partial p}{\partial z} = -g\rho \neq 0$ möglich ist. Für die *totale Ableitung* im p-System gilt dann

$$\frac{D\psi}{Dt} = \frac{\partial \psi}{\partial t} + u \frac{\partial \psi}{\partial x} + v \frac{\partial \psi}{\partial y} + \omega \frac{\partial \psi}{\partial p}. \quad (3.142)$$

Hierbei ist $\omega := \frac{Dp}{Dt}$ die Vertikalgeschwindigkeit im p-System. Nun sollen die herrschenden Gleichungen ins p-System transformiert werden. Die Kontinuitätsgleichung lautet allgemein

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{U}) = 0. \quad (3.143)$$

Setzt man die hydrostatische Grundgleichung $\rho = -\frac{1}{g} \frac{\partial p}{\partial z}$ ein, so folgt

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 p}{\partial z \partial t} + \nabla \cdot \left(\frac{\partial p}{\partial z} \mathbf{U} \right) &= 0 \\ \Leftrightarrow \frac{\partial^2 p}{\partial z \partial t} + \mathbf{U} \cdot \nabla \left(\frac{\partial p}{\partial z} \right) + \frac{\partial p}{\partial z} \nabla \cdot \mathbf{U} &= \frac{\partial^2 p}{\partial z \partial t} + \frac{\partial}{\partial z} (\mathbf{U} \cdot \nabla p) - \nabla p \cdot \frac{\partial \mathbf{U}}{\partial z} + \frac{\partial p}{\partial z} \nabla \cdot \mathbf{U} \\ = \frac{\partial \omega}{\partial z} - \nabla_H p \cdot \frac{\partial \mathbf{V}}{\partial z} + \frac{\partial p}{\partial z} \nabla \cdot \mathbf{V} &= 0. \end{aligned} \quad (3.144)$$

Hierbei wurde ein kleiner Transformationsterm vernachlässigt, s. Glg. (A.281). Nach der Kettenregel ist $\frac{\partial}{\partial z} = \frac{\partial p}{\partial z} \frac{\partial}{\partial p}$. Damit folgt

$$\frac{\partial \omega}{\partial p} + \nabla \cdot \mathbf{V} - \nabla_H p \cdot \frac{\partial \mathbf{V}}{\partial p} = 0. \quad (3.145)$$

Verwendet man Glg. (3.139), erhält man

$$\left(\frac{\partial u}{\partial x} \right)_z = \left(\frac{\partial u}{\partial x} \right)_p + \frac{\partial u}{\partial p} \left(\frac{\partial p}{\partial x} \right)_z \Leftrightarrow \left(\frac{\partial u}{\partial x} \right)_z - \frac{\partial u}{\partial p} \left(\frac{\partial p}{\partial x} \right)_z = \left(\frac{\partial u}{\partial x} \right)_p \quad (3.146)$$

und analog für v . Nicht näher bezeichnete partielle Ableitungen sind bisher Ableitungen im z-System. Nun werden Ableitungen im p-System verwendet:

$$\frac{\partial \omega}{\partial p} + \nabla \cdot \mathbf{V} = 0. \quad (3.147)$$

Im p-System reduziert sich die Kontinuitätsgleichung also auf eine rein diagnostische Gleichung, die formal der Kontinuitätsgleichung für ein inkompressibles Fluid im z-System entspricht. Skaliert man diese Gleichung mit den Werten aus Tab. 1.2, folgt in SI-Einheiten

- $\nabla \cdot \mathbf{V} \sim 10^{-5}$

- $\frac{\partial \omega}{\partial p} \sim 10^{-6}$.

Die Divergenz des Horizontalwindes ist also in Wirklichkeit eine Größenordnung kleiner als die synoptisch-skalige Vorticity.

Will man die Bewegungsgleichungen für Flachgeofluide Glg.en (3.118) - (3.119) transformieren, so müssen auf der linken Seite nur die totalen Ableitungen im p-System notiert werden. Der Druckgradient macht etwas mehr Arbeit. Mit Glg. (3.139) sowie der hydrostatischen Approximation folgt

$$\left(\frac{\partial p}{\partial x} \right)_p = 0 = \left(\frac{\partial p}{\partial x} \right)_z + \left(\frac{\partial z}{\partial x} \right)_p \frac{\partial p}{\partial z} = \left(\frac{\partial p}{\partial x} \right)_z - g\rho \left(\frac{\partial z}{\partial x} \right)_p. \quad (3.148)$$

Es gilt also

$$\frac{1}{\rho} \left(\frac{\partial p}{\partial x} \right)_z = g \left(\frac{\partial z}{\partial x} \right)_p = \left(\frac{\partial \varphi}{\partial x} \right)_p \quad (3.149)$$

und analog in y-Richtung. Damit werden die horizontalen Impulsgleichungen im p-System zu

$$\frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial x} + v \frac{\partial u}{\partial y} + \omega \frac{\partial u}{\partial p} = - \frac{\partial \varphi}{\partial x} + fv + F_{R,x}, \quad (3.150)$$

$$\frac{\partial v}{\partial t} + u \frac{\partial v}{\partial x} + v \frac{\partial v}{\partial y} + \omega \frac{\partial v}{\partial p} = - \frac{\partial \varphi}{\partial y} - fu + F_{R,y}. \quad (3.151)$$

3.5.2 θ -System

In einer thermisch stabil geschichteten Atmosphäre kann θ als generalisierte Vertikalkoordinate verwendet werden. Außerdem wird hier von Hydrostatik ausgegangen. Dies bezeichnet man als θ -System oder auch als *isentrope Koordinaten*. Notiert man die Glg.en (3.140) - (3.141) mit $\mu = \theta$, folgt

$$\frac{\partial \psi}{\partial z} = \frac{\partial \theta}{\partial z} \frac{\partial \psi}{\partial \theta}, \quad (3.152)$$

$$\left(\frac{\partial \psi}{\partial x} \right)_z = \left(\frac{\partial \psi}{\partial x} \right)_\theta - \left(\frac{\partial z}{\partial x} \right)_\theta \frac{\partial \theta}{\partial z} \frac{\partial \psi}{\partial \theta} = \left(\frac{\partial \psi}{\partial x} \right)_\theta + \rho \left(\frac{\partial \varphi}{\partial x} \right)_\theta \frac{\partial \theta}{\partial p} \frac{\partial \psi}{\partial \theta}, \quad (3.153)$$

$$\left(\frac{\partial \psi}{\partial y} \right)_z = \left(\frac{\partial \psi}{\partial y} \right)_\theta - \left(\frac{\partial z}{\partial y} \right)_\theta \frac{\partial \theta}{\partial z} \frac{\partial \psi}{\partial \theta} = \left(\frac{\partial \psi}{\partial y} \right)_\theta + \rho \left(\frac{\partial \varphi}{\partial y} \right)_\theta \frac{\partial \theta}{\partial p} \frac{\partial \psi}{\partial \theta}. \quad (3.154)$$

Im Fall $\psi = p$ folgt

$$\left(\frac{\partial p}{\partial x} \right)_z = \left(\frac{\partial p}{\partial x} \right)_\theta - \left(\frac{\partial z}{\partial x} \right)_\theta \frac{\partial \theta}{\partial z} \frac{\partial p}{\partial \theta} = \left(\frac{\partial p}{\partial x} \right)_\theta + \rho \left(\frac{\partial \varphi}{\partial x} \right)_\theta. \quad (3.155)$$

Es gilt

$$\begin{aligned}
 p &= \varrho R_d \theta \left(\frac{p}{p_0} \right)^{\frac{R_d}{c(p)}} \\
 \Rightarrow \left(\frac{\partial p}{\partial x} \right)_\theta &= R_d \theta \left(\frac{p}{p_0} \right)^{\frac{R_d}{c(p)}} \left(\frac{\partial \varrho}{\partial x} \right)_\theta + \varrho R_d \theta - \frac{1}{R_d} \frac{R_d}{c(p)} p^{\frac{R_d}{c(p)} - 1} \left(\frac{\partial p}{\partial x} \right)_\theta \\
 &= R_d T \left(\frac{\partial \varrho}{\partial x} \right)_\theta + \varrho R_d \theta \left(\frac{p}{p_0} \right)^{\frac{R_d}{c(p)}} \frac{R_d}{c_p p} \left(\frac{\partial p}{\partial x} \right)_\theta \\
 &= R_d T \left(\frac{\partial \varrho}{\partial x} \right)_\theta + \varrho R_d T \frac{R_d}{c(p) \varrho R_d T} \left(\frac{\partial p}{\partial x} \right)_\theta \\
 &= R_d T \left(\frac{\partial \varrho}{\partial x} \right)_\theta + \frac{R_d}{c(p)} \left(\frac{\partial p}{\partial x} \right)_\theta \\
 \Rightarrow \left(\frac{\partial p}{\partial x} \right)_\theta &= \frac{c(p) R_d T}{c(v)} \left(\frac{\partial \varrho}{\partial x} \right)_\theta = \frac{c(p)}{c(v)} T \left(\frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{p}{T} \right) \right)_\theta \\
 &= \frac{c(p)}{c(v)} T \left(\frac{1}{T} \frac{\partial p}{\partial x} - \frac{p}{T^2} \frac{\partial T}{\partial x} \right) = \frac{c(p)}{c(v)} \left(\frac{\partial p}{\partial x} \right)_\theta - \frac{c(p)}{c(v)} \frac{p}{T} \left(\frac{\partial T}{\partial x} \right)_\theta \\
 &= \frac{c(p)}{c(v)} \left(\frac{\partial p}{\partial x} \right)_\theta - \frac{c(p)}{c(v)} \varrho R_d \left(\frac{\partial T}{\partial x} \right)_\theta \\
 \Rightarrow \frac{R_d}{c(v)} \left(\frac{\partial p}{\partial x} \right)_\theta &= \frac{c(p)}{c(v)} \varrho R_d \left(\frac{\partial T}{\partial x} \right)_\theta \\
 \Rightarrow \left(\frac{\partial p}{\partial x} \right)_\theta &= c(p) \varrho \left(\frac{\partial T}{\partial x} \right)_\theta. \tag{3.156}
 \end{aligned}$$

Somit erhält man

$$\frac{1}{\varrho} \left(\frac{\partial p}{\partial x} \right)_z = \frac{\partial}{\partial x} \left(c(p) T + \varphi \right), \tag{3.157}$$

wobei auf der rechten Seite die partielle Ableitung im θ -System durchgeführt wird. Man definiert

$$M := c(p) T + \varphi \tag{3.158}$$

als das *Montgomery-Potential*.

3.5.3 σ_z -System

Mit h als *Orographie* und H als Oberrand der Atmosphäre definiert man die *orographische Koordinate* σ_z durch

$$\sigma_z := \frac{z - h}{H - h} \Leftrightarrow z = h + \sigma_z (H - h), \tag{3.159}$$

daraus folgen

$$\frac{\partial \sigma_z}{\partial z} = \frac{1}{H - h}, \tag{3.160}$$

$$\left(\frac{\partial z}{\partial x} \right)_{\sigma_z} = (1 - \sigma_z) \frac{\partial h}{\partial x}, \tag{3.161}$$

$$\left(\frac{\partial z}{\partial x} \right)_{\sigma_z} \frac{\partial \sigma_z}{\partial z} = \frac{1 - \sigma_z}{H - h} \frac{\partial h}{\partial x}. \tag{3.162}$$

3.5.4 σ_p -System

Mit p_S als Bodendruck und p_T als Druck am Oberrand der Atmosphäre definiert man eine weitere orographische Koordinate σ_p durch

$$\sigma_p := \frac{p - p_T}{p_S - p_T} \Leftrightarrow p = p_T + \sigma_p (p_S - p_T), \quad (3.163)$$

daraus folgen

$$\frac{\partial \sigma_p}{\partial p} = \frac{1}{p_S - p_T}, \quad (3.164)$$

$$\left(\frac{\partial p}{\partial x} \right)_{\sigma_p} = \sigma_p \frac{\partial p_S}{\partial x}, \quad (3.165)$$

$$\left(\frac{\partial p}{\partial x} \right)_{\sigma_p} \frac{\partial \sigma_p}{\partial z} = \frac{\sigma_p}{p_S - p_T} \frac{\partial p_S}{\partial x}. \quad (3.166)$$

3.6 Erster Hauptsatz in der Atmosphäre

3.6.1 Feuchte Luft

Der Erste Hauptsatz Glg. (2.674) ergibt durch Differentiation nach der Zeit

$$c^{(v)} \frac{DT}{Dt} + p \frac{Da}{Dt} = aq, \quad (3.167)$$

Leitet man die Zustandsgleichung zeitlich ab, folgt

$$\omega a + p \frac{Da}{Dt} = R_s \frac{DT}{Dt}. \quad (3.168)$$

Mit den Glg.en (3.167) und (2.795) folgt

$$\begin{aligned} \omega a + aq - c^{(v)} \frac{DT}{Dt} &= R_s \frac{DT}{Dt} \Leftrightarrow -\omega a + (R_s + c^{(v)}) \frac{DT}{Dt} = c^{(p)} \frac{DT}{Dt} - a\omega = aq \\ \frac{d_H T}{dt} - \omega \left(\frac{a}{c^{(p)}} - \frac{\partial T}{\partial p} \right) &= \frac{a}{c^{(p)}} q. \end{aligned} \quad (3.169)$$

Mit der Zustandsgleichung folgt

$$\frac{a}{c^{(p)}} - \frac{\partial T}{\partial p} = \frac{R_s T}{c^{(p)} p} - \frac{\partial T}{\partial p} =: S_p, \quad (3.170)$$

dies definiert den Stabilitätsparameter S_p . Man erhält

$$\frac{D_H T}{Dt} - S_p \omega = \frac{a}{c^{(p)}} q. \quad (3.171)$$

Ein Prozess ist adiabatisch, wenn keine Wärme übertragen wird, $q = 0$. Der Erste Hauptsatz lautet dann mit den Zustandsgrößen des idealen Gases

$$c^{(v)} m \frac{DT}{Dt} = -p \frac{DV}{Dt}. \quad (3.172)$$

Eine Prozesskoordinate ist eine Größe, als deren Funktion man alle anderen Zustandsgrößen schreiben kann. Die Zeit ist immer eine mögliche Prozesskoordinate, hier sei jedoch das Volumen verwendet. Mit der Kettenregel

ergibt sich

$$c^{(v)} m \frac{dT}{dp} \frac{dp}{dV} = -p. \quad (3.173)$$

Aus der Zustandsgleichung $pV = nRT$ folgt $T = \frac{pV}{nR}$, also lautet die totale Ableitung der Temperatur nach dem Druck für diesen Prozess

$$\frac{dT}{dp} = \frac{\partial T}{\partial p} + \frac{\partial T}{\partial V} \frac{dV}{dp} = \frac{V}{nR} + \frac{p}{nR} \frac{dV}{dp}. \quad (3.174)$$

Setzt man dies in Glg. (3.173) ein, erhält man

$$\begin{aligned} c^{(v)} m \frac{dp}{dV} \left(\frac{V}{nR} + \frac{p}{nR} \frac{dV}{dp} \right) &= -p \Leftrightarrow \frac{c^{(v)}}{R_s} V \frac{dp}{dV} + \frac{c^{(v)}}{R_s} p = -p \\ \Leftrightarrow V \frac{dp}{dV} &= -p \left(1 + \frac{R_s}{c^{(v)}} \right). \end{aligned} \quad (3.175)$$

Macht man mit einem $\alpha > 0$ den Ansatz

$$p(V) = p_0 \left(\frac{V_0}{V} \right)^\alpha, \quad (3.176)$$

folgt

$$\frac{dp}{dV} = -\alpha p_0 V_0^\alpha V^{-\alpha-1} = -\alpha p_0 \left(\frac{V_0}{V} \right)^\alpha \frac{1}{V} = -\alpha \frac{p}{V} \quad (3.177)$$

und durch Koeffizientenvergleich erhält man

$$-\alpha p = -p \left(1 + \frac{R_s}{c^{(v)}} \right) \Leftrightarrow \alpha = 1 + \frac{R_s}{c^{(v)}} = \frac{c^{(p)}}{c^{(v)}}. \quad (3.178)$$

$\alpha > 1$ bezeichnet man als den Adiabaten- oder Isentropenexponenten.

Die *potentielle Temperatur* θ ist die Temperatur, die ein Gaspaket hätte, brächte man es adiabatisch auf einen willkürlichen Referenzdruck p_0 . Ersetzt man mittels der Zustandsgleichung in der Adiabaten Glg. (3.176) das Volumen durch die Temperatur, erhält man

$$p_0 = p \left(\frac{V}{V_0} \right)^\alpha = p \left(\frac{T p_0}{p \theta} \right)^\alpha \Leftrightarrow T_0^\alpha = T^\alpha \left(\frac{p_0}{p} \right)^{\alpha-1} \Leftrightarrow \theta = T \left(\frac{p_0}{p} \right)^{\frac{R_s}{c^{(p)}}} \quad (3.179)$$

Dies kann man nutzen, um die Definition des Stabilitätsparameters S_p Glg. (3.170) zu vereinfachen:

$$-\frac{T}{\theta} \frac{\partial \theta}{\partial p} = -\frac{T}{\theta} \left(\frac{\partial T}{\partial p} - T \frac{1}{p} \frac{R_s}{c^{(p)}} \right) \left(\frac{p_0}{p} \right)^{\frac{R_s}{c^{(p)}}} = \frac{R_s T}{c^{(p)} p} - \frac{\partial T}{\partial p} = S_p \quad (3.180)$$

Man erhält für die potentielle Dichte ϱ_0 den Ausdruck

$$\varrho_0 = \varrho \left(\frac{p_0}{p} \right)^{\frac{1}{\alpha}}. \quad (3.181)$$

In der Meteorologie ist $p_0 := 1000$ hPa. Der *trockenadiabatische Temperaturgradient* bezeichnet die Abnahme der Temperatur mit der Höhe bei adiabatischem Aufstieg eines trockenen Luftteilchens. Mithilfe der potentiellen Temperatur kann man sich den Wert leicht herleiten. Es gilt ja

$$\frac{dT}{dz} = \theta \frac{dp}{dz} \frac{R_s}{c^{(p)}} \frac{1}{p_0} \left(\frac{p}{p_0} \right)^{\frac{R_s}{c^{(p)}}-1}, \quad (3.182)$$

da man von einem adiabatischen Prozess ausgeht und sich die potentielle Temperatur dabei nicht ändert. p_0 ist dabei der Referenzdruck, dies soll hier gleichzeitig das Niveau bezeichnen, in dem abgeleitet wird. Setzt man die

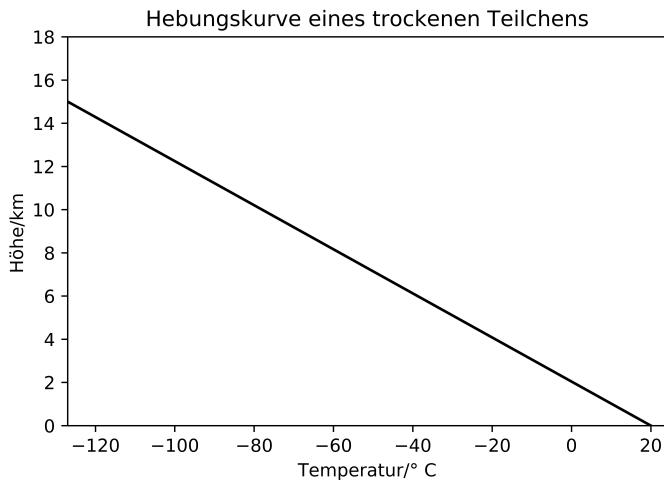


Abbildung 3.2: Die adiabatische Hebung eines trockenen Luftteilchens, diese Kurve bezeichnet man auch als Hebungskurve.

hydrostatische Approximation und die Zustandsgleichung idealer Gase ein, folgt

$$\frac{dT}{dz} = -\theta g \rho_0 \frac{R_s}{c^{(p)}} \frac{1}{p_0} = -\frac{g}{c^{(p)}} \approx -0,98 \frac{\text{K}}{100 \text{ m}}, \quad (3.183)$$

man definiert den trockenadiabatischen Gradienten Γ_d als den Betrag der Abnahme

$$\Gamma_d := \frac{g}{c^{(p)}} \approx 0,98 \frac{\text{K}}{100 \text{ m}}. \quad (3.184)$$

Der trockenadiabatische Temperaturgradient ist kein Temperaturgradient im eigentlichen Sinne, er ist die Ableitung der Funktion $T = T(z)$, die die adiabatische Hebung eines Teilchens beschreibt. Diese Funktion nennt man auch Trockenadiabate. Er ist nicht die Vertikalkomponente des atmosphärischen Temperaturgradienten ∇T . Diese muss überhaupt nicht, auch nicht näherungsweise, mit der Trockenadiabaten übereinstimmen. Es gilt nämlich

$$\begin{aligned} \frac{\partial T}{\partial z} &= \theta \frac{\partial p}{\partial z} \frac{R_s}{c^{(p)}} \frac{1}{p_0} \left(\frac{p}{p_0} \right)^{\frac{R_s}{c^{(p)}} - 1} + \frac{\partial \theta}{\partial z} \left(\frac{p}{p_0} \right)^{\frac{R_s}{c^{(p)}}} = -\frac{g}{c^{(p)}} - g \frac{p}{R_s T} \frac{\partial \theta}{\partial p} \left(\frac{p}{p_0} \right)^{\frac{R_s}{c^{(p)}}} \\ \Rightarrow g \frac{p}{R_s \theta} \frac{\partial \theta}{\partial p} &= -(\Gamma_d - \Gamma), \end{aligned} \quad (3.185)$$

mit

$$\Gamma := -\frac{\partial T}{\partial z}. \quad (3.186)$$

Formuliert man den Ersten Hauptsatz für die Atmosphäre, kann man zunächst nur die feuchte Luft als Komponente der Luft betrachten und mit der Gleichung

$$c_h^{(v)} \frac{DT}{Dt} + p \frac{D}{Dt} \frac{1}{\rho'_h} = \frac{q_h}{\rho'_h} \quad (3.187)$$

arbeiten, hierbei sind q_h die auf die feuchte Luft wirkenden Wärmeflüsse pro Volumen. In der Atmosphäre sind jedoch die diabatischen Effekte als kleine Störung auf der adiabatischen Grundannahme zu verstehen, was durch

die Verwendung der potentiellen Temperatur hervorgehoben wird. Die Zeitableitung von Glg. (3.179) ist

$$\frac{DT}{Dt} = \frac{D\theta}{Dt} \left(\frac{p}{p_0} \right)^{R_s/c^{(p)}} + \theta \frac{dp}{dt} \frac{1}{p_0 c^{(p)}} R_s \left(\frac{p}{p_0} \right)^{R_s/c^{(p)}-1} = \left(\frac{p}{p_0} \right)^{R_s/c^{(p)}} \frac{D\theta}{Dt} + \frac{T}{p} \omega \frac{R_s}{c^{(p)}}. \quad (3.188)$$

Setzt man dies in Glg. (3.187) mit den Ersetzungen

$$R_s \rightarrow R_h, \quad (3.189)$$

$$c^{(p)} \rightarrow c_h^{(p)} \quad (3.190)$$

ein, folgt

$$\begin{aligned} c_h^{(v)} \left(\frac{p}{p_0} \right)^{R_s/c^{(p)}} \frac{D\theta}{Dt} + \frac{T}{p} \omega \frac{R_h}{c_h^{(p)}} c_h^{(v)} + p \frac{D}{Dt} \frac{R_h T}{p} &= \frac{q_h}{\varrho_h} \\ \Leftrightarrow \frac{D\theta}{Dt} \left(\frac{p}{p_0} \right)^{R_s/c^{(p)}} + \frac{\omega T}{p} \frac{R_h}{c_h^{(p)}} - \frac{R_h T}{p c_h^{(v)}} \omega + \frac{R_h}{c_h^{(v)}} \frac{DT}{Dt} &= \frac{1}{c_h^{(v)}} \frac{q_h}{\varrho_h} \\ \Leftrightarrow \left(\frac{p}{p_0} \right)^{R_s/c^{(p)}} \frac{D\theta}{Dt} + \frac{\omega R_h T}{p} \left(\frac{1}{c_h^{(p)}} - \frac{1}{c_h^{(v)}} \right) & \\ + \frac{R_h}{c_h^{(v)}} \left(\left(\frac{p}{p_0} \right)^{R_s/c^{(p)}} \frac{D\theta}{Dt} + \frac{T}{p} \omega \frac{R_h}{c_h^{(p)}} \right) &= \frac{1}{c_h^{(v)}} \frac{q_h}{\varrho_h} \\ \Leftrightarrow \left(\frac{p}{p_0} \right)^{R_s/c^{(p)}} \frac{D\theta}{Dt} \frac{c_h^{(p)}}{c_h^{(v)}} + \frac{\omega R_h T}{p} \frac{c_h^{(v)} - c_h^{(p)} + R_h}{c_h^{(v)} c_h^{(p)}} &= \frac{1}{c_h^{(v)}} \frac{q_h}{\varrho_h}. \end{aligned} \quad (3.191)$$

Damit wird der Erste Hauptsatz der Thermodynamik für ein Gas zu

$$\frac{D\theta}{Dt} = \left(\frac{p_0}{p} \right)^{R_s/c^{(p)}} \frac{1}{c^{(p)} \varrho} q_T = \frac{\theta}{T c_h^{(p)} \varrho} \left(q_T - \frac{p}{\varrho_h} q_\varrho \right). \quad (3.192)$$

Multipliziert man diese Gleichung mit ϱ_h , erhält man

$$\varrho_h \frac{\partial \theta}{\partial t} + \varrho_h \mathbf{U} \cdot \nabla \theta = \frac{\theta}{T c_h^{(p)} \varrho} \left(q_h - \frac{p}{\varrho_h} Q_h \right) \quad (3.193)$$

Addiert man das Produkt der potentiellen Temperatur mit der Kontinuitätsgleichung für feuchte Luft

$$\theta \frac{\partial \varrho_h}{\partial t} + \theta \mathbf{U} \cdot \nabla \varrho_h + \theta \varrho_h \nabla \cdot \mathbf{U} = \theta Q_h \quad (3.194)$$

hinzzu, folgt

$$\frac{\partial (\varrho_h \theta)}{\partial t} + \nabla \cdot (\varrho_h \theta \mathbf{U}) = \frac{\theta}{T c_h^{(p)} \varrho} \left(q_h - \frac{p}{\varrho_h} Q_h \right) + \theta Q_h. \quad (3.195)$$

Nun soll noch die Definition der potentiellen Temperatur in die Zustandsgleichung eingesetzt werden:

$$\begin{aligned} p &= \varrho R_d \theta \left(\frac{p}{p_0} \right)^{R_d/c^{(p)}} \Rightarrow p^{1-R_s/c^{(p)}} = \varrho R_d \theta \frac{1}{p_0^{R_s/c^{(p)}}} \\ \Rightarrow p^{1/z} &= \varrho R_d \theta \frac{1}{p_0^{R_s/c^{(p)}}} \Rightarrow p = (\varrho R_d \theta)^z \left(\frac{1}{p_0} \right)^{z-1} \end{aligned} \quad (3.196)$$

Auch für p kann eine prognostische Gleichung hergeleitet werden. Hierzu geht man zunächst davon aus, dass R_h

homogen ist:

$$p = \varrho R_h T \Rightarrow \frac{Dp}{Dt} = R_h \left(T \frac{D\varrho}{Dt} + \varrho \frac{DT}{Dt} \right) \quad (3.197)$$

Mit

$$\frac{D\varrho}{Dt} = -\varrho \nabla \cdot \mathbf{U} + q_m, \quad (3.198)$$

$$\frac{DT}{Dt} = \frac{T D\theta}{\theta Dt} + \frac{TR_h}{c^{(p)} p} \frac{Dp}{Dt} \quad (3.199)$$

folgt

$$\begin{aligned} \frac{Dp}{Dt} &= R_d T \left(-\varrho \nabla \cdot \mathbf{U} + q_{\varrho_h} \right) + R_h \varrho \left(\frac{T D\theta}{\theta Dt} + \frac{TR_h}{c^{(p)} p} \frac{Dp}{Dt} \right) \\ &= -p \nabla \cdot \mathbf{U} + R_h T q_{\varrho_h} + \frac{p}{\theta} \frac{D\theta}{Dt} + \frac{R_d}{c^{(p)}} \frac{Dp}{Dt} \\ \Leftrightarrow \frac{c^{(v)}}{c^{(p)}} \frac{Dp}{Dt} &= -p \nabla \cdot \mathbf{U} + R_d T q_{\varrho_h} + \frac{p}{\theta} \frac{D\theta}{Dt} \\ \frac{Dp}{Dt} &= -\mathbf{U} \cdot \nabla p + \frac{c^{(p)}}{c^{(v)}} \left[-p \nabla \cdot \mathbf{U} + R_d T q_{\varrho_h} + \frac{p}{T c_h^{(p)} \varrho_h} \left(q_h - \frac{p}{\varrho_h} q_m \right) \right]. \end{aligned} \quad (3.200)$$

Definiert man den *Exner-Druck* Π durch

$$\Pi := \frac{T}{\theta} = \left(\frac{p}{p_\circ} \right)^{R_d/c^{(p)}} \Leftrightarrow p = \Pi^{c^{(p)}/R_d} p_\circ, \quad (3.201)$$

gilt der Zusammenhang

$$\begin{aligned} p &= \varrho R_d \theta \Pi \Leftrightarrow \Pi^{c^{(p)}/R_d} = \frac{\varrho R_d \theta}{p_\circ} \Pi \Leftrightarrow \Pi^{c^{(v)}/R_d} = \frac{\varrho R_d \theta}{p_\circ} \\ \Pi &= \left(\frac{\varrho R_d \theta}{p_\circ} \right)^{R_d/c^{(v)}}. \end{aligned} \quad (3.202)$$

Hieraus folgt

$$\nabla p = R_d \theta \varrho \nabla \Pi + R_d \Pi \nabla (\varrho \theta) = c^{(p)} \theta \varrho \nabla \Pi - c^{(v)} \theta \varrho \nabla \Pi + R_d \Pi \nabla (\varrho \theta). \quad (3.203)$$

Man stellt fest:

$$\begin{aligned} -c^{(v)} \theta \varrho \nabla \Pi + R_d \Pi \nabla (\varrho \theta) &= -\left(\frac{R_d}{p_\circ} \right)^{R_d/c^{(v)}} c^{(v)} \theta \varrho \nabla (\varrho \theta)^{R_d/c^{(v)}} + R_d \Pi \nabla (\varrho \theta) \\ \stackrel{\text{Glg. (3.202)}}{=} R_d &\left(\Pi - \left(\frac{R_d}{p_\circ} \right)^{R_d/c^{(v)}} (\varrho \theta)^{R_d/c^{(v)}} \right) \nabla (\varrho \theta) = 0 \end{aligned} \quad (3.204)$$

Somit kann man für die Druckgradientbeschleunigung schreiben

$$-\frac{1}{\varrho} \nabla p = -c^{(p)} \theta \nabla \Pi. \quad (3.205)$$

Mit Glg. (A.226) folgt

$$\begin{aligned} \nabla \cdot (\varrho c^{(p)} \Pi \theta \mathbf{v}) &= \varrho c^{(p)} \theta \mathbf{v} \cdot \nabla \Pi + \Pi \nabla \cdot (\varrho c^{(p)} \theta \mathbf{v}) \\ \Leftrightarrow -\varrho \mathbf{v} \cdot c^{(p)} \theta \nabla \Pi &= -\nabla \cdot (\varrho c^{(p)} T \mathbf{v}) + c^{(p)} \Pi \nabla \cdot (\varrho \theta \mathbf{v}) \\ \Leftrightarrow -\varrho \mathbf{v} \cdot c^{(p)} \theta \nabla \Pi &= -\nabla \cdot (\varrho h \mathbf{v}) + c^{(p)} \Pi \nabla \cdot (\varrho \theta \mathbf{v}) \end{aligned} \quad (3.206)$$

mit der spezifischen Enthalpie h . Hieraus kann man ablesen:

- Wirkt der Druckgradient beschleunigend, so divergiert der Fluss der potentiellen Temperatur stärker als der Fluss der Enthalpie.
- Wirk der Druckgradient bremsend, so divergiert der Fluss der Enthalpie stärker als der Fluss der potentiellen Temperatur.

Setzt man die Zustandsgleichungen Glg.en (2.788) und (2.790) in Glg. (2.786) ein, folgt unter Vernachlässigung des Ungefähr-Zeichens

$$\begin{aligned} \frac{S(E, V, N)}{k_B} &= N \ln \left(\frac{k_B T}{p} \right) + \frac{3N}{2} \ln \left(\frac{3}{2} k_B T \right) = \frac{5N}{2} \ln(T) - N \ln(p) + N \ln(c') \\ \Leftrightarrow S(E, V, N) &= C^{(p)} \ln(T) - N k_B \ln(p) \end{aligned} \quad (3.207)$$

mit einer Konstanten c' . Somit gilt wiederum bis auf eine Konstante

$$\begin{aligned} S(E, V, N) &= C^{(p)} \ln(\theta) + C^{(p)} \frac{c^{(p)} - c^{(v)}}{c^{(p)}} \ln(p) - N k_B \ln(p) \\ &= C^{(p)} \ln(\theta) + m \frac{N_A k_B}{M} \ln(p) - N k_B \ln(p) = C^{(p)} \ln(\theta). \end{aligned} \quad (3.208)$$

Für die spezifische Entropie s gilt somit

$$s = c^{(p)} \ln(\theta). \quad (3.209)$$

Man kann auch s bzw. $s' := \ln(\theta)$ als Zustandsgröße verwenden. Es gilt nämlich

$$\frac{Ds'}{Dt} = \frac{1}{\theta} \frac{D\theta}{Dt} = \frac{1}{T c_h^{(p)} \varrho} \left(q_T - \frac{p}{\varrho} q_\varrho \right). \quad (3.210)$$

Hieraus folgt mit der Kontinuitätsgleichung für ϱ

$$\begin{aligned} \varrho \frac{Ds'}{Dt} &= \frac{\varrho}{\theta} \frac{D\theta}{Dt} \\ \Rightarrow \frac{\partial (\varrho s')}{\partial t} + \nabla \cdot (\varrho s' \mathbf{U}) &= \frac{1}{T c^{(p)}} \left(q_T - \frac{p}{\varrho} q_\varrho \right) + s' q_\varrho = \frac{q_T}{T c^{(p)}} + q_\varrho \left(s' - \frac{R_d}{c^{(p)}} \right). \end{aligned} \quad (3.211)$$

In der isentropen Atmosphäre (Atmosphäre homogener spezifischer Entropie) ist also nach Glg. (3.209) auch die potentielle Temperatur homogen. Dies führt zu einer anderen Abhängigkeit des Drucks von der Höhe als im Fall der isothermen Atmosphäre. Ist $\Gamma_d > 0$ der trockenadiabatische Temperaturgradient, gilt für die Temperatur $T(z) = T_0 - \Gamma_d z$ mit $T_0 := T(z=0)$. Damit folgt

$$\frac{\partial p}{\partial z} = -g\varrho = -g \frac{p}{R_d T} = -\frac{g}{R_d} \frac{p}{T_0 - \Gamma_d z} = \frac{gp}{R_d(\Gamma_d z - T_0)} \quad (3.212)$$

als zu lösende Differenzialgleichung für $p = p(z)$. Macht man den Ansatz

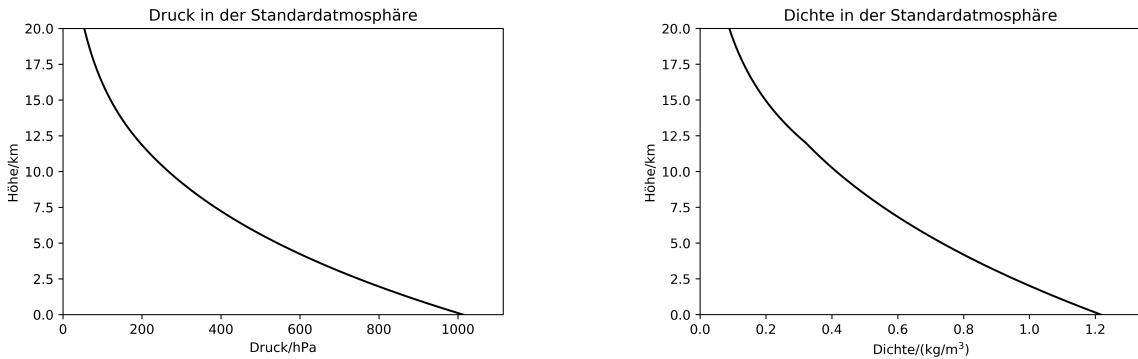
$$p(z) = C \exp[f(z)] \quad (3.213)$$

mit einer stetig-differenzierbaren Funktion $f = f(z)$ und einer Konstanten $C > 0$, so folgt

$$\frac{\partial p}{\partial z} = \frac{\partial f}{\partial z} p, \quad (3.214)$$

man erhält also für f

$$\frac{\partial f}{\partial z} = \frac{g}{R_d(\Gamma_d z - T_0)}, \quad (3.215)$$



dies ist gelöst für

$$f = \frac{g}{R_d \Gamma_d} \ln (T_o - \Gamma_d z). \quad (3.216)$$

Damit folgt für den Druck

$$p(z) = C \exp \left(\frac{g}{R_d \Gamma_d} \ln (T_o - \Gamma_d z) \right) = C (T_o - \Gamma_d z)^{\frac{g}{R_d \Gamma_d}}, \quad (3.217)$$

mit $p(o) = p_o$ folgt $C = \frac{p_o}{T_o^{\frac{g}{R_d \Gamma_d}}}$. Es gilt also

$$p(z) = p_o \left(1 - \frac{\Gamma_d z}{T_o} \right)^{\frac{g}{R_d \Gamma_d}}. \quad (3.218)$$

In der Troposphäre ist eine mit der Höhe lineare Temperaturabnahme realistischer als Isothermie. Allerdings ist der trockenadiabatische Gradient klimatologisch zu extrem. Man nimmt als *Standardatmosphäre* eine Atmosphäre mit einer auf die Geopotentialfläche Null reduzierten Temperatur von $T_o = 290 \text{ K} = 16,85^\circ \text{C}$ an und einer bis in eine Höhe $H = 12 \text{ km}$ linearen Temperaturabnahme $k = 0,65 \text{ K}/100\text{m}$. Darüber geht man von Isothermie aus. Ersetzt man in der Formel der isentropen Atmosphäre (3.218) den trockenadiabatischen Gradienten Γ_d durch k und verwendet darüber die barometrische Höhenformel, so folgt

$$p(z) = \begin{cases} p_o \left(1 - \frac{kz}{T_o} \right)^{\frac{g}{R_a k}}, & z < H \\ p(H) \exp \left(-g \frac{z-H}{R_d T_T} \right), & z \geq H \end{cases} \quad (3.219)$$

mit $T_T := T_o - kH$ als Temperatur der Tropopause.

In einer stabilen Atmosphäre ist θ eine mögliche Vertikalkoordinate, man spricht von *isentropen Koordinaten*, da die Flächen gleicher Vertikalkoordinate Flächen gleicher Entropie sind.

3.6.2 Kondensate

Es muss der Erste Hauptsatz auch noch für die Kondensatklassen i formuliert werden. Hierzu geht man von Glg. (2.674) aus:

$$\Delta U_i = \Delta Q_i - \Delta W_i \quad (3.220)$$

Bei den Kondensaten nimmt man Inkompressibilität an, also $\Delta W_i = 0$. Als Wärmequellen spielen neben Strahlung, Wärmeübergang, und Dissipation auch Phasenübergänge eine Rolle. Diese wirken auf zwei Arten:

- Sie führen zu latenten Wärmeflüssen und ändern so die Temperatur.
- Sie ändern die Zusammensetzung der Bestandteile der Luft und ändern die Temperatur über Durchmischung.

Der erste Punkt wird in Absch. 3.7 näher beschrieben. Alle Wärmeflüsse, die pro Volumen auf die Phase i wirken, werden zu einer Quellstärke q_i zusammengefasst. Hier soll es um den zweiten Punkt gehen, das heißt es soll die

Einwirkung von Massenflüssen auf die Temperatur T_i untersucht werden. Glg. (3.43) umfasst fünf Arten von Massenflüssen, nämlich

- Phasenübergänge, bei denen neue Kondensatteilchen entstehen,
- Phasenübergänge, die an der Oberfläche eines Partikels stattfinden,
- Phasenumwandlungen von Kondensatteilchen, sodass diese ihre Klasse wechseln,
- Kollisionen und
- Zerfallsprozesse

Es tragen nur solche Prozesse zu einer Änderung der Temperatur T_i bei, bei denen Materie in die Phase i übergeht. Die Klasse i habe die spezifische Wärmekapazität c_i , die m_j und m_h seien die in die Phase i übergehenden Massen. Dann gilt für den Wärmegehalt vor bzw. nach einem Massenfluss

$$\begin{aligned}
 c_i m_i T_i(t) + c_h m_h T + \sum_{j \neq i} c_j m_j T_j &= c_i T_i(t + \Delta t) \left(m_h + m_i + \sum_{j \neq i} m_j \right) \\
 \Leftrightarrow c_i m_i [T_i(t + \Delta t) - T_i(t)] &= c_h m_h T + \sum_{j \neq i} c_j m_j T_j - c_i T_i(t + \Delta t) \left(m_h + \sum_{j \neq i} m_j \right) \\
 \Leftrightarrow \Delta T_i &= \frac{c_h}{c_i m_i} m_h \left(T - \frac{c_i}{c_h} T_i(t + \Delta t) \right) + \frac{1}{c_i m_i} \sum_{j \neq i} [c_j m_j T_j - c_i m_j T_i(t + \Delta t)] \\
 \Leftrightarrow \frac{1}{\Delta V} \frac{dT_i}{dt} &= \frac{1}{m_i} \tilde{q}_{hi} \left(\frac{c_h}{c_i} T - T_i \right) + \frac{1}{m_i} \sum_{j \neq i} \tilde{q}_{j,i} \left(\frac{c_j}{c_i} T_j - T_i \right) \\
 \Leftrightarrow \varrho_i c_i \frac{dT_i}{dt} &= \tilde{q}_{hi} (c_h T - c_i T_i) + \sum_j \tilde{q}_{j,i} (c_j T_j - c_i T_i). \tag{3.221}
 \end{aligned}$$

Hierbei wurde davon ausgegangen, dass alle Teilchen der Klasse i dieselbe Temperatur T_i haben, dass also instante Durchmischung eintritt. Nach Glg. (3.43) und den Überlegungen in Absch. 3.7.2 gilt

$$\tilde{q}_{hi} = \tilde{q}'_{v,i} + \tilde{q}''_{v,i}. \tag{3.222}$$

Zu den $\tilde{q}_{j,i}$ tragen Phasenumwandlungen, Kollisionen und Zerfallsprozesse bei. Nach den Überlegungen in der Herleitung von Glg. (3.43) gilt

$$\tilde{q}_{j,i} = \tilde{m}_j \sum_k \sigma_{j,k} n_j n_k \overline{v_{\text{rel}}}(j, k) P_{j,k} \delta_{i,R_{j,k}} + \tilde{m}_i \lambda_j n_j \sum_l (Z_{jil}) + \tilde{q}_{j,i}''' \tag{3.223}$$

Man hat also

$$\begin{aligned}
 \varrho_i c_i \frac{dT_i}{dt} &= q_i + (\tilde{q}'_{v,i} + \tilde{q}''_{v,i}) (c_h T - c_i T_i) \\
 &\quad + \sum_j \left[\tilde{m}_j \sum_k \sigma_{j,k} n_j n_k \overline{v_{\text{rel}}}(j, k) P_{j,k} \delta_{i,R_{j,k}} + \tilde{m}_i \lambda_j n_j \sum_l (Z_{jil}) + \tilde{q}_{j,i}''' \right] (c_j T_j - c_i T_i) \tag{3.224}
 \end{aligned}$$

Dabei wurde in der Notation explizit berücksichtigt, dass die isochore spezifische Wärmekapazität gemeint ist. Ein analoger Term ist auch für die feuchte Luft zu berücksichtigen:

$$\varrho_h c_h^{(v)} \frac{DT}{Dt} = q_h + \sum_i (\tilde{q}'_{v,i} + \tilde{q}''_{v,i}) (c_h^{(v)} T - c_i T_i) \tag{3.225}$$

3.6.3 Virtuelle potentielle Temperatur

3.6.4 Pseudopotentielle Temperatur

3.7 Diabatie

Diabatisch ist alles, was Adiabatie verletzt, also Wärme- und Massenflüsse über Systemgrenzen hinweg. Die Leistungsdichten der Wärme setzen sich zusammen aus

- Wärmeleitung,
- Wärmeübergang,
- latenter Wärme,
- Strahlung und
- Dissipation.

Die Quellstärken der Masse entstehen durch

- Diffusion,
- Phasenübergänge,
- Kollisionen und
- Zerfall,

s. Glg.en (3.41) - (3.43).

3.7.1 Wärmeleitung

Wärmeleitung tritt nur in der Gasphase und führt nach Glg. (2.862) zu einer Temperaturtendenz

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \chi_h \Delta T \quad (3.226)$$

mit χ_h als Temperaturleitfähigkeit der feuchten Luft.

3.7.2 Phasenübergangswärme

Findet Verdunstung, Schmelzen oder Sublimation statt, so wird die hierfür notwendige Wärme dem Edukt entzogen. Findet der Phasenübergang in die andere Richtung statt, wirkt die Wärme auf das Produkt. In Absch. 3.3 wurde zwischen drei Arten von Phasenübergängen unterschieden. Im ersten Fall entstehen dabei neue Partikel der Klasse i , es gilt

$$q'_i = c_{i,v} \left(\tilde{q}'_{v,i} - \tilde{q}'_{i,v} \right) \quad (3.227)$$

für die auf die Komponente i wirkende Wärmeleistung pro Volumen, hierbei ist $c_{i,v}$ die Phasenumwandlungenthalpie von i in die Gasphase.

Im zweiten Fall findet der Phasenübergang zwischen dem Gas und bestehenden Partikeln der Komponente i statt, was zur Umwandlung von Teilchen in eine andere Kondensatklasse j führt. Die latente Wärme wirkt jedoch trotzdem auf die Teilchen der Komponente i :¹

$$q''_i = c_{i,v} \left(\tilde{q}''_{v,i} - \tilde{q}''_{i,v} \right) \quad (3.228)$$

Im dritten Fall wandeln sich Kondensate ineinander um. Hierfür gilt

$$q'''_i = \sum_j c_{i,j} \tilde{q}'''_{j,i} - c_{i,j} \tilde{q}'''_{i,j}. \quad (3.229)$$

¹ Die bei diesem Prozess innerhalb eines Zeitintervalls Δt übertragene Wärme teilt sich massengewichtet auf die beiden Kondensatklassen auf, für Δt gegen Null geht die pro Masse übertragene Wärme gegen Null, es geht jedoch auch die umgewandelte Masse gegen Null, sodass die auf die Komponente j wirkende Wärme in zweiter Ordnung der Zeit gegen Null geht.

Hierbei ist $c_{i,j}$ die bei dem entsprechenden Prozess auf i wirkende Phasenübergangsenthalpie. Ist beispielsweise i flüssig und j fest, so ist $c_{i,j} = 0$, da in diesem Fall die latente Wärme wie oben angemerkt auf die feste Phase j wirken würde. Für die Gesamt-Quellstärke der Wärme aufgrund von Phasenübergängen q_i gilt

$$q_i = q'_i + q''_i + q'''_i. \quad (3.230)$$

Es sei an dieser Stelle noch einmal hervorgehoben, dass auf die Gasphase *keine* latenten Wärmeflüsse wirken, sondern nur auf die Kondensate. Über Wärmeübergang verteilt sich dann die Energie, auch auf die Gasphase.

3.7.3 Wärmeübergang

Haben die Kondensate andere Temperaturen als die feuchte Luft, geht dies mit einem *Wärmeübergang* einher (diffusiver Wärmestrom durch eine Grenzfläche). Man geht von der Gleichung

$$s = \xi \Delta T \quad (3.231)$$

aus, wobei ΔT die Temperaturdifferenz der beiden Phasen ist, ξ die *Wärmedurchgangszahl* und s die Wärmeflussdichte. Für die entsprechende Leistungsdichte q_i im Fluid, die auf die Kondensatklasse i wirkt, hat man

$$q_i = n_i A_i \xi_i (T - T_i). \quad (3.232)$$

Hierbei sind n_i die Teilchendichte der Kondensate i , A_i deren Oberfläche und ξ_i die Wärmedurchgangszahl bezüglich feuchter Luft. Für die Luft gilt

$$q_h = \sum_i n_i A_i \xi_i (T_i - T). \quad (3.233)$$

3.7.4 Dissipation

Der Reibungsterm \mathbf{F}_R dissipiert spezifische kinetische Energie $k = \frac{1}{2} \mathbf{U}^2$ in thermische Energie $u = c^{(v)} T$. Wäre nur der Reibungsterm wirksam, würde die Impulsgleichung

$$\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} + (\mathbf{U} \cdot \nabla) \mathbf{U} = \mathbf{F}_R \quad (3.234)$$

lauten. Für die materielle Änderung der spezifischen kinetischen Energie k gilt in diesem Fall

$$\frac{Dk}{Dt} = \frac{D}{Dt} \left(\frac{1}{2} \mathbf{U}^2 \right) = \mathbf{U} \cdot \frac{D\mathbf{U}}{Dt} = \mathbf{U} \cdot \mathbf{F}_R. \quad (3.235)$$

Um energetische Konsistenz zu gewährleisten, setzt man daher

$$q_{\text{diss}} \frac{1}{\rho} = \frac{Du}{Dt} = - \frac{Dk}{Dt} = - \mathbf{U} \cdot \mathbf{F}_R \quad (3.236)$$

für den dissipativen Wärmestrom pro Volumen q_{diss} an. In einem Medium mit Kondensationsprodukten wird angenommen, dass sich die Leistungsdichte q_{diss} entsprechend der Massen auf die Komponenten aufteilt:

$$q_{\text{diss},i} = -\rho_i \mathbf{U} \cdot \mathbf{F}_R \quad (3.237)$$

Dann ergibt sich die Gesamt-Leistungsdichte zu

$$q_{\text{diss}} = q_h + \sum_i q_{\text{diss},i} = - \left[\rho_h + \sum_i \rho_i \right] \mathbf{U} \cdot \mathbf{F}_R = -\rho \mathbf{U} \cdot \mathbf{F}_R, \quad (3.238)$$

was wieder Glg. (3.236) entspricht.

3.7.5 Strahlungsübertragungsgleichung

Das Poynting-Theorem Glg. (2.126) ist eine Kontinuitätsgleichung für die Strahlungsflussdichte \mathbf{S} . Die Herleitung ist klassisch, $-\mathbf{j} \cdot \mathbf{E}$ ist die Leistung, die das Feld an beweglichen Ladungen verrichtet. Man kann die

Gleichung notieren als

$$\frac{1}{V} (P_{\text{Feld}} + P_{\text{Ladungen}}) = -\nabla \cdot \mathbf{S}, \quad (3.239)$$

dabei sind $P_{\text{Feld}} = \frac{\partial w}{\partial t}$ die lokalzeitliche Ableitung der Energiedichte und $j \cdot \mathbf{E}$ die Leistung an Ladungsträgern. Die Ladungen sind im Allgemeinen nicht frei, sondern zu Atomen und Molekülen strukturiert, und P_{Ladungen} kann zu quantenmechanischen Anregungen allgemeinerer Art führen. Damit kann man die Gleichung notieren als

$$\frac{1}{V} (P_{\text{Feld}} + P_{\text{Materie}}) = -\nabla \cdot \mathbf{S}. \quad (3.240)$$

Es ist $P_{\text{Feld}} \ll P_{\text{Materie}}$ und daher kann man in guter Näherung

$$\frac{1}{V} P_{\text{Materie}} = -\nabla \cdot \mathbf{S}. \quad (3.241)$$

setzen.

Das Planck'sche Strahlungsgesetz Glg. (2.896) wurde bisher als Funktion der Kreisfrequenz ω formuliert. Bei Spektren verwendet man jedoch meist die Wellenlänge λ als unabhängige Größe. Es gilt

$$c = \frac{\lambda}{T} \Rightarrow \lambda = cT = \frac{2\pi c}{\frac{2\pi}{T}} = \frac{2\pi c}{\omega} \Rightarrow \omega = \frac{2\pi c}{\lambda}. \quad (3.242)$$

Mit der Forderung

$$u(\omega) d\omega \stackrel{!}{=} u(\lambda) d\lambda \quad (3.243)$$

folgt

$$u(\lambda) = u(\omega(\lambda)) \left| \frac{d\omega}{d\lambda} \right| = \frac{\hbar 8\pi^3 c^3}{\pi^2 c^3 \lambda^3} \frac{1}{\exp\left(\frac{\hbar 2\pi c}{k_B T \lambda}\right) - 1} \frac{2\pi c}{\lambda^2} = \frac{8\pi c \hbar}{\lambda^5} \frac{1}{\exp\left(\frac{hc}{k_B T \lambda}\right) - 1}. \quad (3.244)$$

Für die spektrale Strahldichte der Schwarzkörperstrahlung gilt L_B folgt

$$L_B(\lambda, T) = \frac{2\hbar c^2}{\lambda^5} \frac{1}{\exp\left(\frac{hc}{k_B T \lambda}\right) - 1}. \quad (3.245)$$

Die spektrale Strahldichte in der Atmosphäre hängt ab vom Ort, der Richtung und der Wellenlänge, also $L = L(\mathbf{r}, \lambda, \vartheta, \varphi)$. Hieraus ergibt sich das Feld der spektralen Strahlungsflussdichte \mathbf{S}_λ zu

$$\mathbf{S}_\lambda(\mathbf{r}, \lambda) = \int_0^{2\pi} \int_0^\pi L(\mathbf{r}, \lambda, \vartheta, \varphi) \mathbf{e}(\vartheta, \varphi) \sin(\vartheta) d\vartheta d\varphi \quad (3.246)$$

mit $\mathbf{e}(\vartheta, \varphi)$ als dem in die durch ϑ und φ vorgegebene Richtung zeigenden Einheitsvektor.

$j \in \{d, v, i\}$ bezeichne eine Komponente der Luft, wobei i für eine Kondensatklasse stehe. Jede Komponente hat individuelle Strahlungseigenschaften und bekommt daher einen eigenen spektralen Leistungsdichte q_j . Man macht sich schnell klar, dass beim Durchtritt durch Materie für die Änderung der spektralen Strahldichte gilt

$$dL(\Omega) \propto q_j, \quad (3.247)$$

$$dL(\Omega) \propto ds, \quad (3.248)$$

hierbei ist Ω ein Raumwinkellement. Hieraus kann man folgern:

$$dL(\Omega) = \underbrace{-\varrho_j k_j L ds}_{\text{Absorption}} + \underbrace{\varrho_j k_j L ds}_{\text{Emission}} + \underbrace{ds \varrho_j \int_{4\pi} s_j(\Omega', \Omega) L(\Omega') d\Omega'}_{\text{Zustreuung aus anderen Raumrichtungen}} - \underbrace{ds \varrho_j L(\Omega) \int_{4\pi} s_j(\Omega, \Omega') d\Omega'}_{\text{Wegstreuung in andere Raumrichtungen}}$$

Hierbei sind k_j der *Absorptionskoeffizient* und s_j der *Streuquerschnitt*. Dies beschreibt lediglich die Änderung der spektralen Strahldichte aufgrund der Komponente i . Um die tatsächliche Änderung zu beschreiben, muss man über alle Komponenten summieren:

$$\begin{aligned} dL(\Omega) &= ds(L_B - L(\Omega)) \sum_j (k_j \varrho_j) + ds \sum_i \varrho_j \int_{4\pi} s_j(\Omega', \Omega) L(\Omega') d\Omega' \\ &\quad - ds \sum_j \varrho_j L(\Omega) \int_{4\pi} s_j(\Omega, \Omega') d\Omega'. \end{aligned} \quad (3.249)$$

Dies ist die *Strahlungsübertragungsgleichung*. Für die auf die Komponente i wirkende Heizrate gilt dann

$$q_j = \int_0^\infty (\nabla \cdot \mathbf{S}_j)_j d\lambda. \quad (3.250)$$

3.7.6 Randbedingungen

An der Erdoberfläche gilt

$$\mathbf{j}_v \cdot \mathbf{n} = E + S - R - C, \quad (3.251)$$

hierbei stehen \mathbf{n} für den Normalenvektor der Erdoberfläche, E für die Verdunstungsrate, S für die Sublimationsrate, R für die Resublimationsrate und C für die Kondensationsrate, alles mit der Dimension *Masse pro Fläche und Zeit*. Dies ist eine Randbedingung an die Flussdichte \mathbf{j}_v .

Die Randbedingungen in der Strahlungsübertragungsgleichung lauten

$$\mathbf{S}_{\text{in}} = S_{\text{o}} \mathbf{e}_{\text{Sonne} \rightarrow \text{Erde}} \quad (3.252)$$

am Oberrand sowie

$$L(\lambda, \vartheta, \varphi) = \varepsilon(\lambda, \vartheta, \varphi, T) L_B(\lambda, \vartheta, \varphi, T) \quad (3.253)$$

Weiterhin ist

$$\xi_{\text{SFC}}(T_{\text{SFC}} - T) \quad (3.254)$$

die Wärmeflussdichte, die als Randbedingung an der Oberfläche im Ersten Hauptsatz für feuchte Luft auftritt.

3.8 Integralrelationen einer einphasigen Atmosphäre

Die prognostische Gleichung der spezifischen kinetischen Energie $k = \frac{1}{2} \mathbf{U}^2$ erhält man durch Multiplikation der Impulsgleichung in der Form Glg. (3.91) von links mit \mathbf{U} :

$$\frac{Dk}{Dt} = \frac{\partial k}{\partial t} + \mathbf{U} \cdot \nabla k = -\frac{1}{\varrho} \mathbf{U} \cdot \nabla p - w g + \mathbf{U} \cdot \mathbf{F}_R. \quad (3.255)$$

Multipliziert man diese Gleichung mit ϱ und addiert das Produkt der Kontinuitätsgleichung mit k dazu, erhält man

$$\frac{DK}{Dt} = \frac{\partial K}{\partial t} + \mathbf{U} \cdot \nabla K = -\mathbf{U} \cdot \nabla p - \varrho w g - K \nabla \cdot \mathbf{U} + \varrho \mathbf{U} \cdot \mathbf{F}_R \quad (3.256)$$

als prognostische Gleichung für die kinetische Energiedichte $K = \frac{1}{2} \varrho \mathbf{U}^2$. Als prognostische Gleichung für die spezifische geopotentielle Energie φ erhält man

$$\frac{D\varphi}{Dt} = \mathbf{U} \cdot \nabla \varphi = w g. \quad (3.257)$$

Multipliziert man diese Gleichung mit ϱ und addiert das Produkt der Kontinuitätsgleichung mit φ dazu, erhält man

$$\frac{DP}{Dt} = \frac{\partial P}{\partial t} + \mathbf{U} \cdot \nabla P = \varrho w g - P \nabla \cdot \mathbf{U} \quad (3.258)$$

als prognostische Gleichung für die geopotentielle Energiedichte $P = \varphi \rho$. Als prognostische Gleichung für die spezifische innere Energie $i = c^{(v)} T$ erhält man

$$\frac{Di}{Dt} = \frac{\partial i}{\partial t} + \mathbf{U} \cdot \nabla i = -p \frac{Da}{Dt} - \mathbf{U} \cdot \mathbf{F}_R = -pa \nabla \cdot \mathbf{U} - \mathbf{U} \cdot \mathbf{F}_R. \quad (3.259)$$

Multipliziert man diese Gleichung mit ρ und addiert das Produkt der Kontinuitätsgleichung mit i dazu, erhält man

$$\frac{D\tilde{I}}{Dt} = \frac{\partial \tilde{I}}{\partial t} + \mathbf{U} \cdot \nabla \tilde{I} = - (p + \tilde{I}) \nabla \cdot \mathbf{U} - \rho \mathbf{U} \cdot \mathbf{F}_R \quad (3.260)$$

als prognostische Gleichung für die kinetische Energiedichte $\tilde{I} := \rho i$. Die Energiedichte e ist die Summe aus kinetischer, potentieller und innerer Energie pro Volumen,

$$e = K + P + \tilde{I}. \quad (3.261)$$

Die totale Ableitung hiervon ergibt sich unter Verwendung der gerade hergeleiteten Gleichungen zu

$$\frac{De}{Dt} = -e \nabla \cdot \mathbf{U} - \nabla \cdot (p \mathbf{U}). \quad (3.262)$$

Damit folgt

$$\frac{\partial e}{\partial t} = -\nabla \cdot (p \mathbf{U}) - \nabla \cdot (e \mathbf{U}) \Leftrightarrow \frac{\partial e}{\partial t} + \nabla \cdot (e \mathbf{U}) = -\nabla \cdot (p \mathbf{U}). \quad (3.263)$$

Dies bezeichnet man auch als das *Poynting-Theorem der Meteorologie* in Analogie zum Poynting-Theorem der ED Glg. (2.126). Als Spezialfall von Glg. (3.262) erhält man für stationäre Strömungen inkompressibler Medien wegen

$$\nabla \cdot \mathbf{U} = 0, \quad (3.264)$$

$$\frac{Dp}{Dt} = \mathbf{U} \cdot \nabla p \quad (3.265)$$

die Gleichung

$$\frac{D}{Dt} (K + P + p) = 0, \quad (3.266)$$

was man als *Bernoulli-Gleichung* bezeichnet. Weitere Formen dieser Aussage sind

$$\frac{1}{2} \rho \mathbf{U}^2 + \rho g z + p = \text{const. entlang Stromlinien}, \quad (3.267)$$

$$\frac{1}{2} \mathbf{U}^2 + g z + \frac{p}{\rho} = \text{const. entlang Stromlinien}. \quad (3.268)$$

Die Gesamtenergie E der Atmosphäre A ist

$$E = \int_A e d^3 r. \quad (3.269)$$

Nimmt man A als konstant an, gilt mit dem Gauß'schen Satz

$$\frac{dE}{dt} = \int_A \frac{\partial e}{\partial t} d^3 r = \int_A -\nabla \cdot [(e + p) \mathbf{U}] d^3 r = - \int_O (e + p) \mathbf{U} \cdot d\mathbf{n} - \int_U (e + p) \mathbf{U} \cdot d\mathbf{n}, \quad (3.270)$$

hierbei sind O der Oberrand der Atmosphäre und U die Erdoberfläche. Unter der Voraussetzung von Massenerhaltung (hier: kinematische Randbedingung) gilt also

$$E = \text{const.} \quad (3.271)$$

Dreht sich die kondensierte Erde mit fester Winkelgeschwindigkeit und gilt die kinematische Randbedingung, so sind Impuls und Drehimpuls aufgrund fehlender Symmetrieeigenschaften keine Erhaltungsgrößen. Für die spezifische Entropie s gilt nach Glg. (3.209)

$$s = c^{(p)} \ln(\theta) + c' \quad (3.272)$$

mit einer reellen Konstante c' . Als prognostische Gleichung für diese Größe erhält man mit Glg. (3.192)

$$\frac{Ds}{Dt} = \frac{\partial s}{\partial t} + \mathbf{U} \cdot \nabla s = \frac{q}{\rho T}. \quad (3.273)$$

Multipliziert man diese Gleichung mit ρ und addiert das Produkt der Kontinuitätsgleichung mit s dazu, erhält man

$$\frac{D\tilde{S}}{Dt} = \frac{\partial \tilde{S}}{\partial t} + \mathbf{U} \cdot \nabla \tilde{S} = \frac{q}{T} - \tilde{S} \nabla \cdot \mathbf{U} \quad (3.274)$$

als prognostische Gleichung für die Entropiedichte $\tilde{S} = \rho s$. Für die Gesamtentropie S einer Atmosphäre gilt bis auf eine Konstante

$$S = \int_A \tilde{S} d^3r. \quad (3.275)$$

Unter Berücksichtigung der kinematischen Randbedingung folgt

$$\frac{dS}{dt} = \int_A \frac{q}{T} d^3r. \quad (3.276)$$

Alle heizenden Prozesse, insbesondere Reibung, sind also Entropie produzierende Prozesse, während alle kühlen Prozesse Entropie vernichten. In einer idealen adiabatischen einphasigen Atmosphäre laufen die Prozesse reversibel ab. Für die innere Energie I einer einphasigen Atmosphäre gilt

$$I = \int_A \tilde{I} d^3r. \quad (3.277)$$

Für die Zeitableitung dieser Größe erhält man mit Glg. (3.260)

$$\frac{dI}{dt} = \int_A -p \nabla \cdot \mathbf{U} - \rho \mathbf{U} \cdot \mathbf{F}_R d^3r = \int_A \mathbf{U} \cdot \nabla p - \rho \mathbf{U} \cdot \mathbf{F}_R d^3r. \quad (3.278)$$

Die Bilanz der Enthalpie erhält man durch Multiplikation dieser Gleichung mit dem Adiabatenexponenten $\kappa = \frac{c^{(p)}}{c^{(v)}}$.

Für den Gesamtmoment \mathbf{P} der Atmosphäre gilt

$$\mathbf{P} = \int_A \rho \mathbf{U} d^3r. \quad (3.279)$$

Für die Zeitableitung dieser Größe sind laut dem Zweiten Newton'schen Axiom nur die externen Kräfte zu berücksichtigen:

$$\frac{d\mathbf{P}}{dt} = \int_A \rho \mathbf{f}_{\text{ext}} d^3r. \quad (3.280)$$

\mathbf{P} ist also nie erhalten, da mindestens durch die Oberfläche immer externe Kräfte wirken.

Für den Gesamtdrehimpuls \mathbf{L} der Atmosphäre gilt

$$\begin{aligned} \mathbf{L} &= \int_A \mathbf{r} \times \rho \mathbf{U} d^3r \\ \frac{d\mathbf{L}}{dt} &= \int_A \mathbf{r} \times \rho \mathbf{f}_{\text{ext}} d^3r. \end{aligned} \quad (3.281)$$

Der Drehimpuls ist also genau dann erhalten, wenn alle externen Kräfte auf der radialen Achse wirken, also nur

in ruhenden Koordinaten über einem Planeten mit radialsymmetrischer Massenverteilung im Inneren.

3.8.1 APE

Die kinetische Energie KE einer Luftsäule in einer hydrostatischen Atmosphäre ist durch

$$KE = \int_0^\infty \frac{1}{2} \rho V^2 dz = -\frac{1}{g} \int_{p_s}^0 \frac{1}{2} V^2 dp = \frac{1}{g} \int_0^{p_s} \frac{1}{2} V^2 dp \quad (3.282)$$

gegeben, hierbei ist p_s der Druck an der Erdoberfläche. Analog gilt für die innere Energie

$$IE = \int_0^\infty \rho c^{(v)} T dz = \frac{1}{g} \int_0^{p_s} c^{(v)} T dp. \quad (3.283)$$

Für die potentielle Energie PE erhält man mit partieller Integration

$$PE = \int_0^\infty \rho g z dz = \int_0^{p_s} z(p) dp = p_s z_s + \frac{1}{g} \int_0^{p_s} R_d T dp \quad (3.284)$$

mit z_s als Orographie. Man definiert die *totale potentielle Energie* oder auch kurz potentielle Energie TPE durch

$$TPE := PE + IE = p_s z_s + g^{-1} \int_0^{p_s} (c^{(v)} + R_d) dp = p_s z_s + g^{-1} \int_0^{p_s} h dp = p_s z_s + \frac{c^{(p)}}{g} \int_0^{p_s} \theta \left(\frac{p}{p_o} \right)^{R_d/c^{(p)}} dp \quad (3.285)$$

mit $h = c^{(p)} T$ als Enthalpie. Man schätzt ab

$$\frac{KE}{IE} \sim \frac{\bar{V}^2}{2c^{(v)}\bar{T}} \sim 0,03\%. \quad (3.286)$$

Es ist also viel mehr innere als kinetische Energie in der Atmosphäre vorhanden.

Da man das Schwerepotential auch um eine beliebige Konstante verschieben könnte, führt man das Konzept der *verfügbarer potentiellener Energie* APE ein. Hierfür transformiert man zunächst Glg. (3.285) ins θ -System:

$$TPE = p_s z_s + \frac{c^{(p)}}{gp_o^{R_d/c^{(p)}}} \int_{\infty}^{\theta_s} \theta p(\theta)^{R_d/c^{(p)}} \frac{\partial p}{\partial \theta} d\theta \quad (3.287)$$

Mittels partieller Integration erhält man

$$\begin{aligned} \int_{\infty}^{\theta_s} \theta p(\theta)^{R_d/c^{(p)}} \frac{\partial p}{\partial \theta} d\theta &= \theta_s p_s^{1+\frac{R_d}{c^{(p)}}} - \int_{\infty}^{\theta_s} p(\theta)^{1+\frac{R_d}{c^{(p)}}} + \frac{R_d}{c^{(p)}} \theta p(\theta)^{R_d/c^{(p)}} \frac{\partial p}{\partial \theta} d\theta \\ \Rightarrow \int_{\infty}^{\theta_s} \theta p(\theta)^{R_d/c^{(p)}} \frac{\partial p}{\partial \theta} d\theta &= \frac{c^{(p)}}{c^{(p)} + R_d} \theta_s p_s^{1+\frac{R_d}{c^{(p)}}} + \frac{c^{(p)}}{c^{(p)} + R_d} \int_{\theta_s}^{\infty} p(\theta)^{1+\frac{R_d}{c^{(p)}}} d\theta \\ \Rightarrow TPE &= p_s z_s + \frac{c^{(p)} \theta_s p_s^{1+\frac{R_d}{c^{(p)}}}}{gp_o^{R_d/c^{(p)}} (c^{(p)} + R_d)} \\ &\quad + \frac{c^{(p)} \theta_s p_s^{1+\frac{R_d}{c^{(p)}}}}{gp_o^{R_d/c^{(p)}} (c^{(p)} + R_d)} \int_{\theta_s}^{\infty} p(\theta)^{1+\frac{R_d}{c^{(p)}}} d\theta. \end{aligned} \quad (3.288)$$

Um die potentielle Energie zu erhalten, die in einer Atmosphäre über einer Fläche A enthalten ist, rechnet man

$$\begin{aligned} \int_A TPE dA &= \int_A p_s z_s dA + \frac{c^{(p)} \theta_s p_s^{1+\frac{R_d}{c^{(p)}}}}{gp_o^{R_d/c^{(p)}} (c^{(p)} + R_d)} \int_A \theta_s p_s^{1+\frac{R_d}{c^{(p)}}} dA + \frac{c^{(p)} \theta_s p_s^{1+\frac{R_d}{c^{(p)}}}}{gp_o^{R_d/c^{(p)}} (c^{(p)} + R_d)} \int_A \int_{\theta_s}^{\infty} p(\theta)^{1+\frac{R_d}{c^{(p)}}} d\theta dA \\ &\approx A \bar{p}_s z_s + \frac{A c^{(p)} \theta_s p_s^{1+\frac{R_d}{c^{(p)}}}}{gp_o^{R_d/c^{(p)}} (c^{(p)} + R_d)} + \frac{A c^{(p)} \theta_s p_s^{1+\frac{R_d}{c^{(p)}}}}{gp_o^{R_d/c^{(p)}} (c^{(p)} + R_d)} \int_{\theta_s}^{\infty} p(\theta)^{1+\frac{R_d}{c^{(p)}}} d\theta. \end{aligned} \quad (3.289)$$

Nach Ggl. (3.285) ist

$$\int_A \text{TPE} + KEdA \quad (3.290)$$

konservativ, wenn kein Massenfluss über die lateralen Ränder von A erfolgt. Die APE ist der Anteil der TPE, die in kinetische Energie umgewandelt werden könnte, also

$$\text{APE} := \int_A \text{TPE} - \text{TPE}_{\min} dA, \quad (3.291)$$

wobei das Minimum der potentiellen Energie aller hydrostatischen Zustände gemeint ist, die aus dem Anfangszustand durch adiabatische Umsortierung erreicht werden können, ohne überadiabatische Gradienten zu produzieren. Hierbei bewegen sich die Teilchen entlang der Isentropen und nach einer solchen Umordnung sind alle Zustandsgrößen nur noch von der Vertikalkoordinate abhängig, da sonst Druckgradienten existieren würden, die genau darauf hinarbeiten würden (die Coriolis-Kraft leistet keine Arbeit, hat somit keine energetische Relevanz und muss daher für diese Betrachtung nicht berücksichtigt werden). Bezeichnet man die Felder des Zustands minimaler potentieller Energie durch gestrichene Größen, kann man notieren

$$\begin{aligned} \int_A \text{TPE} dA &= \int_A p'(z_S) z_S dA + \frac{c^{(p)_2}}{gp_o^{R_d/c^{(p)}} (c^{(p)} + R_d)} \int_A \theta' (z_S) p'(z_S)^{1+\frac{R_d}{c^{(p)}}} dA \\ &\quad + \frac{c^{(p)_2}}{gp_o^{R_d/c^{(p)}} (c^{(p)} + R_d)} \int_A \int_{\theta_S}^{\infty} p'(\theta)^{1+\frac{R_d}{c^{(p)}}} d\theta dA \\ &\approx A \overline{p'(z_S) z_S} + \frac{Ac^{(p)_2}}{gp_o^{R_d/c^{(p)}} (c^{(p)} + R_d)} \overline{\theta' (z_S) p'(z_S)^{1+\frac{R_d}{c^{(p)}}}} \\ &\quad + \frac{Ac^{(p)_2}}{gp_o^{R_d/c^{(p)}} (c^{(p)} + R_d)} \int_{\theta_S}^{\infty} \overline{p'(\theta)^{1+\frac{R_d}{c^{(p)}}}} d\theta. \end{aligned} \quad (3.292)$$

Die ersten beiden Terme auf den rechten Seiten der Glg.en (3.289) und (3.292) sind analytisch wenig ergiebig, ihre Differenz wird mit C abgekürzt, damit erhält man

$$\text{APE} \approx C + \frac{Ac^{(p)_2}}{gp_o^{R_d/c^{(p)}} (c^{(p)} + R_d)} \int_{\theta_S}^{\infty} \overline{p(\theta)^{1+\frac{R_d}{c^{(p)}}}} - \overline{p'(\theta)^{1+\frac{R_d}{c^{(p)}}}} d\theta. \quad (3.293)$$

Die Masse M über der Isentrope θ ist konservativ, daher gilt

$$p'(\theta) = \overline{p(\theta)} \Rightarrow \overline{p'(\theta)^{1+\frac{R_d}{c^{(p)}}}} = \overline{p(\theta)^{1+\frac{R_d}{c^{(p)}}}} \quad (3.294)$$

woraus folgt

$$\begin{aligned} \text{APE} &\approx C + \frac{Ac^{(p)_2}}{gp_o^{R_d/c^{(p)}} (c^{(p)} + R_d)} \int_{\theta_S}^{\infty} \overline{p(\theta)^{1+\frac{R_d}{c^{(p)}}}} - \overline{p(\theta)^{1+\frac{R_d}{c^{(p)}}}} d\theta \\ &= \approx C + \frac{A}{\Gamma_d p_o^x (\iota + \chi)} \int_{\theta_S}^{\infty} \overline{p(\theta)^{1+x}} - \overline{p(\theta)^{1+x}} d\theta \end{aligned} \quad (3.295)$$

mit dem trockenadiabatischen Temperaturgradienten $\Gamma_d = g/c^{(p)}$ und der Abkürzung $\chi := \frac{R_d}{c^{(p)}}$. Man notiert $p = \bar{p} + p'$, damit gilt die Taylor-Entwicklung

$$p^{1+x} = \bar{p}^{1+x} + (\iota + \chi) \bar{p}^x p' + \frac{1}{2} \chi (\iota + \chi) \bar{p}^{x-1} p'^2 + \dots \quad (3.296)$$

Man erhält somit

$$\text{APE} \approx C + \frac{A\chi}{2\Gamma_d p_o^x} \int_{\theta_S}^{\infty} \overline{p^{1+x}} \left(\frac{p'}{\bar{p}} \right)^2 d\theta. \quad (3.297)$$

Nun wird dies wieder ins p-System rücktransformiert. Hierzu verwendet man

$$p \approx \bar{p}(\theta(p)) \Rightarrow p' \approx \theta' \frac{\partial \bar{p}}{\partial \theta}. \quad (3.298)$$

Somit erhält man

$$\begin{aligned} \text{APE} &\approx C + \frac{A\chi}{2\Gamma_d p_s^T} \int_{\theta_s}^{\infty} \bar{p}^{T-1} \overline{\left(\theta' \frac{\partial \bar{p}}{\partial \theta} \right)^2} d\theta = C + \frac{A\chi}{2\Gamma_d p_s^T} \int_{\theta_s}^{\infty} \bar{p}^{T-1} \overline{\theta'^2} \left(\frac{\partial \bar{p}}{\partial \theta} \right)^2 d\theta \\ &\approx C - \frac{A\chi}{2\Gamma_d p_s^T} \int_{\bar{p}_s}^{\infty} \bar{p}^{T-1} \overline{\theta^2} \left(\frac{\theta'}{\bar{\theta}} \right)^2 \left(\frac{\partial \bar{\theta}}{\partial p} \right)^{-1} dp = C - \frac{A\chi}{2\Gamma_d} \int_{\bar{p}_s}^{\infty} \frac{1}{\bar{p}} \overline{\bar{T}} \left(\frac{T'}{\bar{T}} \right)^2 \left(\frac{\partial \bar{\theta}}{\partial p} \right)^{-1} dp \\ &= C - \frac{A}{2} \int_{\bar{p}_s}^{\infty} \frac{\chi \bar{\theta}}{\Gamma_d \bar{p}} \left(\frac{\partial \bar{\theta}}{\partial p} \right)^{-1} \overline{\bar{T}} \left(\frac{T'}{\bar{T}} \right)^2 dp. \end{aligned} \quad (3.299)$$

Nach Glg. (3.185) gilt

$$\frac{\Gamma_d \bar{p}}{\chi \theta} \frac{\partial \bar{\theta}}{\partial p} \approx \frac{\overline{\Gamma_d p} \overline{\partial \theta}}{\chi \theta \overline{\partial p}} = - (\Gamma_d - \bar{\Gamma}), \quad (3.300)$$

also

$$\text{APE} \approx C + \frac{A}{2} \int_{\bar{p}_s}^{\infty} \frac{\bar{T}}{\Gamma_d - \bar{\Gamma}} \overline{\left(\frac{T'}{\bar{T}} \right)^2} dp. \quad (3.301)$$

Nimmt man einen klimatologischen Wert $\bar{\Gamma} \approx \frac{2}{3} \Gamma_d$ und vernachlässigt C , um eine Abschätzung vorzunehmen, folgt

$$\text{APE} \approx \frac{3Ac^{(p)}}{2g} \int_{\bar{p}_s}^{\infty} \overline{\bar{T}} \left(\frac{T'}{\bar{T}} \right)^2 dp. \quad (3.302)$$

Für A wählt man die gesamte Erdoberfläche und setzt $T' \sim 15$ K, $\bar{T} \sim 270$ K an, dann folgen

$$\frac{\text{APE}/A}{\text{KE}} \sim \frac{3 \overline{T'^2} c^{(p)}}{\bar{T} V^2} \sim 25. \quad (3.303)$$

Es bleibt in diesem Abschnitt eine offene Frage, warum der größte Anteil der verfügbaren potentiellen Energie nicht in kinetische Energie umgewandelt wird.

3.9 Zusammenstellung der herrschenden Gleichungen

$$\begin{aligned}
\forall (i \in \{\text{gasförmige Bestandteile der Luft}\}) \frac{DU_i}{Dt} &= -\frac{1}{\varrho} \nabla p + U_i \times \mathbf{f} + \mathbf{g} + r \Delta U_g \\
\forall (i \in \{\text{Kondensatklassen}\}) j_i &= \varrho_i \mathbf{U} - \mathbf{k}_{\varrho_i} v_i \\
p &= T_g R_g \varrho'_g \\
c_g^{(v)} \frac{DT}{Dt} + p \frac{D}{Dt} \left[\frac{1 - \sum_{j \in \{\text{Kondensatklassen}\}} \frac{\varrho_j}{\varrho'_j}}{\varrho_g} \right] &= \frac{q_g}{\varrho_g} \\
\frac{\partial \varrho_d}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{j}_d &= 0 \\
\forall (i \in \{\text{Tracerklassen}\}) \frac{\partial \varrho_i}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{j}_i &= Q_i \\
\forall (i \in \{\text{Kondensatklassen}\}) c_i^{(v)} \frac{DT}{Dt} &= \frac{q_i}{\varrho_i} \\
dL(\Omega) &= ds(L_B - L(\Omega)) \sum_{j \in \{d, v, i\}} (k_j \varrho_j) \\
&\quad + ds \sum_{j \in \{d, v, i\}} \varrho_j \int_{4\pi} s_j(\Omega', \Omega) L(\Omega') d\Omega' \\
&\quad - ds \sum_{j \in \{d, v, i\}} \varrho_j L(\Omega) \int_{4\pi} s_j(\Omega, \Omega') d\Omega' \\
\text{Randbedingungen} \\
\mathbf{U} \cdot \mathbf{n} &= 0 \text{ am Oberrand} \\
\varrho_i &= 0 \text{ am Oberrand} \\
\mathbf{U} \cdot \mathbf{n} &= 0 \text{ am Unterrand} \\
\mathbf{S}_{\text{in}} &= S_{\text{o}} \mathbf{e}_{\text{Sonne} \rightarrow \text{Erde}} \text{ am Oberrand} \\
\mathbf{j}_v \cdot \mathbf{n} &= E + S - R - C \text{ am Unterrand} \\
L(\lambda, \vartheta, \varphi, T) &= \varepsilon(\lambda, \vartheta, \varphi, T) L_B(\lambda, \vartheta, \varphi, T) \text{ am Uberrand} \\
\tau_{\text{SFC}} (T_{\text{SFC}} - T) &= \text{Wärmedurchgang am Unterrand}
\end{aligned}$$

Der Determinismus dieser Gleichungen ist nicht nur mathematisch unklar, sie sind außerdem unvollständig, da sie als Gleichungen der statistischen Physik höhere statistische Momente enthalten. Diese sind meist klein, jedoch führen aufgrund der Nichtlinearität kleinste Ungenauigkeiten nach einer Zeit $t > t_{\text{krit}}$ zu einer kapitalen Änderung der Lösung. Eine nicht-statistische Vorhersage ist daher prinzipiell nur für einen begrenzten Zeitraum möglich.

Teil II

Dynamik

4 WICHTIGE APPROXIMATIONEN

4.1 Hydrostatik

Druckgradient und Schwere sind von der Größenordnung 10 m/s^2 , während die Vertikalbeschleunigung in der Größenordnung 10^{-7} m/s^2 liegt. Die Glg.

$$\frac{\mathbf{g}}{g} \cdot \nabla p = \rho \mathbf{g} \quad \begin{matrix} \text{radialsymmetrisches} \\ \text{Schwerefeld} \end{matrix} \Rightarrow \frac{\partial p}{\partial z} = -g\rho, \quad (4.1)$$

gilt also auf der synoptischen Skala in ausgezeichneter Näherung, dies ist die *hydrostatische Grundgleichung*.

Eine andere Formulierung dieser Gleichung ist $\frac{Dw}{Dt} = 0$. Die Teilchen haben also eine konstante Vertikalgeschwindigkeit. Diese muss Null sein, da es sonst zum Regelfall wird, dass ein Teilchen im Erdboden oder Weltall verschwindet. Es gilt also die Implikation

$$\frac{\mathbf{g}}{g} \cdot \nabla p = \rho \mathbf{g} \Rightarrow w = 0. \quad (4.2)$$

Trotzdem ist es sinnvoll, auch in hydrostatischen Gleichungssystemen eine Vertikalgeschwindigkeit zuzulassen. Dies ist zwar physikalisch widersprüchlich, jedoch nicht mathematisch, da das Gleichungssystem nichts von obiger Folgerung wissen kann. Die Vertikalbewegungen eines solchen Systems entstehen aus der Kontinuitätsgleichung.

Allgemein werden häufig Näherungsannahmen an die herrschenden Gleichungen gemacht, die physikalisch widersprüchlich sind oder den Definitionen widersprechen. So spielt die Feuchte durchaus eine Rolle für die Dynamik, jedoch kann man Zyklogenese (also das Entstehen von Tiefdruckgebieten) auch in einer trockenen Atmosphäre beobachten. Man spricht von *Filterung*: Feuchte ist nicht notwendig für das Entstehen der Tiefdruckgebiete, weil in einer trockenen Atmosphäre immer noch Tiefdruckgebiete entstehen, also nicht gefiltert werden. Will man ein Phänomen untersuchen, so wählt man hierfür zunächst immer das einfachst mögliche Gleichungssystem.

Auch wenn man die hydrostatische Annahme nicht macht, kann man einen Grundzustand $\{\bar{a}, \bar{p}\}$ einführen mit $a := \frac{1}{\rho}$ als spezifischem Volumen, der Glg. (4.1) erfüllt, und die tatsächlichen Größen $\{a, p\}$ als Überlagerung des Grundzustandes mit Abweichungen $\{a', p'\}$ zu notieren, also

$$a = \bar{a} + a', \quad (4.3)$$

$$p = \bar{p} + p'. \quad (4.4)$$

Dann gilt

$$-a\nabla p + \mathbf{g} = -a'\nabla \bar{p} - \bar{a}\nabla p' - a'\nabla p' = -a'\nabla p - \bar{a}\nabla p' = -a\nabla p' - a'\nabla \bar{p}. \quad (4.5)$$

Das Schwerefeld der Erde hat eine komplizierte Form, der man sich in verschiedenen Stufen annähert. Zunächst geht man davon aus, dass das Schwerefeld radialsymmetrisch ist mit homogenem Betrag des Schwerevektors. Verwendet man anstatt der geometrischen Höhe z die geopotentielle Höhe $\varphi = gz$ (dies ist die Energie pro Masse, die nötig ist, um ein Teilchen vom Meeresspiegel auf die Höhe z zu bringen), lautet die hydrostatische Grundgleichung mit der Kettenregel

$$\frac{\partial p}{\partial \varphi} = \frac{\partial p}{\partial z} \frac{\partial z}{\partial \varphi} = -\rho. \quad (4.6)$$

Die SI-Einheit des Geopotentials ist m^2/s^2 . Ein Geopotentialmeter gpm ist definiert durch

$$1 \text{ gpm} := 9,8 \text{ m}^2/\text{s}^2, \quad (4.7)$$

sodass

$$\frac{z}{m} = \frac{\varphi/g}{m} \approx \frac{\varphi}{\text{gpm}} \quad (4.8)$$

gilt. Möchte man die Höhenabhängigkeit der Schwerebeschleunigung berücksichtigen, so verwendet man hierfür

als Formel für das Gravitationspotential zunächst

$$\varphi_g(r) = -\frac{\varphi_0 a}{r} + \varphi_0 \quad (4.9)$$

mit $\varphi_0 := GM/a$ mit G als Newton'scher Gravitationskonstante und M als Erdmasse. Dies ist die Formel für das Schwerkraftfeld eines Planeten mit radialsymmetrischer Massenverteilung, sie ergibt sich aus der Formel für eine Punktmasse mit dem Gauß'schen Satz. Bei $r = a$ ist das Potential zu Null normiert. Hieraus folgt

$$g = \frac{\varphi_0 a}{r^2} = g_0 \frac{a^2}{r^2} \quad (4.10)$$

mit $g_0 := \frac{\varphi_0}{a}$. In dieser Approximation fordert man für die generalisierte Vertikalkoordinate geopotentielle Höhe z_g , dass gilt

$$g_0 z_g \stackrel{!}{=} \varphi_g(a+z) = -\frac{\varphi_0 a}{a+z} + \varphi_0 \Rightarrow z_g = -\frac{a^2}{a+z} + a = \frac{-a^2 + a^2 + za}{a+z} = \frac{z}{1 + \frac{z}{a}}. \quad (4.11)$$

Hieraus folgt weiterhin

$$\begin{aligned} \frac{\partial p}{\partial z} &= \frac{z_g}{z} \frac{\partial p}{\partial z_g} = \left(\frac{1}{1 + \frac{z}{a}} - \frac{z}{a} \frac{1}{(1 + \frac{z}{a})^2} \right) \frac{\partial p}{\partial z_g} = \frac{1}{(1 + \frac{z}{a})^2} \frac{\partial p}{\partial z_g} = \frac{a^2}{r^2} \frac{\partial p}{\partial z_g} = -g_0 = -g_0 \frac{a^2}{r^2} \varrho \\ \Rightarrow \frac{\partial p}{\partial z_g} &= -g_0 \varrho. \end{aligned} \quad (4.12)$$

Bezieht man die Fliehbeschleunigung $-\boldsymbol{\omega} \times (\boldsymbol{\omega} \times \mathbf{r})$ und/oder die eher ellipsoidische Form der Erde mit ein, sind die Äquipotentialflächen keine Kugelschalen mehr, s. Absch. ???. Rechnet man die Fliehbeschleunigung betragsmäßig approximativ in g_0 hinein und verwendet weiterhin eine sphärische Approximation des Schwerkiefeldes, spricht man von der *spherical geopotential approximation (SGA)*.

Verwendet man den Druck als Höhenkoordinate und das Geopotentiale als die abhängige Koordinate, transformiert man also $p(\varphi)$ auf $\varphi(p)$, so lautet die hydrostatische Grundgleichung

$$\frac{\partial \varphi}{\partial p} = -a \quad (4.13)$$

mit $a := \frac{1}{\varrho}$ als dem spezifischen Volumen. Mit der Zustandsgleichung folgt $a = \frac{R_d T}{p}$ in einer trockenen Atmosphäre. Deshalb bezeichnet man $\frac{\partial \varphi}{\partial p}$ häufig auch einfach als »Temperatur«. Man sieht, dass die Schichtdicke proportional zur Temperatur der Schicht ist. Das dreidimensionale Geopotentialfeld ist also Ausdruck des Bodendrucks und der Temperatur der Luftmassen.

4.2 Barotropie

Von Barotropie spricht man, wenn die Konturflächen des Druckfeldes und des Dichtefeldes gleich sind. In einer trockenen Atmosphäre ist dies gleichbedeutend mit der Tatsache, dass die Temperaturflächen und die Druckflächen gleich sind. In der Realität ist der Baroklinitätswinkel, der den Winkel zwischen $\nabla \varphi$ und ∇p beschreibt, klein. Jedoch ist die vorhandene Baroklinität sehr wichtig für die atmosphärische Dynamik und Barotropie hat weitreichende einschränkende Implikationen.

Leitet man die x-Komponente von Glg. (3.150) unter Annahme von Barotropie nach p ab, erhält man

$$\frac{\partial}{\partial p} \frac{Du}{Dt} = -\frac{\partial}{\partial p} \frac{\partial \varphi}{\partial x} + f \frac{\partial v}{\partial p} = -\frac{\partial}{\partial x} \frac{\partial \varphi}{\partial p} + f \frac{\partial v}{\partial p} = f \frac{\partial v}{\partial p}. \quad (4.14)$$

Es gilt außerdem

$$\frac{\partial}{\partial p} \frac{Du}{Dt} = \frac{\partial}{\partial p} \left(\frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial x} + v \frac{\partial u}{\partial y} + \omega \frac{\partial u}{\partial p} \right), \quad (4.15)$$

Term	Größenordnung im SI
$\frac{\partial u}{\partial t}$	10^{-4}
$u \frac{\partial u}{\partial x}$	10^{-4}
fv	10^{-3}
$\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial x}$	10^{-3}

Table 4.1: Skalierung der horizontalen Impulsgleichung auf der synoptischen Skala.

hieraus folgt

$$\frac{\partial}{\partial t} \frac{\partial u}{\partial p} = \frac{\partial}{\partial p} \frac{\partial u}{\partial t} = f \frac{\partial v}{\partial p} - \frac{\partial}{\partial p} \left(u \frac{\partial u}{\partial x} + v \frac{\partial u}{\partial y} + \omega \frac{\partial u}{\partial p} \right). \quad (4.16)$$

An dieser Gleichung sieht man, dass, falls die vertikale Scherung global für einen Zeitpunkt verschwindet, dies für alle Zeitpunkte so ist. Verschwindet die vertikale Scherung, sind auch die Horizontaldivergenz und damit nach Glg. (3.147) $\frac{\partial \omega}{\partial p}$ höhenkonstant. Das Feld der Vertikalgeschwindigkeit im p-System $\omega = \omega(p)$ ist also in diesem Fall eine Gerade und eine diagnostische Größe.

4.3 Geostrophie

Die *Rossby-Zahl* N_{Ro} definiert man als Verhältnis von advektiven Termen zu Coriolis-Kraft, also

$$N_{Ro} := \frac{U^2}{L_f U} = \frac{U}{L_f} \sim 10^{-1} \quad (4.17)$$

auf der synoptischen Skala. In erster Ordnung liegt also ein Kräftegleichgewicht aus Coriolis-Kraft und Druckgradientenkraft vor. Dies ist die geostrophische Approximation. Das entsprechende Windfeld $V_g = (u_g, v_g)^T$ erhält man, indem man in den horizontalen Bewegungsgleichungen Glg.en (3.150) - (3.151) die Beschleunigung gleich Null setzt.

$$\omega = -\frac{\partial \varphi}{\partial x} + fv_g \quad (4.18)$$

$$\omega = -\frac{\partial \varphi}{\partial y} - fu_g \quad (4.19)$$

Stellt man dies nach der Windgeschwindigkeit um, ergeben sich

$$v_g = \frac{1}{f} \frac{\partial \varphi}{\partial x}, \quad (4.20)$$

$$u_g = -\frac{1}{f} \frac{\partial \varphi}{\partial y}. \quad (4.21)$$

Der geostrophische Wind ist also

$$V_g = \frac{1}{f} \begin{pmatrix} -\frac{\partial \varphi}{\partial y} \\ \frac{\partial \varphi}{\partial x} \end{pmatrix} = \mathbf{k} \times \frac{1}{f} \nabla \varphi. \quad (4.22)$$

Die geostrophische Windgeschwindigkeit nimmt also mit wachsendem Betrag der Breite ab, am Äquator geht sie gegen unendlich. Daher ist zu hinterfragen, bis in welche Breiten die Geostrophie eine gute Näherung ist. Diese Frage wird in Absch. 4.5.2 näher untersucht.

Bildet man das Skalarprodukt mit dem Gradienten des Geopotentials, so folgt

$$\nabla \varphi \cdot V_g = 0, \quad (4.23)$$

der geostrophische Wind ist senkrecht zum Geopotentialgradienten. Daher ist der geostrophische Wind isohypsen-

parallel. Die lokalzeitliche Tendenz des Horizontalwindes entsteht bei Geostrophie rein aus der Advektion. Weitere wichtige Implikationen der geostrophischen Annahme werden in Absch. 4.5 behandelt. Bildet man die Divergenz von Glg. (4.22), erhält man

$$\nabla \cdot V_g = -\frac{1}{f} \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x \partial y} + \frac{1}{f} \frac{\partial^2 \varphi}{\partial y \partial x} - \frac{\beta}{f^2} \frac{\partial \varphi}{\partial x} - \frac{v \tan(\varphi)}{r} = -\frac{\beta}{f^2} \frac{\partial \varphi}{\partial x} = -\frac{\beta}{f} v - \frac{v \tan(\varphi)}{r}. \quad (4.24)$$

Unter Verwendung der Skalen aus Tab. 1.3 folgt

$$\mathcal{O}(\nabla \cdot V_g) = \frac{10^{-11}}{10^{-4}} 10^1 \frac{1}{s} = 10^{-6} \frac{1}{s} \quad (4.25)$$

für mittlere und hohe Breiten. Dies ist etwa eine Größenordnung kleiner als die synoptisch-skalige Divergenz, der geostrophische Wind ist also außerhalb der Tropen als fast divergenzfrei anzusehen, in niederen Breiten gilt dies jedoch nicht mehr. Global ist die geostrophische Approximation also, insbesondere für Modelle, nicht anwendbar.

Der *thermische Wind* bezeichnet die Änderung des geostrophischen Windes mit der Höhe aufgrund von Baroklinität. Aus Glg. (4.22) folgt

$$\frac{\partial V_g}{\partial p} = \mathbf{k} \times \frac{1}{f} \nabla \frac{\partial \varphi}{\partial p} = -\frac{R_d}{pf} \mathbf{k} \times \nabla T. \quad (4.26)$$

Die vertikale Scherung des geostrophischen Windes ergibt sich also aus der Baroklinität der Atmosphäre. Man spricht auch von auch von *vertikaler Scherung des geostrophischen Windes aufgrund horizontaler Temperaturgradienten*, wobei sich *horizontal* hier auf die Druckfläche bezieht. Glg. (4.26) ist die *thermische Windgleichung*.

Seien $p_1 < p_2$ zwei Druckniveaus, dann folgt über Integration von Glg. (4.26)

$$\begin{aligned} V_g(p_2) - V_g(p_1) &= \int_{p_1}^{p_2} -\frac{R_d}{pf} \mathbf{k} \times \nabla T dp \\ \Rightarrow V_g(p_1) &= V_g(p_2) + \int_{p_1}^{p_2} \frac{R_d}{pf} \mathbf{k} \times \nabla T dp = V_g(p_2) + \frac{R_d}{f} \int_{p_1}^{p_2} \frac{1}{p} \mathbf{k} \times \nabla T dp \\ &= V_g(p_2) + \frac{R_d}{f} \ln\left(\frac{p_2}{p_1}\right) \mathbf{k} \times \nabla \bar{T}(p_1, p_2) \end{aligned} \quad (4.27)$$

mit einer gewichteten Schichtmitteltemperatur

$$\bar{T}(p_1, p_2) = \frac{\int_{p_1}^{p_2} \frac{1}{p} T dp}{\int_{p_1}^{p_2} \frac{1}{p} dp}. \quad (4.28)$$

4.4 Boussinesq-Approximation

Die Kontinuitätsgleichung lautet

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \mathbf{U} \cdot \nabla \rho + \rho \nabla \cdot \mathbf{U} = 0. \quad (4.29)$$

Setzt man für die Dichte

$$\rho = \rho_0 + \rho' \quad (4.30)$$

mit einer stationären, horizontal homogenen Schichtung $\rho_0(z)$ und einer Fluktuation ρ' ein, folgt

$$\frac{\partial \rho'}{\partial t} + \rho_0 \nabla \cdot \mathbf{U} + \rho' \nabla \cdot \mathbf{U} + \mathbf{U} \cdot \nabla \rho' + w \frac{\partial \rho_0}{\partial z} = 0. \quad (4.31)$$

Nun macht man folgende Annahmen an die Größenordnungen der auftretenden Terme:

- Die Dichtefluktuation ist eine Größenordnung kleiner als die Hintergrunddichte.
- Die Änderung der Hintergrunddichte mit der Höhe ist in der Größenordnung der Dichtefluktuation.

- Die Längenskala ist zwei Größenordnungen größer als die Tiefenskala.

Normiert man den zweiten Term auf 1, haben die anderen Terme die folgenden Größenordnungen:

$$\underbrace{\frac{\partial \varphi'}{\partial t}}_{10^{-1}} + \underbrace{\varphi_0 \nabla \cdot U}_{10^0} + \underbrace{\varphi' \nabla \cdot U}_{10^{-1}} + \underbrace{U \cdot \nabla \varphi'}_{10^{-1}} + \underbrace{w \frac{\partial \varphi_0}{\partial z}}_{10^{-1}} = 0. \quad (4.32)$$

Hieraus folgen

$$\nabla \cdot U = 0, \quad (4.33)$$

$$\frac{D\varphi}{Dt} = 0. \quad (4.34)$$

Dies bezeichnet man als *Boussinesq-Approximation*.

4.5 Entwicklungen des Coriolis-Parameters in ebener Geometrie

Für den Coriolis-Parameter f als Funktion der Breite φ gilt

$$f(\varphi) = 2\omega \sin(\varphi). \quad (4.35)$$

Taylor-entwickelt man dies an einer Breite φ_0 , erhält man

$$\begin{aligned} f(\varphi) &= f(\varphi_0) + f'(\varphi_0)(\varphi - \varphi_0) + \frac{1}{2}f''(\varphi_0)(\varphi - \varphi_0)^2 + \frac{1}{6}f'''(\varphi_0)(\varphi - \varphi_0)^3 + \mathcal{O}[(\varphi - \varphi_0)^4] \\ &= f(\varphi_0) \left[1 + \cot(\varphi_0)(\varphi - \varphi_0) - \frac{1}{2}(\varphi - \varphi_0)^2 - \frac{1}{6}\cot(\varphi_0)(\varphi - \varphi_0)^3 \right], \end{aligned} \quad (4.36)$$

wobei die Terme vierter und höherer Ordnung nicht mehr mitnotiert wurden. Mit

$$y := r(\varphi - \varphi_0) \quad (4.37)$$

mit r als Abstand vom Erdmittelpunkt kann man dies als

$$f(\varphi) = f(\varphi_0) \left[1 + \cot(\varphi_0) \frac{y}{r} - \frac{y^2}{2r^2} - \frac{y^3}{6r^3} \cot(\varphi_0) \right] \quad (4.38)$$

notieren. Der *Rossby-Parameter* wird definiert durch

$$\beta(\varphi_0) := \cot(\varphi_0) \frac{f(\varphi_0)}{r} = \frac{2\omega \cos(\varphi_0)}{r} = \frac{d\varphi}{dy} \frac{df}{d\varphi} = \frac{df}{dy}. \quad (4.39)$$

In den nun herzuleitenden Approximationen wird von einem zonalen Kanal der meridionalen Ausdehnung $2B$ ausgegangen, der an der Breite φ_0 zentriert ist. Die Krümmungsterme werden vernachlässigt, daher spricht man von Ebenen.

4.5.1 f-Ebene

Hier macht man die Approximation

$$f(\varphi) \approx f(\varphi_0). \quad (4.40)$$

Nach Glg. (4.38) ist dies gerechtfertigt, falls

$$B \ll r \tan(\varphi_0), \quad (4.41)$$

$$B \ll \sqrt{2}r \quad (4.42)$$

gelten. Bei der sogenannten *f-Kugel* nimmt man einen global homogenen Coriolisparameter an, was für operationelle Vorhersagen nicht geeignet ist.

4.5.2 β -Ebene

Hier setzt man die Approximation

$$f(\varphi) \approx f(\varphi_0) + \beta y \quad (4.43)$$

an. Nach Glg. (4.38) ist dies gerechtfertigt, falls

$$B \ll 2r \cot(\varphi_0), \quad (4.44)$$

$$B \ll \sqrt{6}r \quad (4.45)$$

gelten.

4.6 Gradientenwind

Beim *Gradientenwind* geht man davon aus, dass Coriolis-Kraft und Druckgradient zusammen die Zentripetalkraft aufbringen, die nötig ist, um ein Fluidteilchen auf einer Trajektorie mit Radius $R > 0$ zu bewegen, also

$$\frac{V^2}{R} = \left| |f| V - \frac{1}{\rho} |\nabla_H p| \right|. \quad (4.46)$$

Im zyklonalen Fall ist der Ausdruck zwischen den äußeren Betragszeichen negativ, also

$$\begin{aligned} \frac{V^2}{R} &= -\frac{1}{\rho} |\nabla_H p| - |f| V \\ \Leftrightarrow V^2 + |f| VR - R \frac{1}{\rho} |\nabla_H p| &= 0 \\ \frac{V^2}{R} &= -\frac{1}{\rho} |\nabla_H p| + |f| V \\ \Leftrightarrow V &= -\frac{|f|R}{2} \pm \sqrt{\frac{f^2 R^2}{4} + R \frac{1}{\rho} |\nabla_H p|}. \end{aligned} \quad (4.47)$$

Wegen $V = |V| > 0$ kommt nur das positive Vorzeichen in Frage. In diesem Fall ist die Windgeschwindigkeit geringer als die geostrophische Windgeschwindigkeit, man spricht von *subgeostrophischem Wind*. Im antizyklonalen Fall gilt analog

$$\begin{aligned} \frac{V^2}{R} &= -\frac{1}{\rho} |\nabla_H p| + |f| V \\ \Leftrightarrow V^2 - |f| VR + R \frac{1}{\rho} |\nabla_H p| &= 0 \\ \frac{V^2}{R} &= -\frac{1}{\rho} |\nabla_H p| + |f| V \\ \Leftrightarrow V &= \frac{|f|R}{2} \pm \sqrt{\frac{f^2 R^2}{4} - R \frac{1}{\rho} |\nabla_H p|}. \end{aligned} \quad (4.48)$$

In diesem Fall ist der Wind *supergeostrophisch*. Hier kommt nur das negative Vorzeichen in Fall, da im Grenzfall $|\nabla_H p| = 0$ kein Wind $V = R|f|$ wehen sollte. Der Ausdruck unter der Wurzel ist positiv, also

$$|\nabla_H p| \leq \frac{\rho f^2 R}{4}. \quad (4.49)$$

Antizyklen werden also in Kernnähe gradientenschwächer, solch eine Beschränkung gibt es für Zyklonen nicht. Dies ist wegen

$$\frac{\rho f^2 R}{4} \sim 10 \frac{\text{hPa}}{1000 \text{ km}} \quad (4.50)$$

auf der synoptischen Skala tatsächlich bedeutsam.

4.7 Reibungswind

Nimmt man eine Druckgradientbeschleunigung

$$P := \frac{I}{\varrho} |\nabla p| \quad (4.51)$$

an, die in y-Richtung zeigt und zusätzlich eine Reibungskraft $-\mu V$ und setzt die Beschleunigung gleich Null, erhält man

$$\circ = fV \sin(\psi) - \mu V \cos(\psi) \stackrel{\psi \in [0, \pi/2]}{\Rightarrow} \psi = \arctan\left(\frac{\mu}{f}\right), \quad (4.52)$$

$$\circ = P - fV \cos(\psi) - \mu V \sin(\psi) \Rightarrow V = \frac{P}{f \cos(\psi) + \mu \sin(\psi)}, \quad (4.53)$$

wobei ψ der Winkel ist, unter dem der Wind die Isobare schneidet. Dies bezeichnet man als *Reibungswind*. Der Reibungswind führt also zu überisobarischem Transport und wirkt so der Entstehung von Extrema im Bodendruckfeld entgegen beziehungsweise begünstigt deren Dissipation. Die Vernichtungswirkung auf ein Tief schätzt man mit $R \sim 500$ km und $\psi \sim 30^\circ$ ab durch

$$\frac{\partial p}{\partial t} \sim \frac{g}{\pi r^2} \frac{dm}{dt} \sim \frac{g}{\pi r^2} 2\pi r H \varrho V \frac{I}{2} = \frac{g V H \varrho}{r} \sim 4 \text{ hPa/hr} \quad (4.54)$$

wobei die Grenzschichthöhe mit $H = 500$ m abgeschätzt wurde. Der Reibungswind dissipiert eine Zyklone also innerhalb von Stunden, es handelt sich also um einen relevanten Effekt auf der synoptischen Skala. Divergenzen oberhalb der Reibungsschicht wurden hierbei nicht berücksichtigt, außerdem wurde ψ als höhenunabhängig innerhalb der Grenzschicht angenommen. In der Realität ist dies natürlich nicht der Fall, sondern ψ nimmt mit der Höhe ab, was zur Ausbildung eines spiralartigen Windfeldes führt, der sogenannten *Ekman-Spirale*.

4.8 Euler-Wind

Als *Euler-Wind* bezeichnet man die Zunahme des Windes unter Wirkung eines Druckgradienten und Abwesenheit der Coriolis-Beschleunigung, also

$$V = -\frac{\varrho}{\nabla} p. \quad (4.55)$$

4.9 Zyklostrophischer Wind

Der *zyklostrophische Wind* ist gegeben, wenn ein Druckgradient eine Zentripetalkraft auf bringt:

$$\left| \frac{\partial p}{\partial r} \right| = \frac{\varrho V^2}{|R|} \quad (4.56)$$

Er gilt in *Tornados*.

5 VORTICITY UND DIVERGENZ

Sei ein beliebiges Vektorfeld \mathbf{U} gegeben. Der Ansatz

$$\mathbf{U} = \Delta \mathbf{v} \quad (5.1)$$

mit den Randbedingungen

$$\lim_{|\mathbf{r}| \rightarrow \infty} \mathbf{v} = \mathbf{0} \quad (5.2)$$

mit einem Vektorfeld \mathbf{v} ist für stetige \mathbf{U} eindeutig lösbar, es handelt sich nämlich um drei unabhängige *Poisson-Gleichungen*

$$U_i = \Delta v_i. \quad (5.3)$$

Nach Glg. (A.231) gilt

$$\Delta \mathbf{v} = \nabla (\nabla \cdot \mathbf{v}) - \nabla \times (\nabla \times \mathbf{v}). \quad (5.4)$$

Man definiert

$$\chi := \nabla \cdot \mathbf{v} \quad (5.5)$$

als *Geschwindigkeitspotential*, weiterhin definiert man

$$\mathbf{A} := -\nabla \times \mathbf{v} \quad (5.6)$$

als Vektorpotential, dann gilt

$$\mathbf{U} = \nabla \chi + \nabla \times \mathbf{A}. \quad (5.7)$$

Man hat also eine *eindeutige* Zerlegung

$$\mathbf{U} = \mathbf{U}_{\text{nonrot}} + \mathbf{U}_{\text{nondiv}}, \quad (5.8)$$

$$\nabla \times \mathbf{U}_{\text{nonrot}} = \mathbf{0}, \quad (5.9)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{U}_{\text{nondiv}} = \mathbf{0} \quad (5.10)$$

vorgenommen. Dass dies immer möglich ist, ist der *Hauptsatz der Vektoranalysis*. χ und \mathbf{A} haben insgesamt vier Komponenten, das Windfeld jedoch nur drei. Daher kann man eine weitere lineare Bedingung stellen, hier wird

$$\nabla \cdot \mathbf{A} = \mathbf{0} \quad (5.11)$$

gewählt, daraus folgt

$$\nabla \times \mathbf{U} = \Delta \mathbf{A}. \quad (5.12)$$

Betrachtet man nur das horizontale Windfeld

$$\mathbf{V} := \mathbf{U} - w \mathbf{k}, \quad (5.13)$$

so gilt dies natürlich auch. An das Vektorpotential stellt man nun statt der Bedingung $\nabla \cdot \mathbf{A} \stackrel{!}{=} \mathbf{0}$ die algebraische Bedingung

$$\mathbf{A} \stackrel{!}{=} (\mathbf{k} \cdot \mathbf{A}) \mathbf{k} \quad (5.14)$$

und definiert eine *Stromfunktion* $\psi = \psi(\varphi, \lambda) := -\mathbf{k} \cdot \mathbf{A}$. Dann gilt mit Glg. (??)

$$\mathbf{V}_{\text{nondiv}} = \nabla \times [-\mathbf{k} \psi] \stackrel{(\text{A.228})}{=} \mathbf{k} \times \nabla \psi. \quad (5.15)$$

Zur Überprüfung rechnet man

$$\nabla \cdot (\mathbf{k} \times \nabla \psi) \stackrel{\text{Glg. (A.232)}}{=} \nabla \psi \cdot (\nabla \times \mathbf{k}) - \mathbf{k} \cdot (\nabla \times \nabla \psi) \stackrel{\text{Glg. (??)}}{=} \mathbf{0}. \quad (5.16)$$

Man definiert

$$\boldsymbol{\xi} := \nabla \times \mathbf{U}. \quad (5.17)$$

Es gilt

$$\zeta := \mathbf{k} \cdot (\nabla \times \mathbf{V}) = \mathbf{k} \cdot [\nabla \times (\mathbf{k} \times \nabla \psi)] \stackrel{\text{Glg. (A.230)}}{=} \Delta \psi. \quad (5.18)$$

Für die Divergenz gilt weiterhin

$$\nabla \cdot \mathbf{V} = \Delta \varphi. \quad (5.19)$$

Man beachte, dass ζ nicht der Betrag von $\boldsymbol{\xi}$ ist, sondern die z-Komponente davon.

5.1 Vorticity

Die rotierende Basis der globalen Koordinaten sei mit $\mathbf{e}_x, \mathbf{e}_y, \mathbf{e}_z$ bezeichnet, das Geschwindigkeitsfeld schreibt sich damit als

$$\mathbf{U} = u_x \mathbf{e}_x + u_y \mathbf{e}_y + u_z \mathbf{e}_z. \quad (5.20)$$

Schreibt man

$$\mathbf{U}' = \boldsymbol{\omega} \times \mathbf{r} + \mathbf{U}, \quad (5.21)$$

so ist \mathbf{U}' das Feld der Teilchengeschwindigkeiten in ruhenden Koordinaten. Es setzt sich zusammen aus dem Anteil der Erdrotation $\boldsymbol{\omega} \times \mathbf{r}$ und dem relativ zur rotierenden Erde gemessenen Windfeld \mathbf{U} . Damit folgt

$$\boldsymbol{\eta} := \nabla \times \mathbf{U}' = \nabla \times \mathbf{U} + \nabla \times (\boldsymbol{\omega} \times \mathbf{r}) = \boldsymbol{\xi} + \mathbf{f}, \quad (5.22)$$

es wurde

$$\nabla \times (\boldsymbol{\omega} \times \mathbf{r}) \stackrel{\text{(A.230)}}{=} \boldsymbol{\omega} (\nabla \cdot \mathbf{r}) - (\boldsymbol{\omega} \cdot \nabla) \mathbf{r} = \mathbf{3}\boldsymbol{\omega} - \left(\omega \frac{\partial}{\partial z} \right) \mathbf{r} = \mathbf{3}\boldsymbol{\omega} - \boldsymbol{\omega} = \mathbf{2}\boldsymbol{\omega} = \mathbf{f} \quad (5.23)$$

eingesetzt. Man definiert die absolute Vorticity η durch die Vertikalkomponente der Rotation von \mathbf{U}' . Diese erhält man als Skalarprodukt von $\nabla \times \mathbf{U}'$ mit dem vertikalen Einheitsvektor \mathbf{k} :

$$\eta := \mathbf{k} \cdot (\nabla \times \mathbf{U}') + \mathbf{k} \cdot \mathbf{f} = \zeta + f \quad (5.24)$$

Man erinnere sich daran, dass der Coriolis-Parameter die Vertikalkomponente des Coriolis-Vektors ist und nicht etwa dessen Betrag. Den Anteil der absoluten Vorticity, der durch die Erdrotation herrührt, bezeichnet man auch als *planetare Vorticity*, während der Anteil, der durch das in rotierenden Koordinaten gemessene Windfeld zustande kommt, als *relative Vorticity* bezeichnet wird.

Die Vorticity hat auch eine anschauliche Bedeutung, die zunächst nicht so einleuchtend ist wie die der Divergenz. Hierzu werden zwei Beispiele betrachtet.

- Nehme das Feld $\mathbf{U} = (y, 0, 0)^T$. Die Stromlinien dieses Feldes sind nicht gekrümmmt. Trotzdem gilt $\nabla \times \mathbf{U} = (0, 0, -1)^T \neq 0$.
- Nehme das Feld $\mathbf{U} = \frac{1}{x^2+y^2} (-y, x, 0)^T$. Das Feld sieht sehr stark nach einem rotationsbehafteten Feld aus (s. Abb. 5.1). Trotzdem gilt

$$\begin{aligned} \nabla \times \mathbf{U} &= \left(\frac{\partial}{\partial x} \frac{x}{x^2+y^2} + \frac{\partial}{\partial y} \frac{y}{x^2+y^2} \right) \mathbf{e}_z \\ &= \left(\frac{1}{x^2+y^2} - x_2 x \frac{1}{(x^2+y^2)^2} + \frac{1}{x^2+y^2} - y_2 y \frac{1}{(x^2+y^2)^2} \right) \mathbf{e}_z = 0. \end{aligned} \quad (5.25)$$

Um die wahre Bedeutung der Vorticity zu verstehen, stellt man sich am besten ein 2D-Vektorfeld $\mathbf{V} = (u, v)^T$ vor (in kartesischen Koordinaten). Nehme ein Rechteck $[-a, a] \times [-b, b]$. s sei eine Kurve, die im positiven

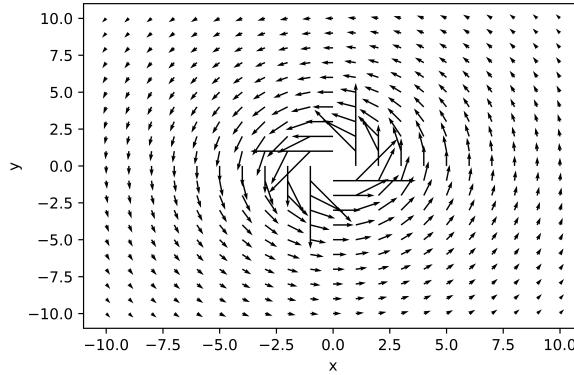


Abbildung 5.1: Die Vorticity dieses Vektorfeldes \mathbf{U} ist gleich Null.

mathematischen Drehsinn diese Menge umschließt. Dann gilt näherungsweise mit (u, v) als Vektor am Ursprung

$$\begin{aligned} \int_s \mathbf{V} \cdot d\mathbf{s} &\approx 2a \left(u - b \frac{\partial u}{\partial y} \right) + 2b \left(v + a \frac{\partial v}{\partial x} \right) - 2a \left(u + b \frac{\partial u}{\partial y} \right) - 2b \left(v - a \frac{\partial v}{\partial x} \right) \\ &= -2ba \frac{\partial u}{\partial y} + 2ba \frac{\partial v}{\partial x} - 2ab \frac{\partial u}{\partial y} + 2ba \frac{\partial v}{\partial x} = -4ba \frac{\partial u}{\partial y} + 4ab \frac{\partial v}{\partial x} = 4ab \left(\frac{\partial v}{\partial x} - \frac{\partial u}{\partial y} \right). \end{aligned} \quad (5.26)$$

Der Flächeninhalt der Fläche ist $4ab$. Betrachtet man die Zirkulation des Vektorfelds um ein Teilchen, bildet also

$$\lim_{a,b \rightarrow 0} \frac{\int_s \mathbf{V} \cdot d\mathbf{s}}{4ab} = \frac{\partial v}{\partial x} - \frac{\partial u}{\partial y}, \quad (5.27)$$

so ergibt sich die Definition der z-Komponente der Wirbelstärke. Die Komponenten der Rotation geben deshalb an, wie eine kleine Fläche in einer Ebene senkrecht zur jeweiligen Komponente umströmt wird. Es gibt also einen Zusammenhang von Zirkulation und Vorticity. In integraler Form ist dies die Aussage des *Satzes von Stokes*:

$$\int_A \nabla \times \mathbf{v} \cdot d\mathbf{f} = \int_{\partial A} \mathbf{v} \cdot d\mathbf{s}. \quad (5.28)$$

Der Satz von Stokes verknüpft also genau wie die obige Betrachtung das vektorielle Kurvenintegral entlang des Randes einer Fläche mit der Wirbelstärke innerhalb der Fläche. Eine weitere Veranschaulichung der Vorticity wird im kommenden Abschnitt gezeigt.

5.1.1 Scherungs- und Krümmungsvorticity

Definiere o. B. d. A. in ebener Geometrie eine rechtshändige Orthonormalbasis $\mathbf{s}, \mathbf{n}, \mathbf{k}$, bei der \mathbf{s} am Ursprung parallel zum Horizontalwind ist. Damit gilt

$$\mathbf{U} = \begin{pmatrix} V \cos(\beta) \\ V \sin(\beta) \\ w \end{pmatrix} \quad (5.29)$$

mit der horizontalen Windgeschwindigkeit V und dem Vertikalwind w . β ist hier die horizontale Windrichtung relativ zu \mathbf{s} . Damit folgt für die Vorticity

$$\zeta = \frac{\partial}{\partial s} V \sin(\beta) - \frac{\partial}{\partial n} V \cos(\beta) = \sin(\beta) \frac{\partial V}{\partial s} + V \frac{\partial \beta}{\partial s} \cos(\beta) - \cos(\beta) \frac{\partial V}{\partial n} + V \sin(\beta) \frac{\partial \beta}{\partial n}. \quad (5.30)$$

Im Koordinatenursprung gilt $\beta = 0$, deshalb hat man dort

$$\zeta = V \frac{\partial \beta}{\partial s} - \frac{\partial V}{\partial n}. \quad (5.31)$$

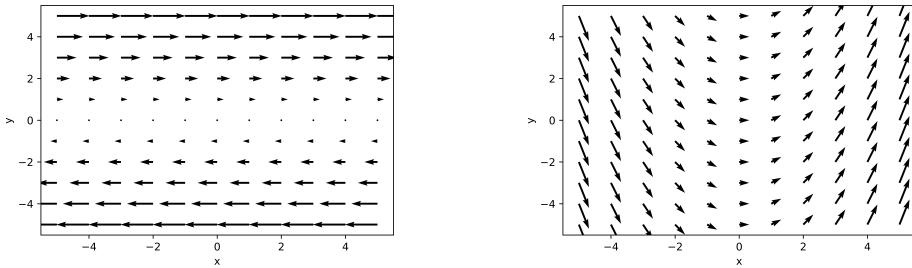


Abbildung 5.2: Scherungsvorticity (links) und Krümmungsvorticity (rechts).

Den ersten Term $V \frac{\partial \beta}{\partial s}$ nennt man Krümmungsvorticity. Er ist größer Null, wenn die Stromlinie nach links gekrümmmt ist, gleich Null, wenn die Stromlinie gerade ist, und bei einer nach rechts gekrümmten Stromlinie kleiner als Null. Den Term $-\frac{\partial V}{\partial n}$ nennt man Scherungsvorticity. Er ist größer Null, wenn die Windgeschwindigkeit rechts von der Windrichtung zunimmt. Insbesondere sieht man, dass ein Strömungsfeld mit gekrümmten Stromlinien rotationsfrei sein kann und eines mit geraden Stromlinien rotationsbehaftet.

5.1.2 Zirkulationssatz

Sei A eine beliebig geformte Fläche im Raum, dann definiert man die Zirkulation S des Windfeldes \mathbf{U} um A zur Zeit t durch

$$S(t) := \int_{\partial A} \mathbf{U} \cdot d\mathbf{s} = \int_0^1 \mathbf{U}(\mathbf{r}(\tau), t) \cdot \frac{d\mathbf{r}}{d\tau} d\tau, \quad (5.32)$$

wobei $\mathbf{r}(\tau)$ eine auf dem Intervall $[0, 1]$ definierte Funktion ist, die den Rand von A durchläuft. Bewegt sich die Fläche A mit dem Windfeld mit, so ändert sich auch die Zirkulation S um A , also

$$\frac{DS}{Dt} = \frac{D}{Dt} \int_0^1 \mathbf{U}(\mathbf{r}(\tau), t) \cdot \frac{d\mathbf{r}}{d\tau} d\tau = \int_0^1 \frac{DU}{Dt} \cdot \frac{d\mathbf{r}}{d\tau} d\tau + \int_0^1 \mathbf{U} \cdot \frac{D}{Dt} \left(\frac{d\mathbf{r}}{d\tau} \right) d\tau. \quad (5.33)$$

Um das zweite Integral näher zu bestimmen, stellt man vorbereitend

$$\begin{aligned} \frac{d\mathbf{r}}{d\tau} &= \lim_{\Delta \rightarrow 0} \frac{\mathbf{r}(\tau + \Delta) - \mathbf{r}(\tau)}{\Delta} \\ \Rightarrow \frac{D}{Dt} \frac{d\mathbf{r}}{d\tau} &= \lim_{\Delta \rightarrow 0} \frac{\frac{D\mathbf{r}}{Dt}(\tau + \Delta) - \frac{D\mathbf{r}}{Dt}(\tau)}{\Delta} = \lim_{\Delta \rightarrow 0} \frac{\mathbf{U}(\mathbf{r}(\tau + \Delta)) - \mathbf{U}(\mathbf{r}(\tau))}{\Delta} \\ &= \left(\frac{d\mathbf{r}}{d\tau} \cdot \nabla \right) \mathbf{U} \end{aligned} \quad (5.34)$$

fest. Definiere $\mathbf{U}(\tau) := \mathbf{U}(\mathbf{r}(\tau), t)$, dann gilt

$$\left(\frac{d\mathbf{r}}{d\tau} \cdot \nabla \right) \mathbf{U} = \frac{d\mathbf{U}}{d\tau}, \quad (5.35)$$

womit man

$$\int_0^1 \mathbf{U} \cdot \frac{D}{Dt} \left(\frac{d\mathbf{r}}{d\tau} \right) d\tau = \int_0^1 \mathbf{U} \cdot \frac{d\mathbf{U}}{d\tau} d\tau = \frac{1}{2} [\mathbf{U}^2]_0^1 = 0 \quad (5.36)$$

erhält, da aufgrund der Geschlossenheit der Kurve $\mathbf{U}(0) = \mathbf{U}(1)$ gilt. Mit dem Stokes'schen Satz folgt

$$\frac{DS}{Dt} = \int_A \nabla \times \mathbf{F} \cdot d\mathbf{n}, \quad (5.37)$$

wobei \mathbf{F} die Summe aller wirkenden Kräfte ist. Konservative Kräfte ändern die Zirkulation also nicht. Mit

$$\nabla \times \left(-\frac{\mathbf{I}}{\rho} \nabla p \right) \stackrel{\text{Glg. (A.228)}}{=} \frac{\mathbf{I}}{\rho^2} \nabla \rho \times \nabla p, \quad (5.38)$$

$$\nabla \times \mathbf{U} \times \mathbf{f} \stackrel{\text{Glg. (A.230)}}{=} (\mathbf{f} \cdot \nabla) \mathbf{U} - \mathbf{f} \nabla \cdot \mathbf{U} \quad (5.39)$$

folgt

$$\frac{DS}{Dt} = \int_A \left(\frac{\mathbf{I}}{\rho^2} \nabla \rho \times \nabla p + (\mathbf{f} \cdot \nabla) \mathbf{U} - \mathbf{f} \nabla \cdot \mathbf{U} + \nabla \times \mathbf{F}_R \right) \cdot d\mathbf{n} \quad (5.40)$$

In IS gilt also in barotropen idealen Medien

$$\frac{DS}{Dt} = \mathbf{o} \Leftrightarrow S = \text{const.} \quad (5.41)$$

5.1.3 Vorticitygleichung

Die Impulsgleichung Glg. (3.91) lautet

$$\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} = -\frac{\mathbf{I}}{\rho} \nabla p + \mathbf{U} \times \boldsymbol{\eta} - \nabla k + \mathbf{g} + \mathbf{F}_R. \quad (5.42)$$

Nun wendet man auf die einzelnen Terme den Operator $\nabla \times$ an:

$$\nabla \times \frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} \stackrel{\text{(A.227)}}{=} \frac{\partial}{\partial t} \nabla \times \mathbf{U} \quad (5.43)$$

$$\nabla \times \left(-\frac{\mathbf{I}}{\rho} \nabla p \right) \stackrel{\text{(A.228)}}{=} -\frac{\mathbf{I}}{\rho^2} \nabla \rho \times \nabla p \quad (5.44)$$

$$\nabla \times (\mathbf{U} \times \boldsymbol{\eta}) \stackrel{\text{(A.230)}}{=} -(\mathbf{U} \cdot \nabla) \boldsymbol{\eta} - \boldsymbol{\eta} \nabla \cdot \mathbf{U} + (\boldsymbol{\eta} \cdot \nabla) \mathbf{U} \quad (5.45)$$

$$\nabla \times \mathbf{g} \stackrel{\text{(A.224)}}{=} \mathbf{o} \quad (5.46)$$

$$\nabla \times \nabla k \stackrel{\text{(A.224)}}{=} \mathbf{o}. \quad (5.47)$$

Somit gilt

$$\frac{\partial}{\partial t} \text{rot}(\mathbf{U}) = \frac{\mathbf{I}}{\rho^2} \nabla \rho \times \nabla p - (\mathbf{U} \cdot \nabla) \boldsymbol{\eta} - \boldsymbol{\eta} \nabla \cdot \mathbf{U} + (\boldsymbol{\eta} \cdot \nabla) \mathbf{U} + \nabla \times \mathbf{F}_R. \quad (5.48)$$

Durch Projektion auf die lokale Senkrechte erhält man

$$\frac{\partial \zeta}{\partial t} = \frac{\mathbf{I}}{\rho^2} \mathbf{k} \cdot (\nabla \rho \times \nabla p) - \boldsymbol{\eta} \nabla \cdot \mathbf{U} + \mathbf{k} \cdot [(\boldsymbol{\eta} \cdot \nabla) \mathbf{U}] - \mathbf{k} \cdot [(\mathbf{U} \cdot \nabla) \boldsymbol{\eta}] + \mathbf{k} \cdot \nabla \times \mathbf{F}_R. \quad (5.49)$$

Man rechnet zunächst mit Glg. (A.235)

$$\begin{aligned} (\boldsymbol{\eta} \cdot \nabla) w &= (\boldsymbol{\eta} \cdot \nabla) (\mathbf{U} \cdot \mathbf{k}) = \mathbf{k} \cdot [(\boldsymbol{\eta} \cdot \nabla) \mathbf{U}] + \mathbf{U} \cdot [(\boldsymbol{\eta} \cdot \nabla) \mathbf{k}] \\ &\Rightarrow \mathbf{k} \cdot [(\boldsymbol{\eta} \cdot \nabla) \mathbf{U}] = (\boldsymbol{\eta} \cdot \nabla) w - \mathbf{U} \cdot [(\boldsymbol{\eta} \cdot \nabla) \mathbf{k}], \end{aligned} \quad (5.50)$$

$$\begin{aligned} \mathbf{U} \cdot \nabla \boldsymbol{\eta} &= (\mathbf{U} \cdot \nabla) (\boldsymbol{\eta} \cdot \mathbf{k}) = \boldsymbol{\eta} \cdot [(\mathbf{U} \cdot \nabla) \mathbf{k}] + \mathbf{k} \cdot [(\mathbf{U} \cdot \nabla) \boldsymbol{\eta}] \\ &\Rightarrow \mathbf{k} \cdot [(\mathbf{U} \cdot \nabla) \boldsymbol{\eta}] = \mathbf{U} \cdot \nabla \boldsymbol{\eta} - \boldsymbol{\eta} \cdot [(\mathbf{U} \cdot \nabla) \mathbf{k}]. \end{aligned} \quad (5.51)$$

Somit gilt

$$\begin{aligned} \frac{\partial \zeta}{\partial t} &= \frac{\mathbf{I}}{\rho^2} \mathbf{k} \cdot (\nabla \rho \times \nabla p) - \boldsymbol{\eta} \nabla \cdot \mathbf{U} + (\boldsymbol{\eta} \cdot \nabla) w - \mathbf{U} \cdot [(\boldsymbol{\eta} \cdot \nabla) \mathbf{k}] - \mathbf{U} \cdot \nabla \boldsymbol{\eta} \\ &\quad + \boldsymbol{\eta} \cdot [(\mathbf{U} \cdot \nabla) \mathbf{k}] + \mathbf{k} \cdot \nabla \times \mathbf{F}_R. \end{aligned} \quad (5.52)$$

Es gelten mit den Feststellungen in Absch. A.11.1

$$\frac{\partial \mathbf{k}}{\partial x} = \frac{\mathbf{i}}{r}, \quad (5.53)$$

$$\frac{\partial \mathbf{k}}{\partial y} = \frac{\mathbf{j}}{r}, \quad (5.54)$$

$$\frac{\partial \mathbf{k}}{\partial z} = \mathbf{o}. \quad (5.55)$$

Somit folgt

$$\frac{\partial \zeta}{\partial t} = -\frac{1}{\rho^2} \mathbf{k} \cdot (\nabla \varphi \times \nabla p) - \eta \nabla \cdot \mathbf{U} + \boldsymbol{\eta} \cdot \nabla w - \frac{u \eta_x}{r} - \frac{v \eta_y}{r} - \mathbf{U} \cdot \nabla \eta + \frac{\eta_x u}{r} + \frac{\eta_y v}{r} + \mathbf{k} \cdot \nabla \times \mathbf{F}_R. \quad (5.56)$$

Die Vorticitygleichung lautet schlussendlich

$$\frac{\partial \zeta}{\partial t} = -\mathbf{U} \cdot \nabla \eta - \eta \nabla \cdot \mathbf{U} + \boldsymbol{\eta} \cdot \nabla w + \frac{1}{\rho^2} \mathbf{k} \cdot (\nabla \varphi \times \nabla p) + \mathbf{k} \cdot \nabla \times \mathbf{F}_R. \quad (5.57)$$

Geht man von einem Flachgeofluid aus, vernachlässigt die Reibung und führt einen horizontalen Windvektor \mathbf{V} ein, folgt

$$\frac{\partial \zeta}{\partial t} = -\mathbf{V} \cdot \nabla \eta - w \frac{\partial \zeta}{\partial z} - \eta \nabla \cdot \mathbf{U} + \boldsymbol{\eta} \cdot \nabla w + \frac{1}{\rho^2} \mathbf{k} \cdot (\nabla \varphi \times \nabla p). \quad (5.58)$$

Im barotropen Fall fällt hier der sogenannte *Solenoidterm*, der $\nabla \varphi \times \nabla p$ enthält, weg, vernachlässigt man außerdem die vertikale Scherung des Horizontalwindes (s. Absch. 4.2), folgt

$$\frac{\partial \zeta}{\partial t} = -\mathbf{V} \cdot \nabla \eta - \eta \nabla \cdot \mathbf{U} + \boldsymbol{\eta} \cdot \nabla w. \quad (5.59)$$

Dies ist die sogenannte *barotropic Vorticitygleichung*. Im Fall von Inkompresibilität, insbesondere im Fall der SWEs, ist $\nabla \cdot \mathbf{U} = \mathbf{o}$, woraus folgt

$$\frac{\partial \zeta}{\partial t} = -\mathbf{V} \cdot \nabla \eta + \boldsymbol{\eta} \cdot \nabla w \Rightarrow \frac{d\eta}{dt} = \boldsymbol{\eta} \cdot \nabla w. \quad (5.60)$$

Vernachlässigt man die horizontalen Gradienten von w , folgt

$$\frac{d\eta}{dt} = \eta \frac{\partial w}{\partial z}. \quad (5.61)$$

Setzt man

$$\nabla \cdot \mathbf{U} = \nabla \cdot \mathbf{V} + \frac{\partial w}{\partial z} = \mathbf{o} \quad (5.62)$$

ein, wobei ein breitenunabhängiger Krümmungssterm $\propto \frac{w}{r}$ vernachlässigt wurde, folgt

$$\frac{d\eta}{dt} = -\eta \nabla \cdot \mathbf{V}. \quad (5.63)$$

Im inkompressiblen, horizontaldivergenzfreien, barotropen Fall (außerdem wurde die vertikale Scherung des Horizontalwindes unterschlagen) ist die absolute Vorticity also eine Erhaltungsgröße.

5.1.3.1 Vorticitygleichung im p-System

Nun soll dasselbe im p-System durchgeführt werden. Die Impulsgleichungen Glg.en (3.150) - (3.151) im p-System lauten vektoriell

$$\frac{\partial \mathbf{V}}{\partial t} = -\nabla \varphi - \frac{1}{2} \nabla (\mathbf{V} \cdot \mathbf{V}) + \mathbf{V} \times \boldsymbol{\eta}' - \omega \frac{\partial \mathbf{V}}{\partial p} + \nabla \times \mathbf{F}_R^{(H)}. \quad (5.64)$$

Dabei wurde die modifizierte absolute Vorticity $\boldsymbol{\eta}'$ durch

$$\boldsymbol{\eta}' := f \mathbf{k} + \nabla \times \mathbf{V} \quad (5.65)$$

definiert. Nun wendet man auf die einzelnen Terme den Operator $\nabla \times$ an:

$$\nabla \times \frac{\partial \mathbf{V}}{\partial t} \stackrel{(A.227)}{=} \frac{\partial}{\partial t} \nabla \times \mathbf{V} \quad (5.66)$$

$$\nabla \times \nabla \varphi \stackrel{(A.224)}{=} \mathbf{o} \quad (5.67)$$

$$\nabla \times \mathbf{g} \stackrel{(A.224)}{=} \mathbf{o} \quad (5.68)$$

$$\nabla \times \nabla (\mathbf{V} \cdot \mathbf{V}) \stackrel{(A.224)}{=} \mathbf{o} \quad (5.69)$$

$$\nabla \times (\mathbf{V} \times \boldsymbol{\eta}') \stackrel{(A.230)}{=} -(\mathbf{V} \cdot \nabla) \boldsymbol{\eta}' - \boldsymbol{\eta}' \nabla \cdot \mathbf{V} + (\boldsymbol{\eta}' \cdot \nabla) \mathbf{V} \quad (5.70)$$

$$\nabla \times \left(\omega \frac{\partial \mathbf{V}}{\partial p} \right) \stackrel{(A.228)}{=} \omega \nabla \times \frac{\partial \mathbf{V}}{\partial p} - \frac{\partial \mathbf{V}}{\partial p} \times \nabla \omega \quad (5.71)$$

Somit gilt

$$\frac{\partial}{\partial t} \nabla \times \mathbf{V} = -(\mathbf{V} \cdot \nabla) \boldsymbol{\eta}' - \boldsymbol{\eta}' \nabla \cdot \mathbf{V} + (\boldsymbol{\eta}' \cdot \nabla) \mathbf{V} + \omega \nabla \times \frac{\partial \mathbf{V}}{\partial p} - \frac{\partial \mathbf{V}}{\partial p} \times \nabla \omega + \nabla \times \mathbf{F}_R^{(H)}. \quad (5.72)$$

Durch Projektion auf die lokale Senkrechte \mathbf{k} erhält man

$$\frac{\partial \zeta}{\partial t} = -\mathbf{k} \cdot [(\mathbf{V} \cdot \nabla) \boldsymbol{\eta}'] - (f + \zeta) \nabla \cdot \mathbf{V} + \mathbf{k} \cdot [(\boldsymbol{\eta}' \cdot \nabla) \mathbf{V}] - \omega \frac{\partial \zeta}{\partial p} + \mathbf{k} \cdot \left[\frac{\partial \mathbf{V}}{\partial p} \times \nabla \omega \right] + \mathbf{k} \cdot \nabla \times \mathbf{F}_R^{(H)}. \quad (5.73)$$

Man rechnet zunächst mit Glg. (A.235)

$$\begin{aligned} \mathbf{o} &= (\boldsymbol{\eta}' \cdot \nabla) (\mathbf{V} \cdot \mathbf{k}) = \mathbf{k} \cdot [(\boldsymbol{\eta}' \cdot \nabla) \mathbf{V}] + \mathbf{V} \cdot [(\boldsymbol{\eta}' \cdot \nabla) \mathbf{k}] \\ &\Rightarrow \mathbf{k} \cdot [(\boldsymbol{\eta}' \cdot \nabla) \mathbf{V}] = -\mathbf{V} \cdot [(\boldsymbol{\eta}' \cdot \nabla) \mathbf{k}], \end{aligned} \quad (5.74)$$

$$\begin{aligned} \mathbf{V} \cdot \nabla \eta &= (\mathbf{V} \cdot \nabla) (\boldsymbol{\eta}' \cdot \mathbf{k}) = \boldsymbol{\eta}' \cdot [(\mathbf{V} \cdot \nabla) \mathbf{k}] + \mathbf{k} \cdot [(\mathbf{V} \cdot \nabla) \boldsymbol{\eta}'] \\ &\Rightarrow \mathbf{k} \cdot [(\mathbf{V} \cdot \nabla) \boldsymbol{\eta}'] = \mathbf{V} \cdot \nabla \eta - \boldsymbol{\eta}' \cdot [(\mathbf{V} \cdot \nabla) \mathbf{k}]. \end{aligned} \quad (5.75)$$

Es gelten mit den Feststellungen in Absch. A.11.1

$$\frac{\partial \mathbf{k}}{\partial x} = \frac{\mathbf{i}}{r}, \quad (5.76)$$

$$\frac{\partial \mathbf{k}}{\partial y} = \frac{\mathbf{j}}{r}, \quad (5.77)$$

$$\frac{\partial \mathbf{k}}{\partial z} = \mathbf{o}. \quad (5.78)$$

Somit folgt

$$\mathbf{V} \cdot [(\boldsymbol{\eta}' \cdot \nabla) \mathbf{k}] = \boldsymbol{\eta}' \cdot [(\mathbf{V} \cdot \nabla) \mathbf{k}]. \quad (5.79)$$

Die Vorticitygleichung im p-System lautet somit

$$\frac{\partial \zeta}{\partial t} = -v\beta - (f + \zeta) \nabla \cdot \mathbf{V} - \mathbf{V} \cdot \nabla \zeta - \omega \frac{\partial \zeta}{\partial p} + \mathbf{k} \cdot \left[\frac{\partial \mathbf{V}}{\partial p} \times \nabla \omega \right] + \mathbf{k} \cdot \nabla \times \mathbf{F}_R^{(H)}. \quad (5.80)$$

Berechnet man die Vorticity des geostrophischen Windfeldes erhält man

$$\zeta_g = \frac{i}{f} \frac{\partial^2 p}{\partial x^2} + \frac{i}{f} \frac{\partial^2 p}{\partial y^2} - \frac{\beta}{f^2} \frac{\partial p}{\partial y} + \frac{\tan(\varphi) u}{r} = \frac{i}{f} \Delta_H p + \frac{\beta}{f} u + \frac{\tan(\varphi) u}{r}. \quad (5.81)$$

Für den ersten Term gilt

$$\mathcal{O}\left(\frac{i}{f} \Delta p\right) = \mathcal{O}\left(\frac{i}{f} \frac{\Delta p}{\rho L^2}\right) = 10^{-5} \frac{1}{\text{s}}. \quad (5.82)$$

Der Term des β -Effekts hat in mittleren Breiten eine Größenordnung von 10^{-6} 1/s. Daher kann man in den Extratropen die Vorticity durch die geostrophische Vorticity nähern und den Term des β -Effektes vernachlässigen.

5.1.4 Barotrope potentielle Vorticity

In der Dynamik der SWEs ist die *barotrope potentielle Vorticity* (barotrope PV) q definiert durch

$$q := \frac{\eta}{h} = \frac{\zeta + f}{h} = \frac{\mathbf{k} \cdot \nabla \times \mathbf{V} + f}{h}, \quad (5.83)$$

hierbei ist h die Tiefe. Nach Glg. (A.234) gilt

$$(\mathbf{V} \cdot \nabla) \mathbf{V} = \nabla k - \mathbf{V} \times (\nabla \times \mathbf{V}) \quad (5.84)$$

mit der spezifischen kinetischen Energie $k = \frac{1}{2} \mathbf{V}^2$. Für den zweiten Term gilt mit Glg. (A.283)

$$\mathbf{V} \times (\nabla \times \mathbf{V}) = \mathbf{V} \times \left[-\frac{v}{r} \mathbf{i} + \frac{u \tan(\varphi)}{r} \mathbf{k} + \frac{u}{r} \mathbf{j} + \mathbf{k} \left(\frac{\partial v}{\partial x} - \frac{\partial u}{\partial y} \right) + j \frac{\partial u}{\partial z} - i \frac{\partial v}{\partial z} \right]. \quad (5.85)$$

Aufgrund des Verschwindens vertikaler Scherung im barotropen Fall gilt

$$\begin{aligned} \mathbf{V} \times (\nabla \times \mathbf{V}) &= \mathbf{V} \times \left[-\frac{v}{r} \mathbf{i} + \frac{u \tan(\varphi)}{r} \mathbf{k} + \frac{u}{r} \mathbf{j} + \mathbf{k} \left(\frac{\partial v}{\partial x} - \frac{\partial u}{\partial y} \right) \right] \\ &= \mathbf{V} \times \mathbf{k} \zeta + \frac{u^2}{r} \mathbf{i} \times \mathbf{j} + \frac{v^2}{r} \mathbf{i} \times \mathbf{j} = \mathbf{V} \times \mathbf{k} \zeta + \frac{u^2}{r} \mathbf{k} - \frac{v^2}{r} \mathbf{k} \\ &= -\mathbf{k} \times \zeta \mathbf{V} + \frac{\mathbf{k}}{r} (u^2 + v^2). \end{aligned} \quad (5.86)$$

Die Vertikalkomponente interessiert hier nicht weiter. Nun kann man für die Impulsgleichung der Flachwassergleichungen Glg. (3.129) unter Vernachlässigung der Reibung schreiben

$$\begin{aligned} \frac{\partial \mathbf{V}}{\partial t} + \mathbf{k} \times \zeta \mathbf{V} &= -g \nabla (h + b) - \nabla k - f \mathbf{k} \times \mathbf{V} \\ \Leftrightarrow \frac{\partial \mathbf{V}}{\partial t} + q h \mathbf{k} \times \mathbf{V} &= -g \nabla (h + b) - \nabla k. \end{aligned} \quad (5.87)$$

Es gilt

$$\frac{Dq}{Dt} = \frac{i}{h} \frac{D\eta}{Dt} - \frac{\eta}{h^2} \frac{Dh}{Dt} \stackrel{(3.130)}{=} -\frac{\eta}{h} \nabla_H \cdot \mathbf{V} - \frac{\eta}{h^2} (-h \nabla_H \cdot \mathbf{V}) = 0. \quad (5.88)$$

Die barotrope PV ist also eine Erhaltungsgröße. In den mittleren Breiten ist die planetare Vorticity eine Größenordnung größer als die relative, somit folgt aus der Tatsache, dass die barotrope potentielle Vorticity erhalten ist

$$h \downarrow \Rightarrow (\zeta + f) \downarrow \Rightarrow \zeta \downarrow, \quad (5.89)$$

wobei von einem positiven Vorzeichen von f und somit auch von η ausgegangen wurde. Bei negativem f gilt analog, dass ζ wachsen muss. Trifft eine Westströmung also auf ein orographisches Hindernis, so entsteht antizyklonale relative Vorticity. Dies bezeichnet man als *orographischen β -Effekt*. Ein wichtiges Beispiel ist das Entstehen planetarer Wellen an den Rocky Mountains.

5.2 Divergenz

Die Divergenz des Horizontalwindes bezeichnet man mit

$$\delta := \nabla \cdot \mathbf{V}. \quad (5.90)$$

Nach Glg. (A.281) gilt

$$\delta = \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} - v \frac{\tan(\varphi)}{a+z}. \quad (5.91)$$

Die Divergenz des Gesamtwindfeldes wird mit

$$\xi := \nabla \cdot \mathbf{U} \quad (5.92)$$

bezeichnet. Mit Glg. (A.281) kann man

$$\xi = \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} + \frac{\partial w}{\partial z} - v \frac{\tan(\varphi)}{a+z} + \frac{w}{a+z} \quad (5.93)$$

notieren. Im Falle wirbelfreier nichtviskoser inkompressibler Strömungen gilt mit Glg. (3.91) für eine Stromfunktion χ in IS

$$\nabla \left(\frac{\partial \chi}{\partial t} + k + g + \frac{p}{\rho} \right) = 0, \quad (5.94)$$

$$\Leftrightarrow \frac{\partial \chi}{\partial t} + \frac{1}{2} \mathbf{U}^2 + gz + \frac{p}{\rho} = \text{homogen}, \quad (5.95)$$

was man als *zeitabhängige Bernoulli-Gleichung* bezeichnet.

5.2.1 Geschwindigkeits- und Richtungsdivergenz

Analog zur Vorticity kann man auch die Horizontaldivergenz aufteilen in zwei anschauliche Anteile. Man verwendet wieder das KS aus Absch. 5.1.1. Diesmal leitet man die erste Komponente der Glg. (5.29) nach s und die zweite nach n ab:

$$\begin{aligned} \delta &= \frac{\partial}{\partial s} (V \cos(\beta)) + \frac{\partial}{\partial n} (V \sin(\beta)) \\ &= \cos(\beta) \frac{\partial V}{\partial s} - V \sin(\beta) \frac{\partial \beta}{\partial s} + \sin(\beta) \frac{\partial V}{\partial n} + V \cos(\beta) \frac{\partial \beta}{\partial n} \end{aligned} \quad (5.96)$$

Betrachtet man den Koordinatenursprung, so folgt mit $\beta = 0$

$$\delta = \frac{\partial V}{\partial s} + V \frac{\partial \beta}{\partial n}. \quad (5.97)$$

Der erste Term beschreibt eine Divergenz aufgrund von Geschwindigkeitsunterschieden in Strömungsrichtung, dies nennt man Geschwindigkeitsdivergenz. Der zweite Term bezeichnet eine Richtungsauffächerung senkrecht zur Strömungsrichtung, dies ist Richtungsdivergenz.

5.2.2 Divergenzgleichung

Es gibt auch eine prognostische Gleichung für die Divergenz, die sogenannte *Divergenzgleichung*. Die Impulsgleichung Glg. (3.91) lautet

$$\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} = -\frac{1}{\rho} \nabla p + \mathbf{U} \times \mathbf{f} - (\mathbf{U} \cdot \nabla) \mathbf{U} + \mathbf{g} + \mathbf{F}_R. \quad (5.98)$$

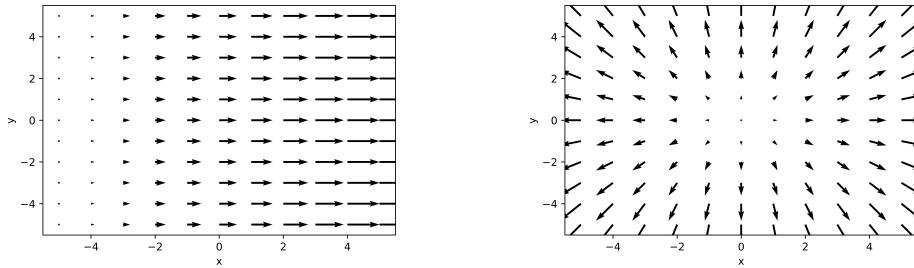


Abbildung 5.3: Geschwindigkeitsdivergenz (links) und Richtungsdivergenz (rechts).

Nun wendet man auf die einzelnen Terme den Operator $\nabla \cdot$ an:

$$\nabla \cdot \frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} \stackrel{(A.227)}{=} \frac{\partial \xi}{\partial t} \quad (5.99)$$

$$\nabla \cdot \left(-\frac{\mathbf{I}}{\varphi} \nabla p \right) \stackrel{(A.226)}{=} \frac{\mathbf{I}}{\varphi^2} \nabla \varphi \cdot \nabla p - \frac{\mathbf{I}}{\varphi} \Delta p \quad (5.100)$$

$$\nabla \cdot (\mathbf{U} \times \mathbf{f}) \stackrel{(A.232)}{=} \mathbf{f} \cdot \boldsymbol{\xi} \quad (5.101)$$

Die Divergenz von \mathbf{g} besteht aufgrund der Poisson-Gleichung nur aus dem Zentrifugalanteil. Da man in der Meteorologie jedoch für analytische Herleitungen meist von einem radialsymmetrischen Schwerkraftfeld ausgeht, wird auch dieser Anteil vernachlässigt. Es gilt also

$$\frac{\partial \xi}{\partial t} = \frac{\mathbf{I}}{\varphi^2} \nabla \varphi \cdot \nabla p - \frac{\mathbf{I}}{\varphi} \Delta p + \mathbf{f} \cdot \boldsymbol{\xi} - \nabla \cdot [(\mathbf{U} \cdot \nabla) \mathbf{U}] + \nabla \cdot \mathbf{F}_R. \quad (5.102)$$

Dies ist die Divergenzgleichung. Mit der Weber-Transformation erhält man

$$\begin{aligned} \nabla \cdot [(\mathbf{U} \cdot \nabla) \mathbf{U}] &= \Delta k - \nabla \cdot [\mathbf{U} \times (\nabla \times \mathbf{U})] \stackrel{\text{Glg. (A.232)}}{=} \Delta k - \boldsymbol{\xi}^2 + \mathbf{U} \cdot (\nabla \times \boldsymbol{\xi}) \\ &\stackrel{\text{Glg. (A.231)}}{=} \Delta k - \boldsymbol{\xi}^2 - \mathbf{U} \cdot (\Delta \mathbf{U}) + \mathbf{U} \cdot \nabla \boldsymbol{\xi}. \end{aligned} \quad (5.103)$$

Dies führt auf eine weitere Form der Divergenzgleichung:

$$\frac{\partial \xi}{\partial t} = \frac{\mathbf{I}}{\varphi^2} \nabla \varphi \cdot \nabla p - \frac{\mathbf{I}}{\varphi} \Delta p + \mathbf{f} \cdot \boldsymbol{\xi} - \Delta k + \boldsymbol{\xi}^2 + \mathbf{U} \cdot (\Delta \mathbf{U}) - \mathbf{U} \cdot \nabla \boldsymbol{\xi} + \nabla \cdot \mathbf{F}_R \quad (5.104)$$

5.2.2.1 Divergenzgleichung im p-System

Die Impulsgleichungen Glg.en (3.150) - (3.151) im p-System lauten vektoriell

$$\frac{\partial \mathbf{V}}{\partial t} = -\nabla \varphi - \mathbf{f} \mathbf{k} \times \mathbf{V} - (\mathbf{V} \cdot \nabla) \mathbf{V} - \omega \frac{\partial \mathbf{V}}{\partial p} + \nabla \cdot \mathbf{F}_R^{(H)}. \quad (5.105)$$

Es ist für die Herleitung sinnvoll, hier ein \mathbf{g} zu addieren und $-\nabla \varphi$ als dreidimensionalen Vektor zu interpretieren mit $-g$ in der z-Komponente. Somit ergibt eine Anwendung von $\nabla \cdot$ auf $-\nabla \varphi + \mathbf{g} = -\Delta_H \varphi$, wofür aber in der weiteren Herleitung einfach $\Delta \varphi$ notiert wird. Durch Applizieren des Operators $\nabla \cdot$ auf die einzelnen Terme erhält

man somit

$$\begin{aligned}
 \nabla \cdot \frac{\partial \mathbf{V}}{\partial t} &\stackrel{(A.227)}{=} \frac{\partial \delta}{\partial t}, \\
 -\nabla \cdot \nabla \varphi &= -\Delta \varphi, \\
 -\nabla \cdot (f\mathbf{k} \times \mathbf{V}) &\stackrel{(A.232)}{=} -\mathbf{V} \cdot [\nabla \times (f\mathbf{k})] + f\mathbf{k} \cdot (\nabla \times \mathbf{V}) \stackrel{(A.228)}{=} -\mathbf{V} \cdot [-\mathbf{k} \times \nabla f + f\nabla \times \mathbf{k}] + f\zeta \\
 &\stackrel{(\text{??})}{=} \mathbf{V} \cdot (\mathbf{k} \times \beta\mathbf{j}) + f\zeta = -u\beta + f\zeta, \\
 \nabla \cdot \left(-\omega \frac{\partial \mathbf{V}}{\partial p} \right) &\stackrel{(A.226)}{=} -\omega \frac{\partial \delta}{\partial p} - \frac{\partial \mathbf{V}}{\partial p} \cdot \nabla \omega.
 \end{aligned} \tag{5.106}$$

Somit folgt

$$\frac{\partial \delta}{\partial t} = -\Delta \varphi - u\beta + f\zeta - \nabla \cdot [(\mathbf{V} \cdot \nabla) \mathbf{V}] - \omega \frac{\partial \delta}{\partial p} - \frac{\partial \mathbf{V}}{\partial p} \cdot \nabla \omega + \nabla \cdot \mathbf{F}_R^{(H)}. \tag{5.107}$$

Dies ist die Divergenzgleichung im p-System. Mit der Weber-Transformation erhält man

$$\begin{aligned}
 \nabla \cdot [(\mathbf{V} \cdot \nabla) \mathbf{V}] &= \Delta k - \nabla \cdot [\mathbf{V} \times (\nabla \times \mathbf{V})] \stackrel{\text{Glg. (A.232)}}{=} \Delta k - (\nabla \times \mathbf{V})^2 + \mathbf{V} \cdot (\nabla \times (\nabla \times \mathbf{V})) \\
 &\stackrel{\text{Glg. (A.231)}}{=} \Delta k - (\nabla \times \mathbf{V})^2 - \mathbf{V} \cdot (\Delta \mathbf{V}) + \mathbf{V} \cdot \nabla \delta.
 \end{aligned} \tag{5.108}$$

Dies führt auf eine weitere Form der Divergenzgleichung:

$$\frac{\partial \delta}{\partial t} = -\Delta \varphi - u\beta + f\zeta - \Delta k + (\nabla \times \mathbf{V})^2 + \mathbf{V} \cdot (\Delta \mathbf{V}) - \mathbf{V} \cdot \nabla \delta - \omega \frac{\partial \delta}{\partial p} - \frac{\partial \mathbf{V}}{\partial p} \cdot \nabla \omega + \nabla \cdot \mathbf{F}_R^{(H)} \tag{5.109}$$

Setzt man hier $\delta = \omega = 0$ ein, folgt die *Balancegleichung*

$$\Delta \varphi = -u\beta + f\zeta - \Delta k + (\nabla \times \mathbf{V})^2 + \mathbf{V} \cdot (\Delta \mathbf{V}). \tag{5.110}$$

Vernachlässigt man den letzten Term, erhält man die *lineare Balancegleichung*

$$\Delta \varphi = -u\beta + f\zeta. \tag{5.111}$$

Verwendet man eine Stromfunktion ψ , folgt

$$\Delta \varphi = \beta \frac{\partial \psi}{\partial y} + f \Delta \psi. \tag{5.112}$$

Die Balancegleichung ermöglicht die Transformation $\psi \leftrightarrow \varphi$.

Ein globales Einschichtmodell enthielte als einzige prognostische Variable die Stromfunktion, die prognostische Gleichung für diese wäre die Vorticitygleichung, der Wind wäre divergenzfrei. Das Geopotential könnte bei Bedarf mittels Lösung der Balancegleichung diagnostiziert werden.

Es gibt also bei einem globalen Horizontalwindfeld immer einen Kompromiss aus Divergenzfreiheit und Geostrophie, ein realistisches synoptisch-skaliges Windfeld ist entweder divergenzfrei oder geostrophisch oder keins von beidem, jedoch nicht beides zugleich. Möchte man Schallwellen (enthalten Divergenz) und Schwerewellen (sind ageostrophisch) filtern (z. B. bei der Initialisierung), muss man daher ein Windfeld finden, was möglichst geostrophisch ist (und somit zum gemessenen Geopotential passt und keine Schwerewellen auslöst), und gleichzeitig möglichst divergenzfrei ist (und somit keine Schallwellen auslöst).

5.3 Potentielle Vorticity

5.3.1 Ertel'scher Wirbelsatz

Man definiert eine Vorform der potentiellen Vorticity P_ψ durch

$$P_\psi := \alpha \boldsymbol{\eta} \cdot \nabla \psi, \tag{5.113}$$

wobei a das spezifische Volumen sei und ψ eine beliebige Funktion von Ort und Zeit. Differenziert man dies partiell nach der Zeit, erhält man

$$\frac{\partial P_\psi}{\partial t} = \frac{\partial a}{\partial t} \boldsymbol{\eta} \cdot \nabla \psi + a \frac{\partial (\nabla \times \mathbf{U})}{\partial t} \cdot \nabla \psi + a \boldsymbol{\eta} \cdot \nabla \frac{\partial \psi}{\partial t}. \quad (5.114)$$

Zunächst wird Glg. (5.48) in Termen von a notiert

$$\frac{\partial}{\partial t} \text{rot}(\mathbf{U}) = \nabla p \times \nabla a - (\mathbf{U} \cdot \nabla) \boldsymbol{\eta} - \boldsymbol{\eta} \nabla \cdot \mathbf{U} + (\boldsymbol{\eta} \cdot \nabla) \mathbf{U} + \nabla \times \mathbf{F}_R \quad (5.115)$$

In Absch. 5.1.3 hat man durch Projektion dieser Gleichung auf die lokale Senkrechte \mathbf{k} eine Gleichung für $\frac{\partial \zeta}{\partial t}$ hergeleitet, analog wird hier mit einer Projektion auf $\nabla \psi$ verfahren. Man rechnet zunächst mit Glg. (A.235)

$$(\boldsymbol{\eta} \cdot \nabla) (\mathbf{U} \cdot \nabla \psi) = \nabla \psi \cdot [(\boldsymbol{\eta} \cdot \nabla) \mathbf{U}] + \mathbf{U} \cdot [(\boldsymbol{\eta} \cdot \nabla) \nabla \psi] \\ \Rightarrow \nabla \psi \cdot [(\boldsymbol{\eta} \cdot \nabla) \mathbf{U}] = (\boldsymbol{\eta} \cdot \nabla) (\mathbf{U} \cdot \nabla \psi) - \mathbf{U} \cdot [(\boldsymbol{\eta} \cdot \nabla) \nabla \psi], \quad (5.116)$$

$$(\mathbf{U} \cdot \nabla) (\boldsymbol{\eta} \cdot \nabla \psi) = \boldsymbol{\eta} \cdot [(U \cdot \nabla) \nabla \psi] + \nabla \psi \cdot [(U \cdot \nabla) \boldsymbol{\eta}] \\ \Rightarrow \nabla \psi \cdot [(U \cdot \nabla) \boldsymbol{\eta}] = (U \cdot \nabla) (\boldsymbol{\eta} \cdot \nabla \psi) - \boldsymbol{\eta} \cdot [(U \cdot \nabla) \nabla \psi]. \quad (5.117)$$

Man erhält somit

$$a \frac{\partial (\nabla \times \mathbf{U})}{\partial t} \cdot \nabla \psi = a (\nabla p \times \nabla a) \cdot \nabla \psi - a (\mathbf{U} \cdot \nabla) (\boldsymbol{\eta} \cdot \nabla \psi) + a \boldsymbol{\eta} \cdot [(U \cdot \nabla) \nabla \psi] \\ - a (\nabla \psi \cdot \boldsymbol{\eta}) \nabla \cdot \mathbf{U} + a (\boldsymbol{\eta} \cdot \nabla) (\mathbf{U} \cdot \nabla \psi) - a \mathbf{U} \cdot [(\boldsymbol{\eta} \cdot \nabla) \nabla \psi] + a \mathbf{F}_R \cdot \nabla \psi. \quad (5.118)$$

Es folgt

$$\begin{aligned} \frac{\partial P_\psi}{\partial t} &= a \boldsymbol{\eta} \cdot \nabla \left(\frac{\partial \psi}{\partial t} \right) + a (\nabla p \times \nabla a) \cdot \nabla \psi - a (\mathbf{U} \cdot \nabla) (\boldsymbol{\eta} \cdot \nabla \psi) + a \boldsymbol{\eta} \cdot [(U \cdot \nabla) \nabla \psi] \\ &\quad - a (\nabla \psi \cdot \boldsymbol{\eta}) \nabla \cdot \mathbf{U} + a (\boldsymbol{\eta} \cdot \nabla) (\mathbf{U} \cdot \nabla \psi) - a \mathbf{U} \cdot [(\boldsymbol{\eta} \cdot \nabla) \nabla \psi] \\ &\quad + \frac{\partial a}{\partial t} \boldsymbol{\eta} \cdot \nabla \psi + a \mathbf{F}_R \cdot \nabla \psi \\ &= a \boldsymbol{\eta} \cdot \nabla \left(\frac{\partial \psi}{\partial t} \right) + a (\nabla p \times \nabla a) \cdot \nabla \psi - a (\mathbf{U} \cdot \nabla) (\boldsymbol{\eta} \cdot \nabla \psi) + a \boldsymbol{\eta} \cdot [(U \cdot \nabla) \nabla \psi] \\ &\quad + a (\boldsymbol{\eta} \cdot \nabla) (\mathbf{U} \cdot \nabla \psi) - a \mathbf{U} \cdot [(\boldsymbol{\eta} \cdot \nabla) \nabla \psi] - (U \cdot \nabla a) (\boldsymbol{\eta} \cdot \nabla \psi) + a \mathbf{F}_R \cdot \nabla \psi. \end{aligned} \quad (5.119)$$

Mit Glg. (A.233) folgt

$$\boldsymbol{\eta} \cdot [(U \cdot \nabla) \nabla \psi] - \mathbf{U} \cdot [(\boldsymbol{\eta} \cdot \nabla) \nabla \psi] = 0. \quad (5.120)$$

Der *Ertel'sche Wirbelsatz* lautet somit

$$\frac{\partial P_\psi}{\partial t} = a \boldsymbol{\eta} \cdot \nabla \left(\frac{\partial \psi}{\partial t} \right) + a (\nabla p \times \nabla a) \cdot \nabla \psi - a (\mathbf{U} \cdot \nabla) (\boldsymbol{\eta} \cdot \nabla \psi) \\ + a (\boldsymbol{\eta} \cdot \nabla) (\mathbf{U} \cdot \nabla \psi) - (U \cdot \nabla a) (\boldsymbol{\eta} \cdot \nabla \psi) + a \mathbf{F}_R \cdot \nabla \psi. \quad (5.121)$$

Mit der materiellen Ableitung kann man dies zu

$$\frac{DP_\psi}{Dt} = a \boldsymbol{\eta} \cdot \nabla \left(\frac{D\psi}{Dt} \right) + a (\nabla p \times \nabla a) \cdot \nabla \psi + a \mathbf{F}_R \cdot \nabla \psi \quad (5.122)$$

umformulieren.

5.3.2 Definition und Eigenschaften der PV

Die *potentielle Vorticity* P ist definiert durch

$$P := a\boldsymbol{\eta} \cdot \nabla\theta, \quad (5.123)$$

sie entsteht also, indem man in Glg. (5.113) für ψ die potentielle Temperatur θ einsetzt. Diese ist eine Funktion von Druck und spezifischem Volumen, also verschwindet in Glg. (5.121) der Term mit dem Vektorprodukt. Bei adiabatischen Prozessen gilt also,

$$\frac{\partial P}{\partial t} = -a(\mathbf{U} \cdot \nabla)(\boldsymbol{\eta} \cdot \nabla\psi) - (\boldsymbol{\eta} \cdot \nabla\psi)(\mathbf{U} \cdot \nabla a) + a\mathbf{F}_R \cdot \nabla\theta. \quad (5.124)$$

in diesem Fall ist die potentielle Vorticity also bis auf die Reibung eine Erhaltungsgröße:

$$\frac{DP}{Dt} = a\mathbf{F}_R \cdot \nabla\theta \quad (5.125)$$

Für die potentielle Vorticity gilt mit Glg. (A.284)

$$\begin{aligned} P &= a\boldsymbol{\eta} \cdot \nabla\theta = a\mathbf{f} \cdot \nabla\theta \\ &\quad + a \left[\left(\frac{\partial w}{\partial y} - \frac{\partial v}{\partial z} - \frac{v}{r} \right) \frac{\partial\theta}{\partial x} + \left(\frac{\partial u}{\partial z} - \frac{\partial w}{\partial x} + \frac{u}{r} \right) \frac{\partial\theta}{\partial y} + \left(\frac{\partial v}{\partial x} - \frac{\partial u}{\partial y} - \frac{u \tan(\varphi)}{r} \right) \frac{\partial\theta}{\partial z} \right]. \end{aligned} \quad (5.126)$$

Hier macht man nun folgende Näherungen:

- Näherung für Flachgeofluide (s. Absch. 3.4.5.1)
- Streichen der vertikalen Coriolis-Beschleunigung (s. Absch. 3.4.5.2)
- Vereinfachung der Krümmungsterme (s. Absch. 3.4.5.3)
- Vernachlässigung der Vertikalgeschwindigkeit bei der Berechnung der Rotation des Windfeldes

Dann erhält man

$$P = a\eta \frac{\partial\theta}{\partial z} + a \left[-\frac{\partial v}{\partial z} \frac{\partial\theta}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial z} \frac{\partial\theta}{\partial y} \right]. \quad (5.127)$$

In einer hydrostatischen Atmosphäre kann man in Glg. (5.127) die vertikalen Ableitungen ins p-System transformieren:

$$P = -gf \frac{\partial\theta}{\partial p} - g \left(\frac{\partial v}{\partial x} - \frac{\partial u}{\partial y} - \frac{u \tan(\varphi)}{a} \right) \frac{\partial\theta}{\partial p} + g \left[\frac{\partial v}{\partial p} \frac{\partial\theta}{\partial x} - \frac{\partial u}{\partial p} \frac{\partial\theta}{\partial y} \right] \quad (5.128)$$

Transformiert man hier die horizontalen Ableitungen mit Glg. (3.139) auf eine generalisierte Vertikalkoordinate μ , folgt

$$\frac{P}{g} = \dots \Big|_{\mu} - \left(\frac{\partial \mu}{\partial x} \right)_z \frac{\partial v}{\partial \mu} \frac{\partial \theta}{\partial p} + \left(\frac{\partial \mu}{\partial y} \right)_z \frac{\partial u}{\partial \mu} \frac{\partial \theta}{\partial p} + \frac{\partial v}{\partial p} \frac{\partial \theta}{\partial \mu} \left(\frac{\partial \mu}{\partial x} \right)_z - \frac{\partial u}{\partial p} \frac{\partial \theta}{\partial \mu} \left(\frac{\partial \mu}{\partial y} \right)_z, \quad (5.129)$$

wobei die formal zu Glg. (5.128) gleichen Terme abgekürzt wurden. Die formal neuen Terme verschwinden in den beiden Fällen $\mu = p, \theta$. Somit kann man für die potentielle Vorticity notieren

$$P = -g\eta_p \frac{\partial\theta}{\partial p} + g \left[\frac{\partial v}{\partial p} \left(\frac{\partial\theta}{\partial x} \right)_p - \frac{\partial u}{\partial p} \left(\frac{\partial\theta}{\partial y} \right)_p \right], \quad (5.130)$$

wobei der Index p bedeutet, dass partielle Ableitungen im p-System zu bilden sind. In isentropen Koordinaten bleibt nur der erste Term bestehen,

$$P = -g\eta_\theta \left(\frac{\partial p}{\partial \theta} \right)^{-1} \equiv \frac{\eta_\theta}{\sigma_\theta}, \quad (5.131)$$

wobei die *hydrostatische Stabilität im θ -System*, definiert durch

$$\sigma_\theta := -\frac{1}{g} \frac{\partial p}{\partial \theta}, \quad (5.132)$$

eingeführt wurde.

6 WELLEN UND INSTABILITÄTEN

Die Bewegungsgleichungen haben Wellenlösungen. Diese erhält man durch Einsetzen eines komplexen harmonischen Ansatzes in das jeweilige Gleichungssystem und Suchen nach nichttrivialen Lösungen. Es findet eine Unterscheidung in barotrope und barokline Wellen statt. In diesem Kapitel werden die advektiven Terme linearisiert, um die Gleichungen leichter behandeln zu können, dabei wird gelegentlich aufgrund der klimatologischen Relevanz ein zonaler Grundstrom aufgenommen.

6.1 Kinematik

Als Wellen bezeichnet man räumlich und zeitlich periodische Änderungen. Der maximale betragsmäßige Ausschlag aus der Ruhelage ist die Amplitude. Die Zeit $T > 0$ bis zur Wiederholung des Bewegungsmusters an einem festgehaltenen Ort bezeichnet man als Periodendauer, ihr Inverses ist die Frequenz f . Die Kreisfrequenz ω ist definiert als

$$\omega := 2\pi f = \frac{2\pi}{T}. \quad (6.1)$$

Analog ist die Wellenlänge $\lambda > 0$ die Länge, nach der sich das Bewegungsmuster wiederholt. Wellenzahl κ und Kreiswellenzahl k sind analog zu Frequenz und Kreisfrequenz definiert durch

$$\kappa := \frac{1}{\lambda}, \quad (6.2)$$

$$k := \frac{2\pi}{\lambda}. \quad (6.3)$$

Eine Welle der Größe a wird beschrieben durch eine Gleichung der Form

$$a(x, t) = A f(kx - \omega t + \varphi). \quad (6.4)$$

Dabei ist f eine reell- oder komplexwertige, 2π -periodische Funktion, d. h. $f(\xi + 2\pi) = f(\xi)$ für jedes $\xi \in \mathbb{R}$. Dies kann, muss aber keine trigonometrische Funktion sein. f wird häufig komplexwertig gewählt, z. B. $f(x) = \exp(ix)$, falls dies die mathematische Beschreibung abkürzt oder anschaulicher macht. Bevor man jedoch Größen berechnet, die man mit Messgrößen vergleichen möchte, muss man allerdings alles auf die reelle Achse projizieren. Das Argument $kx - \omega t + \varphi$ nennt man auch die *Phase* der Welle, in der komplexen Ebene ist dies der Winkel, den die Zahl mit der Realachse einschließt. φ ist dabei die Phasenverschiebung, die ermöglicht, dass die Phase der Welle bei $x, t = 0$ nicht gleich Null ist. Man kann bei Herleitungen häufig auf φ verzichten, indem man die Zeit- oder Ortskoordinate entsprechend verschiebt. k und ω können auch imaginäre Anteile haben, so z. B. bei Wellen, die exponentiell in ein Medium hineinpropagieren (sog. *evanescente Wellen*), oder bei Instabilitäten, bei denen die Amplitude über einen gewissen hinweg Zeitraum exponentiell anwächst. Genauso kann auch der Vorfaktor A komplex sein, und so eine Phasenverschiebung beinhalten.

Im Allgemeinen kann sich eine Welle auch in einem dreidimensionalen Raum fortpflanzen, in diesem Fall schreibt man zunächst allgemein

$$a(\mathbf{r}, t) = A f(\varphi(\mathbf{r}, t)) \quad (6.5)$$

mit $\varphi = \varphi(\mathbf{r}, t)$ als Phasenfunktion. Die Phasenfunktion kann zum Beispiel die Gestalt

$$\varphi(\mathbf{r}, t) = \mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t \quad (6.6)$$

haben, hierbei bezeichnet man $\mathbf{k} = (k_x, k_y, k_z)^T$ als den Wellenvektor. Sein Betrag ist gleich der Kreiswellenzahl, er zeigt in Ausbreitungsrichtung der Welle. Leitet man Glg. (6.6) nach der Zeit ab, folgt

$$\frac{d\varphi(\mathbf{r}, t)}{dt} = \mathbf{k} \cdot \frac{d\mathbf{r}}{dt} - \omega \quad (6.7)$$

Setzt man die linke Seite gleich Null, bewegt sich also mit einem Punkt konstanter Phase mit, und wählt eine Trajektorie parallel zu \mathbf{k} , so erhält man die Phasengeschwindigkeit

$$c = \frac{\omega}{k} = \frac{\lambda}{T} = \lambda f. \quad (6.8)$$

Die Abhängigkeit

$$\omega = \omega(k) \quad (6.9)$$

bezeichnet man als *Dispersionsrelation*. Nun betrachtet man die Überlagerung $f(x, t) = f_1(x, t) + f_2(x, t)$ zweier Wellen:

$$f_1(x, t) = -\cos(k_1 x - \omega_1 t) \quad (6.10)$$

$$f_2(x, t) = \cos(k_2 x - \omega_2 t) \quad (6.11)$$

$$f(x, t) = -\cos(k_1 x - \omega_1 t) + \cos(k_2 x - \omega_2 t) \quad (6.12)$$

Mit Glg. (A.68) folgt

$$\begin{aligned} -\cos(a) + \cos(\beta) &= 1 - \cos(a) - 1 + \cos(\beta) = 2\sin^2\left(\frac{a}{2}\right) - 2\sin^2\left(\frac{\beta}{2}\right) \\ &= 2\sin^2\left(\frac{a}{2}\right) - 2\sin^2\left(\frac{a}{2}\right)\sin^2\left(\frac{\beta}{2}\right) - 2\sin^2\left(\frac{\beta}{2}\right) + 2\sin^2\left(\frac{a}{2}\right)\sin^2\left(\frac{\beta}{2}\right) \\ &= 2\left[\sin^2\left(\frac{a}{2}\right)\cos^2\left(\frac{\beta}{2}\right) - \cos^2\left(\frac{a}{2}\right)\sin^2\left(\frac{\beta}{2}\right)\right] \\ &= 2\left[\sin\left(\frac{a}{2}\right)\cos\left(\frac{\beta}{2}\right) - \cos\left(\frac{a}{2}\right)\sin\left(\frac{\beta}{2}\right)\right]\left[\sin\left(\frac{a}{2}\right)\cos\left(\frac{\beta}{2}\right) + \cos\left(\frac{a}{2}\right)\sin\left(\frac{\beta}{2}\right)\right] \\ &= 2\sin\left(\frac{a-\beta}{2}\right)\sin\left(\frac{a+\beta}{2}\right). \end{aligned} \quad (6.13)$$

Es gilt also

$$f(x, t) = 2\sin\left(\frac{\Delta k x - \Delta \omega t}{2}\right)\sin(\bar{k}x - \bar{\omega}t) \quad (6.14)$$

mit

$$\Delta k := k_2 - k_1, \quad (6.15)$$

$$\Delta \omega := \omega_2 - \omega_1, \quad (6.16)$$

$$\bar{k} := \frac{k_1 + k_2}{2}, \quad (6.17)$$

$$\bar{\omega} := \frac{\omega_1 + \omega_2}{2}. \quad (6.18)$$

Die Einhüllende $\sin\left(\frac{\Delta k x - \Delta \omega t}{2}\right)$ bewegt sich also mit der Geschwindigkeit

$$v_e = \frac{\Delta \omega}{\Delta k}. \quad (6.19)$$

Man definiert daher die *Gruppengeschwindigkeit* c_{gr} durch

$$c_{\text{gr}} := \frac{\partial \omega}{\partial k}. \quad (6.20)$$

Sie kann also aus der Dispersionsrelation abgeleitet werden. Es ist die Geschwindigkeit, mit der sich Wellenpakete bewegen, mit der also Energie transportiert wird. Ist

$$c_{\text{gr}} = c \quad (6.21)$$

unabhängig von k , so bezeichnet man die Welle als *dispersionsfrei*. Man kann die Gruppengeschwindigkeit vektoriell zu

$$c_{\text{gr}} = \nabla_k \omega. \quad (6.22)$$

verallgemeinern. Mit $\omega = ck$ kann man schreiben

$$c_{\text{gr}} = \frac{d\omega}{dk} = c + k \frac{dc}{dk} = c + k \frac{d\lambda}{dk} \frac{dc}{d\lambda} = c - \frac{2\pi}{k} \frac{dc}{dy} = c - \lambda \frac{dc}{d\lambda}. \quad (6.23)$$

Im Fall $dc/d\lambda < 0$ spricht man von *anormaler Dispersion*. In diesem Fall propagiert die Energie schneller als die Phasengeschwindigkeit. Im Fall

$$\frac{dc}{d\lambda} \lambda > c \Leftrightarrow \frac{dc}{d\lambda} > \frac{c}{\lambda} = f \quad (6.24)$$

bzw.

$$\frac{d\omega}{dk} < 0 \quad (6.25)$$

propagiert die Energie in einer dem Wellenvektor entgegengesetzten Richtung.

Lässt der Charakter einer Welle dies zu, kategorisiert man sie entweder als *Longitudinalwelle*, bei der die Oszillatoren parallel zum Wellenvektor schwingen, oder als *Transversalwelle*, bei der sie senkrecht dazu schwingen. Bei mechanischen Transversalwellen führt man als weiter kinematische Größen die *Wellenhöhe* H als doppelter Amplitude sowie die *Steilheit* S einer Welle ein, welche durch

$$S := \frac{H}{\lambda} \quad (6.26)$$

definiert ist und somit dimensionslos ist.

6.2 Begründung der Linearisierung

Man kann sich die Bewegungen in der Atmosphäre als in sechs Anteile aufgeteilt denken:

- quasigeostrophische, quasidivergenzfreie Bewegungen inkl. Rossby-Wellen
- Schwerellen
- Konvektion
- Reibungswind
- Frontenzirkulation
- mikroskalige Turbulenz
- (Schallwellen, wobei diese keine meteorologische Relevanz haben, aber in Modellen als Lärm auftreten können)

Zu einem gegebenen Zeitpunkt ist diese Aufteilung konzeptionell meist halbwegs möglich. Leider gilt dies nicht für die Vorhersage, da zwischen all diesen Bereichen Wechselwirkungen existieren. Man spricht in so einem Fall auch von Nichtlinearität. Sind A, B zwei Phänomene und ist $f(A + B)$ beispielsweise eine Vorhersage, so gilt im Allgemeinen

$$f(A + B) \neq f(A) + f(B), \quad (6.27)$$

der Gesamteffekt von $A + B$ ist also nicht die Summe der Einzeleffekte A, B , da f keine lineare Abbildung ist.

Bei der Suche nach analytischen Lösungen eines nichtlinearen Gleichungssystems, insbesondere bei der Suche nach Wellenlösungen, ist man jedoch sehr interessiert an einer Linearisierung. Dies ist mal mehr mal weniger gerechtfertigt. Man geht hierzu davon aus, dass für eine Größe $A = A_0 + A'$ mit A_0 als Hintergrundzustand und A' als Störung gilt

$$\mathcal{O}(A_0) = \mathcal{O}(A') + 1, \quad (6.28)$$

daher gilt

$$\mathcal{O}(A'^2) = \mathcal{O}(A_0) - 2. \quad (6.29)$$

Man vernachlässigt daher alle Terme, in denen Produkte der Störungen auftreten. Dies führt zu einer Linearisierung des Gleichungssystems. Für die Ableitungen gilt unter Annahme einer ebenen Welle in x-Richtung

mit Kreisfrequenz ω und Kreiswellenzahl k , die nur die Störungen betrifft

$$\mathcal{O}\left(\frac{\partial A'}{\partial t}\right) = \mathcal{O}(\omega A'), \quad (6.30)$$

$$\mathcal{O}\left(\frac{\partial A'}{\partial x}\right) = \mathcal{O}(kA') \quad (6.31)$$

$$\mathcal{O}\left(\frac{\frac{\partial A'}{\partial t}}{A \frac{\partial A'}{\partial x}}\right) = \mathcal{O}\left(\frac{\omega}{Ak}\right) = \mathcal{O}\left(\frac{c}{A}\right). \quad (6.32)$$

Aus Glg. (6.32) folgt, dass man die advektiven Terme vernachlässigen kann, wenn die Phasengeschwindigkeit $c = \frac{\omega}{k}$ viel größer als die Fluidteilchengeschwindigkeit ist.

Ist es möglich, alle nichtlinearen Terme eines Gleichungssystems zu eliminieren, so weiß man, dass sich zwei unabhängige Lösungen dieses Gleichungssystems nicht beeinflussen. Beispiele sind Schallwellen und elektromagnetische Wellen. Die Linearität dieser Systeme macht die unabhängige Überlagerung verschiedener Geräusche oder Signale möglich.

6.2.1 Beispiel: Schallwellen

Schallwellen sind Kompressionswellen, jedoch lassen sich dabei aufgrund der Adiabatische Drücke und Dichten eindeutig aufeinander abbilden. Es wird eine sich in x-Richtung ausbreitende Welle betrachtet. Der Störungsansatz für Geschwindigkeit und Dichte lautet

$$u = U + u', \quad (6.33)$$

$$\varrho = \varrho_0 + \varrho'. \quad (6.34)$$

Das Gleichungssystem lautet mit den abkürzenden Ersetzungen

$$\varrho' \rightarrow \varrho, \quad (6.35)$$

$$u' \rightarrow u \quad (6.36)$$

und den im vorigen Abschnitt hergeleiteten Näherungen somit

$$\frac{\partial u}{\partial t} + U \frac{\partial u}{\partial x} = - \frac{1}{\varrho_0} \frac{\partial p}{\partial x} \quad (6.37)$$

$$\frac{\partial \varrho}{\partial t} + U \frac{\partial \varrho}{\partial x} = - \varrho_0 \frac{\partial u}{\partial x} \quad (6.38)$$

$$\varrho(p) = \varrho_0 \left(\frac{p}{p_0} \right)^{c_v/c_p} \quad (6.39)$$

Bei der ersten Gleichung handelt es sich um die Impulsgleichung, die zweite ist die Kontinuitätsgleichung und die dritte ist die Gleichung für die potentielle Dichte Glg. (3.181). Um in Glg. (6.38) die Dichteänderung durch den Druck auszudrücken, benutzt man die Kettenregel:

$$\frac{\partial \varrho}{\partial t} = \frac{\partial \varrho}{\partial p} \frac{\partial p}{\partial t} = \frac{\varrho_0 c_v}{p_0 c_p} \left(\frac{p}{p_0} \right)^{c_v/c_p - 1} \frac{\partial p}{\partial t} = \frac{\varrho_0 c_v}{p_0 c_p} \frac{\partial p}{\partial t}, \quad (6.40)$$

analog für $\frac{\partial}{\partial x}$. Die Ableitung der Dichte nach dem Druck wurde dabei an der Stelle $p = p_0$ ausgewertet, weil die Druckschwankungen sehr klein sind. Nun macht man einen Ansatz

$$u = u_0 \exp[i(kx - \omega t)], \quad (6.41)$$

$$p = P \exp[i(kx - \omega t)] \quad (6.42)$$

mit eventuell komplexen Amplituden u_0, P . Setzt man dies in das Gleichungssystem ein, folgt

$$-i\omega u_0 + Uik u_0 = -\frac{1}{\rho_0} ikP, \quad (6.43)$$

$$\begin{aligned} -\frac{\rho_0 c_v}{p_0 c_p} i\omega P + Uik \frac{\rho_0 c_v}{p_0 c_p} P &= -\rho_0 iku_0 \\ \Leftrightarrow -i\omega P + Uik P &= -\frac{p_0 c_p}{c_v} iku_0. \end{aligned} \quad (6.44)$$

Als Matrixgleichung wird dies zu

$$\begin{pmatrix} -i\omega + Uik & \frac{1}{\rho_0} ik \\ ik \frac{p_0 c_p}{c_v} & -i\omega + Uik \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_0 \\ P \end{pmatrix} = 0. \quad (6.45)$$

Nichttriviale Lösungen existieren für

$$(\omega - Uik)^2 - k^2 \frac{p_0 c_p}{\rho_0 c_v} = 0 \Leftrightarrow \omega = Uik \pm k \sqrt{\frac{p_0 c_p}{\rho_0 c_v}}. \quad (6.46)$$

Für die Phasengeschwindigkeit c folgt also

$$c = U \pm \sqrt{R_d T_x}. \quad (6.47)$$

Hierbei wurde die Zustandsgleichung eingesetzt, T ist die Gleichgewichtstemperatur und $x = c_p/c_v > 1$ der Adiabatenexponent. Der Wert von c ist jedoch auch von der Feuchte abhängig. Man könnte also über eine Messung der Schallgeschwindigkeit durch Kombination mit einer Temperaturmessung die Feuchte bestimmen. Anzumerken ist, dass Schallwellen dispersionsfrei sind, die Phasengeschwindigkeit jedoch orts- und zeitabhängig ist, da sie von der Temperatur und der Feuchte abhängt.

6.3 Barotrope Wellen

Die SWEs bilden das einfachst mögliche dynamische Gleichungssystem, deshalb werden zunächst die Wellenlösungen dieses Systems untersucht.

6.3.1 Sub-Poincaré-Wellen

Man geht an dieser Stelle von der Abwesenheit eines zonalen Grundstroms $U = 0$ aus, o. B. d. A. richtet man außerdem die x-Richtung am Wellenvektor aus, sodass das linearisierte Gleichungssystem hier

$$\frac{\partial u}{\partial t} = -g \frac{\partial \eta}{\partial x}, \quad (6.48)$$

$$\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial w}{\partial z} = 0 \quad (6.49)$$

lautet. Man geht von einer homogenen Tiefe $D > 0$ aus und fordert als Randbedingung

$$w(z = -D) \stackrel{!}{=} 0. \quad (6.50)$$

Es werden nun die Ansätze

$$u = U(z) \exp(ikx - i\omega t), \quad (6.51)$$

$$w = W(z) \exp(ikx - i\omega t). \quad (6.52)$$

Die Oberflächenauslenkung η und die Vertikalgeschwindigkeit w hängen über

$$\frac{\partial \eta}{\partial t}(z = 0) \stackrel{!}{=} w(z = 0), \quad (6.53)$$

$$\Rightarrow -i\omega \hat{\eta} = W(0) \quad (6.54)$$

zusammen, wobei $\hat{\eta}$ die Amplitude der Oberflächenauslenkung ist. Glg. (6.48) ergibt somit bei $z = 0$

$$\begin{aligned} -i\omega U(0) &= g \frac{k}{\omega} W(0) \\ \Rightarrow \omega^2 &= igk \frac{W(0)}{U(0)}. \end{aligned} \quad (6.55)$$

Aus Glg. (6.49) folgt

$$ikU(z) + W' = 0 \Rightarrow W' = -ikU. \quad (6.56)$$

Dies und die Glg.en (6.50) und (6.54) ist durch

$$U(z) = \frac{\hat{\eta}\omega}{\sinh(kD)} \cosh[k(D+z)], \quad (6.57)$$

$$W(z) = -\frac{i\hat{\eta}\omega}{\sinh(kD)} \sinh[k(D+z)]. \quad (6.58)$$

erfüllt. Somit folgt aus Glg. (6.55) die Disperionsrelation

$$\omega^2 = gk \tanh(kD). \quad (6.59)$$

Im Falle einer Dichtediskontinuität $\rho_1 < \rho_2$ mit einem leichteren Fluid über einem schwereren Fluid lautet der Druckgradientterm unterhalb der Welle

$$\frac{1}{\rho_2} \frac{\partial p}{\partial x} = \frac{1}{\rho_2} \frac{\partial (g\rho_2 \eta - g\rho_1 \eta)}{\partial x} = g \frac{\Delta \rho}{\rho_2} \frac{\partial \eta}{\partial x} \quad (6.60)$$

mit $\Delta \rho := \rho_2 - \rho_1$, wobei η als Auslenkung der Dichtediskontinuität zu verstehen ist. Der Rest der Herleitung überträgt sich, wobei die Ersetzung $g \rightarrow g' := g \frac{\Delta \rho}{\rho_2}$ vorzunehmen ist. Für die Dispersionsrelation erhält man

$$\omega^2 = g' k \tanh(k(z_w - z_0)). \quad (6.61)$$

wobei z_w die Position der Dichtediskontinuität und z_0 die Tiefenkoordinate des Grunds bezeichnet. Im Fall $\lambda \gg D$ folgt hieraus

$$\omega^2 = k^2 g D \quad (6.62)$$

als Dispersionsrelation der sogenannten *Flachwasserwellen*. Im umgekehrten Fall $\lambda \ll D$ folgt die Dispersionsrelation der *Tiefwasserwellen*

$$\omega^2 = gk. \quad (6.63)$$

6.3.1.1 Stokes-Drift

Definiere

$$\gamma := \frac{\hat{\eta}\omega}{\sinh(kD)}, \quad (6.64)$$

dann lässt sich Glg. (6.57) als

$$U(z) = \gamma \cosh[k(D+z)] \quad (6.65)$$

notieren. Integriert man dies von $z = -D$ bis $z = \eta$, folgt

$$\int_{-D}^{\eta} \gamma \cosh[k(D+z)] dz = \frac{\gamma}{k} \sinh(k(D+\eta)) \stackrel{\text{Glg. (A.63)}}{=} \frac{\gamma}{k} [\sinh(kD) \cosh(k\eta) + \cosh(kD) \sinh(k\eta)]. \quad (6.66)$$

Entwickelt man dies in erster Ordnung in $k\eta$ (Steilheit $\ll 1$), folgt

$$\int_D^\eta \gamma \cosh [k(D+z)] dz \approx \frac{\gamma}{k} [\sinh(kD) + \cosh(kD) k\eta]. \quad (6.67)$$

Multipliziert man dies mit dem Realteil von $\exp(ikx - i\omega t)$, erhält man den Ausdruck

$$\frac{d\dot{V}}{dy} = \frac{\gamma}{k} [\sinh(kD) + \cosh(kD) k\eta] \cos(kx - \omega t) \quad (6.68)$$

für die vertial integrierte Volumenflussdichte. Setzt man den Realteil der Oberflächenauslenkung $\eta = \hat{\eta} e^{ikx - i\omega t}$ ein, erhält man

$$\frac{d\dot{V}}{dy} = \frac{\gamma}{k} [\sinh(kD) + \cosh(kD) k\hat{\eta}] \cos(kx - \omega t). \quad (6.69)$$

Integriert man dies über eine Periode folgt

$$\frac{d\dot{V}}{dy} = \frac{\gamma}{k} \cosh(kD) k\hat{\eta} \frac{1}{2} = \frac{\hat{\eta}^2 \omega}{2 \tanh(kD)} = \frac{\hat{\eta}^2}{2} \sqrt{\frac{gk}{\tanh(kD)}}. \quad (6.70)$$

Diesen Volumenstrom in Richtung des Wellenvektors bezeichnet man als *Stokes-Drift*. Wegen

$$\bar{u}(z) = 0 \quad (6.71)$$

für $z < -\hat{\eta}$ entsteht dieser Volumenstrom ausschließlich im Bereich der Oberflächenwelle selbst durch das Wachsen der Amplitude der Horizontalgeschwindigkeit mit der Höhe.

6.3.2 Poincaré-Wellen

Die SWEs lauten linearisiert

$$\frac{\partial u}{\partial t} = fv - g \frac{\partial \eta}{\partial x}, \quad (6.72)$$

$$\frac{\partial v}{\partial t} = -fu - g \frac{\partial \eta}{\partial y}, \quad (6.73)$$

$$\frac{\partial \eta}{\partial t} = -H \left(\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} \right). \quad (6.74)$$

Hierbei wird von der f-Ebenen-Approximation ausgegangen. Man macht einen Ansatz

$$u = u_0 \exp[i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t)], \quad (6.75)$$

$$v = v_0 \exp[i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t)], \quad (6.76)$$

$$\eta = \hat{\eta} \exp[i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t)]. \quad (6.77)$$

mit einem horizontalen Wellenvektor $\mathbf{k} = (k_x, k_y)^T$ sowie eventuell komplexen Amplituden u_0, v_0, η_0 . Setzt man dies ein, erhält man

$$-i\omega u_0 = fv_0 - gik_x \hat{\eta}, \quad (6.78)$$

$$-i\omega v_0 = -fu_0 - gik_y \hat{\eta}, \quad (6.79)$$

$$-i\omega \hat{\eta} = -Hik_x u_0 - Hik_y v_0. \quad (6.80)$$

In Matrixschreibweise lautet dies

$$\begin{pmatrix} -i\omega & -f & gik_x \\ f & -i\omega & gik_y \\ Hik_x & Hik_y & -i\omega \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_0 \\ v_0 \\ \hat{\eta} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (6.81)$$

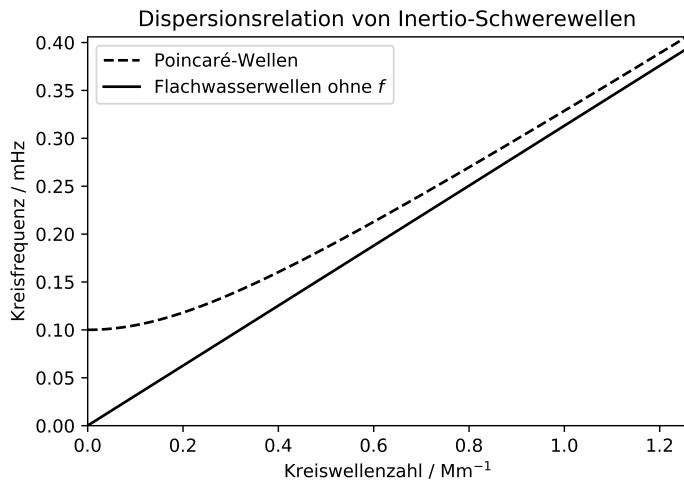


Abbildung 6.1: Die Dispersionsrelation von Poincaré-Wellen im Vergleich zur Dispersion von Flachwasserwellen ohne Coriolis-Beschleunigung. Es wurde mit $f = 10^{-4}$ 1/s und $H = 10$ km gerechnet.

Hier existieren nichttriviale Lösungen, wenn gilt:

$$\begin{aligned} & (-i\omega) \left[(-i\omega)^2 + Hgk_y^2 \right] - f[-f(-i\omega) + Hgk_x k_y] + Hik_x [-fgik_y - (-i\omega) gik_x] = 0 \\ \Leftrightarrow & -\omega \left[-\omega^2 + Hgk_y^2 \right] + f[-f\omega + iHgk_x k_y] + Hk_x [-fgik_y - \omega gk_x] = 0 \end{aligned} \quad (6.82)$$

Also lautet die Dispersionsrelation der Poincaré-Wellen

$$\omega^2 = f^2 + Hgk^2. \quad (6.83)$$

Es ist $\omega^2 \geq f^2$, der Betrag des Coriolis-Parameters ist eine untere Schranke der Kreisfrequenz. Für die Phasengeschwindigkeit gilt

$$c^2 = \frac{\omega^2}{k^2} = gH + \frac{f^2}{k^2} = gH + f^2 L^2 \frac{1}{4\pi^2} \quad (6.84)$$

mit L als Wellenlänge. Die Poincaré-Wellen haben also eine höhere Phasengeschwindigkeit als die Schwerewellen ohne Erdrotation. Desto kürzer die Wellen werden, desto geringer wird der Einfluss der Coriolis-Kraft, für lange Wellen jedoch geht ω gegen f . Der Ausdruck für c^2 der Poincaré-Wellen ist gegenüber dem der Schwerewellen ohne Coriolis-Kraft um den Ausdruck $f^2 L^2 \frac{1}{4\pi^2}$ höher. Um eine Grenzwellenlänge R_o zu bestimmen, ab der die Wirkung der Coriolis-Kraft deutlich wird, setzt man

$$f_o R_o^2 \frac{1}{4\pi^2} = \frac{gH}{4\pi^2} \approx 0,025 gH. \quad (6.85)$$

Daraus erhält man für den barotropen Rossby-Radius

$$R_o = \frac{\sqrt{gH}}{|f|}. \quad (6.86)$$

Setzt man typische Werte ein, folgt $R_o \approx 2000$ km.

6.3.3 Kapillarwellen

Man stelle sich eine Grenzfläche A vor, die mit dem \mathbb{R}^2 zusammenfällt. Dehnt man diese um einen Faktor $d\varepsilon$ in x -Richtung aus, kann man dies als Ausführung der Abbildung

$$(x, y)^T \mapsto (x(1 + d\varepsilon), y)^T \quad (6.87)$$

interpretieren. Dabei nimmt die Energie des Systems um

$$dU = A\sigma d\varepsilon \quad (6.88)$$

zu, hierbei ist die Proportionalitätskonstante σ die *mechanische Oberflächenspannung*. Es gilt

$$\sigma = \frac{1}{A} \frac{dU}{d\varepsilon}. \quad (6.89)$$

Man stellt sich nun eine Zylinderscheibe mit einem Radius r und einem Öffnungswinkel φ vor, die auf dem \mathbb{R}^2 liegt:

$$Z := \left\{ (x, y, z)^T \in \mathbb{R}^3 \mid |x| \leq r \sin(\varphi) \wedge 0 \leq z \leq \sqrt{r^2 - x^2} - r(1 - \cos(\varphi)) \right\} \quad (6.90)$$

Auf ein Flächenelement $dA = r \sin(\varphi) dy$ wirkt in z-Richtung die Kraft

$$F_z = -2dy\sigma \sin(\varphi). \quad (6.91)$$

Das Vorzeichen von r ist in diesem Fall negativ, der sich durch F_z aufbauende *Kapillardruck* p_r ist positiv. Somit gilt

$$p_r = -\frac{\sigma}{r}. \quad (6.92)$$

Mit Glg. (A.218) folgt im Fall einer Oberflächenauslenkung η

$$p_k \approx -\sigma \frac{\partial^2 \eta}{\partial x^2}. \quad (6.93)$$

Im Fall $\eta = \hat{\eta} \exp(ikx - i\omega t)$ folgt

$$-\frac{1}{\rho} \frac{\partial p_k}{\partial x} = -\frac{k^2 \sigma}{\rho} \frac{\partial \eta}{\partial x}. \quad (6.94)$$

Addiert man dies zur rechten Seite von Glg. (6.48), erhält man

$$-g \frac{\partial \eta}{\partial x} \rightarrow -g \frac{\partial \eta}{\partial x} - \frac{\sigma k^2}{\rho} \frac{\partial \eta}{\partial x} = -g \left(1 + \frac{k^2 \sigma}{\rho g} \right) \frac{\partial \eta}{\partial x}, \quad (6.95)$$

Man muss also

$$g \rightarrow g \left(1 + \frac{k^2 \sigma}{\rho g} \right) \quad (6.96)$$

ersetzen, der Rest der Herleitung überträgt sich. Man erhält also die Dispersionsrelation der Kapillarwellen

$$\omega^2 = kg \left(1 + \frac{k^2 \sigma}{\rho g} \right) \tanh(kD). \quad (6.97)$$

Im Fall sehr kurzer Wellen erhält man den Grenzfall

$$\omega^2 = \frac{k^3 \sigma}{\rho} \Rightarrow c = \sqrt{\frac{2\pi\sigma}{\rho\lambda}}. \quad (6.98)$$

In diesem Grenzfall sind Kapillarwellen also anormal dispergiert.

Um eine Grenzwellenlänge λ_K herzuleiten, ab der kapillare Effekte wichtig werden, rechnet man

$$\frac{k_K^2 \sigma}{\rho g} \stackrel{!}{=} \frac{1}{10} \Leftrightarrow \lambda_K \leq \sqrt{\frac{40\pi^2 \sigma}{\rho g}}. \quad (6.99)$$

Die Oberflächensapnnung von Wasser beträgt ca. $\sigma \sim 75$ mN/m, woraus folgt

$$\lambda_K \sim 5,5 \text{ cm}. \quad (6.100)$$

6.3.4 Inertialwellen

Bei Inertialwellen geht man von einem verschwindenden horizontalen Druckgradienten aus, sodass nur die Coriolis-Kraft übrigbleibt. Die Impulsgleichungen der SWEs Glg. (3.129) werden unter Vernachlässigung der advektiven Terme zu

$$\frac{du}{dt} = f_0 v, \quad (6.101)$$

$$\frac{dv}{dt} = -f_0 u. \quad (6.102)$$

Für den Coriolis-Parameter wird dabei ein ortsunabhängiger Wert f_0 verwendet, um den β -Effekt zu umgehen. Man macht einen Ansatz

$$u = U \exp(-i\omega t), \quad (6.103)$$

$$v = V \exp(-i\omega t) \quad (6.104)$$

mit eventuell komplexen Amplituden U, V . Setzt man dies in das Gleichungssystem ein, erhält man

$$-i\omega U = f_0 V, \quad (6.105)$$

$$-i\omega V = -f_0 U. \quad (6.106)$$

Als Matrixgleichung wird dies zu

$$\begin{pmatrix} -i\omega & -f_0 \\ f_0 & -i\omega \end{pmatrix} \begin{pmatrix} U \\ V \end{pmatrix} = 0. \quad (6.107)$$

Nichttriviale Lösungen existieren für

$$-\omega^2 + f_0^2 = 0, \quad (6.108)$$

also für

$$\omega = \pm f. \quad (6.109)$$

Die Teilchen bewegen sich also auf einer Kreisbahn mit Radius

$$R_I = \frac{V}{f_0}. \quad (6.110)$$

Setzt man eine Geschwindigkeit von $1 \frac{\text{m}}{\text{s}}$ ein, so folgt beispielsweise $R_I = 10 \text{ km}$ mit $f_0 = 10^{-4} \text{ s}^{-1}$. Für die Periode gilt

$$T = \frac{2\pi}{f_0} \approx \frac{\pi d}{2\sin(\varphi)}, \quad (6.111)$$

$d = 24 \text{ h}$ ist die Dauer eines Tages. Typische Inertialperioden liegen also im Größenordnungsbereich von einem Tag.

Da die totalen Ableitungen $\frac{D}{Dt}$ verwendet wurden, wurde implizit eine Trajektorie ausgerechnet. Diese Trajektorie ist eine Kreisbahn, jedoch nur unter Annahme eines ortsunabhängigen Coriolis-Parameters. Im Allgemeinen sind die Teilchentrajektorien jedoch aufgrund des β -Effektes keine geschlossenen Kreisbahnen. Ebenso wurde kein Windfeld $V(r, t)$ bestimmt.

6.3.5 Kelvin-Wellen

Man geht wieder aus vom Gleichungssystem der Glg.en (6.72) - (6.74), diesmal stellt man sich jedoch die Halbebene $x < 0$ als Küste vor, sodass nur die verbleibende Halbebene $x \geq 0$ vom Fluid beströmt werden kann. Die Randbedingung lautet also

$$u(x=0) = 0. \quad (6.112)$$

Gesucht wird nun nach Lösungen, die dies global erfüllen. Hierzu geht man wieder von der f-Ebene aus. Das Gleichungssystem reduziert sich auf

$$\textcircled{o} = -g \frac{\partial \eta}{\partial x} + fv, \quad (6.113)$$

$$\frac{\partial v}{\partial t} = -g \frac{\partial \eta}{\partial y}, \quad (6.114)$$

$$\frac{\partial \eta}{\partial t} + H \frac{\partial v}{\partial y} = \textcircled{o}. \quad (6.115)$$

Aus Glg. (6.113) folgt, dass v geostrophisch balanciert ist, sodass man v aus den verbleibenden beiden Gleichungen eliminieren kann:

$$\frac{\partial^2 \eta}{\partial t \partial x} = -f \frac{\partial \eta}{\partial y}, \quad (6.116)$$

$$\frac{\partial \eta}{\partial t} + H \frac{g}{f} \frac{\partial^2 \eta}{\partial x \partial y} = \textcircled{o}. \quad (6.117)$$

Hier macht man den harmonischen Wellenansatz

$$\eta = \eta_{\textcircled{o}} \exp [i(k_x x + k_y y - \omega t)], \quad (6.118)$$

woraus folgt

$$-i\omega k_x = -f k_y \Rightarrow \omega k_x = -i f k_y, \quad (6.119)$$

$$-i\omega + H \frac{g}{f} i k_x i k_y = \textcircled{o} \Rightarrow i\omega = -H \frac{g}{f} k_x k_y. \quad (6.120)$$

Aus Glg. (6.119) folgt

$$k_x = -\frac{i}{\omega} f k_y, \quad (6.121)$$

was in Glg. (6.120) eingesetzt

$$i\omega = -H \frac{g}{f} k_y \left(-\frac{i}{\omega} f k_y \right) = iH \frac{g}{\omega} k_y^2 \quad (6.122)$$

ergibt. Definiert man \varkappa durch

$$\varkappa := \frac{\omega}{\sqrt{gH}} > \textcircled{o} \quad (6.123)$$

mit einer als positiv angenommenen Kreisfrequenz $\omega > \textcircled{o}$, folgt

$$k_y = \pm \varkappa. \quad (6.124)$$

Dies ergibt umgeformt

$$\omega = \pm k_y \sqrt{gH}. \quad (6.125)$$

Mit Glg. (6.119) folgt

$$k_x = \mp i f \frac{\varkappa}{\sqrt{gH}}. \quad (6.126)$$

η darf als Funktion des Abstands von der Küste nicht exponentiell ansteigen, daher gilt bei $f > \textcircled{o}$ das negative Vorzeichen in Glg. (6.124), bei $f < \textcircled{o}$ das positive. Auf der Nordhalbkugel hat die Kelvin-Welle die Küste also rechts von der Ausbreitungsrichtung, auf der Südhalbkugel links.

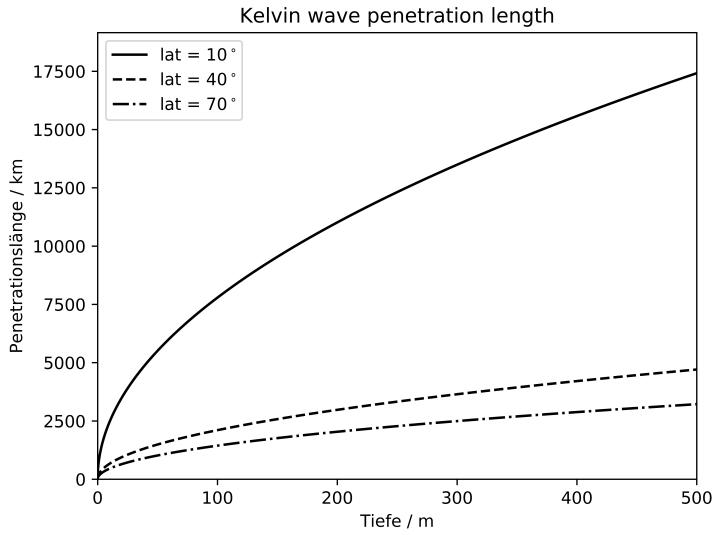


Abbildung 6.2: Penetrationslängen der Kelvin-Wellen.

Die Penetrationslängen l der Kelvin-Wellen ergeben sich zu

$$l = l(f, H) = \frac{2\pi\sqrt{gH}}{|f|} = 2\pi R_o \quad (6.127)$$

mit dem in Glg. (6.86) definierten Rossby-Radius R_o .

Abb. 6.2 zeigt die typischen Penetrationslängen von Kelvin-Wellen, diese liegen schnell im Bereich von 1000 - 10000 km, also durchaus im Bereich von zehn bis mehreren hundert Prozent eines Viertels des Erdumfangs. Diese Ausdehnung übersteigt die Gültigkeit der f-Ebene bei weitem.

6.3.6 Äquatoriale Kelvin-Wellen

Am Äquator kann man nicht $f = f_o$ setzen, man setzt stattdessen die β -Ebene

$$f = \beta y \quad (6.128)$$

mit

$$\beta := \left. \frac{\partial f}{\partial y} \right|_{\varphi=0} \quad (6.129)$$

an. Damit lauten die Glg.en (6.72) - (6.74)

$$\frac{\partial u}{\partial t} = -g \frac{\partial \eta}{\partial x} + \beta y v, \quad (6.130)$$

$$\frac{\partial v}{\partial t} = -g \frac{\partial \eta}{\partial y} - \beta y u, \quad (6.131)$$

$$\frac{\partial \eta}{\partial t} + H \left(\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} \right) = 0. \quad (6.132)$$

Nun sucht man nach Lösungen mit $v = 0$. In diesem Fall gilt

$$\frac{\partial u}{\partial t} = -g \frac{\partial \eta}{\partial x}, \quad (6.133)$$

$$0 = -g \frac{\partial \eta}{\partial y} - \beta y u, \quad (6.134)$$

$$\frac{\partial \eta}{\partial t} + H \frac{\partial u}{\partial x} = 0. \quad (6.135)$$

Über

$$u = -\frac{g}{\beta y} \frac{\partial \eta}{\partial y} \quad (6.136)$$

lässt sich u eliminieren:

$$-\frac{g}{\beta y} \frac{\partial^2 \eta}{\partial t \partial y} = -g \frac{\partial \eta}{\partial x} \quad (6.137)$$

$$\frac{\partial \eta}{\partial t} - \frac{gH}{\beta y} \frac{\partial^2 \eta}{\partial x \partial y} = 0 \quad (6.138)$$

Der Ansatz

$$\eta = \hat{\eta} \exp [i(k_x x + k_y y - \omega t)] \quad (6.139)$$

führt auf

$$-\frac{g}{\beta y} k_y \omega = -g i k_x \Rightarrow k_y = \frac{i}{\omega} \beta y i k_x, \quad (6.140)$$

$$-i\omega + \frac{gH}{\beta y} k_x k_y = 0 \Rightarrow \omega^2 = gH k_x^2. \quad (6.141)$$

Es gilt also

$$k_x = \pm \frac{\omega}{\sqrt{gH}}. \quad (6.142)$$

Für k_y folgt

$$k_y = \frac{i}{\omega} \beta y i k_x = \pm i \frac{\beta y}{\sqrt{gH}}. \quad (6.143)$$

Nur das Pluszeichen kommt in Frage. Die Lösung lautet also

$$\eta = \hat{\eta} \exp \left[i \left(k_x x + i \frac{\beta y^2}{\sqrt{gH}} - \sqrt{gH} k_x t \right) \right]. \quad (6.144)$$

Um die meridionale Ausdehnung y_0 dieser Wellen abzuschätzen, setzt man

$$i = \frac{2\omega y_0^2}{\sqrt{gH}} \quad (6.145)$$

an. Hieraus folgt

$$y_0 = \sqrt{R \frac{\sqrt{gH}}{2\omega}} = 2071 \text{ km} \quad (6.146)$$

mit R als Äquatorradius und $H = 1 \text{ km}$.

Wellenzahl l	Periodendauer / hr
1	14, 8
2	11, 8
3	9, 5
4	7, 8
5	6, 6

Table 6.1: Periodendauern der globalen Moden für $D = 8$ km und $f = 10^{-4}$ s⁻¹.

6.3.7 Globale Moden

Nimmt man eine f-Kugel an, also eine Kugel mit homogenem Coriolis-Parameter f (dies ist ein rein mathematisches Konzept), haben die linearisierten SWEs Glg.en (3.131) - (3.132) globale analytische Lösungen. Zunächst rechnet man

$$\frac{\partial^2 d}{\partial t^2} = -D \nabla \cdot \frac{\partial V}{\partial t}. \quad (6.147)$$

Bildet man die Divergenz von Glg. (3.131), folgt mit Glg. (A.232)

$$\begin{aligned} \nabla \cdot \frac{\partial V}{\partial t} &= f\zeta - g\Delta d \Rightarrow \frac{\partial^2 d}{\partial t^2} = -D(f\zeta - g\Delta d) \\ \Rightarrow \frac{\partial^3 d}{\partial t^3} &= -D \left[f \frac{\partial \zeta}{\partial t} - g\Delta \frac{\partial d}{\partial t} \right]. \end{aligned} \quad (6.148)$$

Mit Glg. (5.61) folgt näherungsweise

$$\frac{\partial \zeta}{\partial t} = \frac{f}{D} \frac{\partial d}{\partial t} \Rightarrow \frac{\partial^3 d}{\partial t^3} = -f^2 \frac{\partial d}{\partial t} + Dg\Delta \frac{\partial d}{\partial t}. \quad (6.149)$$

Man macht den Ansatz

$$d = Y_{l,m} e^{-i\omega t} \quad (6.150)$$

mit einer Kugelflächenfunktion $Y_{l,m}$. Somit folgt

$$\begin{aligned} i\omega^3 d &= f^2 i\omega d + i\omega \frac{gD}{a^2} l(l+1) d \\ \Rightarrow \omega \left(\omega^2 - f^2 - l(l+1) \frac{gD}{a^2} \right) &= 0. \end{aligned} \quad (6.151)$$

Für die Kreisfrequenzen gilt $\omega_0 = 0$ und

$$\omega_l = \pm \sqrt{f^2 + l(l+1) \frac{gD}{a^2}} \quad (6.152)$$

bzw. für die Periodendauern $T_0 = \infty$ und

$$T_l = \frac{2\pi}{\sqrt{f^2 + l(l+1) \frac{gD}{a^2}}}. \quad (6.153)$$

Tab. 6.1 gibt eine Vorstellung von den Periodendauern.

6.3.8 Rossby-Wellen

Im vorigen Abschnitt 6.3.2 wurde von $\beta = 0$ ausgegangen. In diesem Fall sind die dort hergeleiteten Poincaré-Wellen die allgemeinsten Wellenlösungen. Eine neue Art der Wellen entsteht, wenn man die Breitenabhängigkeit von f berücksichtigt.

Man geht aus von einem homogenen zonalen Grundstrom U . Man nimmt $u_0 = 0$ an, außerdem geht man von

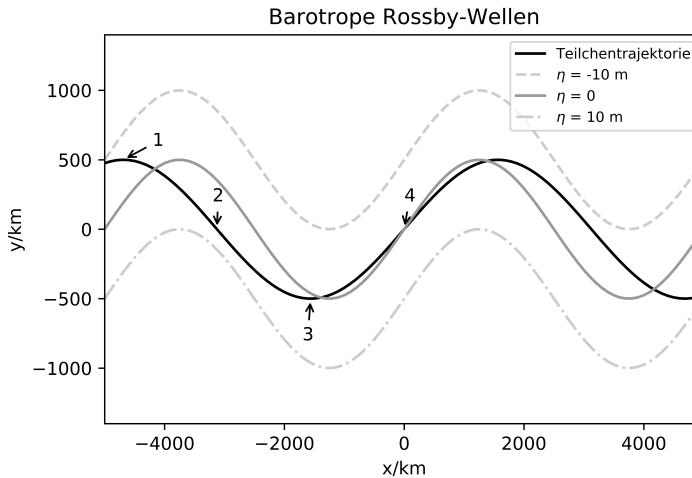


Abbildung 6.3: Veranschaulichung des Prinzips der Erhaltung der absoluten Vorticity. 1: f maximal, ζ minimal, 2: $f = f_0$, $\zeta = 0$, 3: f minimal, ζ maximal, 4: $f = f_0$, $\zeta = 0$. Man beachte auch, dass die Wellenlänge der Teilchentrajektorie größer ist, als die der Welle.

$k_y = 0$ aus, die Störungen sollen nur x -abhängig sein. Man weiß schon jetzt:

- Da U homogen ist und $u_0 = 0$, $v = v(x, t)$ gelten, sind die Lösungen divergenzfrei.

Daher kann man die barotrope Vorticitygleichung verwenden. Macht man den Ansatz

$$v = v_0 \exp [i(kx - \omega t)] \quad (6.154)$$

dann gelten

$$\zeta = ikv, \quad (6.155)$$

$$\frac{\partial \zeta}{\partial t} = k\omega v, \quad (6.156)$$

$$\frac{\partial \zeta}{\partial x} = -k^2 v. \quad (6.157)$$

Setzt man dies in die barotrope Vorticitygleichung ein, erhält man

$$k\omega v_0 = U k^2 v_0 - v_0 \beta \Leftrightarrow \omega = U k - \frac{\beta}{k}. \quad (6.158)$$

Glg. (6.158) ist die Dispersionsrelation der Rossby-Wellen. Für ihre Phasengeschwindigkeit gilt

$$c = U - \frac{\beta}{k^2}. \quad (6.159)$$

Im hypothetischen Fall $U \rightarrow 0$, $L = 2\pi a$ und $\varphi = 0$ gilt

$$|c| = 2\omega \frac{1}{a} \frac{4\pi^2 a^2}{4\pi^2} = 2\omega a = 930 \frac{\text{m}}{\text{s}}. \quad (6.160)$$

Dies ist eine betragsmäßige Beschränkung von c . Keine Welle kann sich schneller fortpflanzen als mit der Geschwindigkeit $2\omega a$, und schneller kann das System der herrschenden Gleichungen keine Information übertragen.

6.3.8.1 Anschauliches Verständnis

Die y -Komponente der Impulsgleichung im Flachwassermodell lautet

$$\frac{Dv}{Dt} = -fu - g \frac{\partial \eta}{\partial y}. \quad (6.161)$$

Mache für f eine lineare Taylor-Entwicklung

$$f = f_0 + \beta y. \quad (6.162)$$

Ein homogener zonaler Grundstrom U kann geostrophisch balanciert werden durch eine Oberflächenauslenkung

$$\omega = -f_0 U - g \frac{\partial \eta}{\partial y}. \quad (6.163)$$

In diesem Fall wird Glg. (6.161) zu

$$\frac{D^2 y}{Dt^2} = -\beta U y. \quad (6.164)$$

Dies entspricht einem harmonischen Oszillator mit der Eigenfrequenz

$$\omega_{\text{ind}} = \sqrt{\beta U}. \quad (6.165)$$

Daher muss $U > \omega$ westlich sein. Die Eigenfrequenz wurde mit einem Index ind gekennzeichnet, da es sich um die individuelle Schwingungsfrequenz der Teilchen und nicht um die Frequenz ω der Welle handelt.

Eine weitere anschauliche Erklärung ergibt sich aus der barotropen Vorticitygleichung, diese lautet

$$f + \zeta = \text{const.} \quad (6.166)$$

Wird ein Teilchen von seiner Ruhelage auf der Nordhalbkugel bei vorhandenem westlichen Grundstrom nach Norden ausgelenkt, so nimmt f zu. Daher muss ζ abnehmen und das Teilchen erhält antizyklonale relative Vorticity. Anschließend schwingt es über seine Ruhelage hinaus nach Süden, wobei f abnimmt. Daher erhält das Teilchen zyklonale relative Vorticity und schwenkt wieder nach Norden. Der Mechanismus der barotropen Rossby-Wellen ist also die Erhaltung der absoluten Vorticity, s. auch Abb. 6.3.

Barotrope Rossby-Wellen sind trotz der umfassenden Vereinfachungen (Barotropie und Divergenzfreiheit) in der Atmosphäre und im Ozean relevant. In der Atmosphäre sind sie aufgrund ihrer Divergenzfreiheit am ehesten auf die mittlere Troposphäre anwendbar, sie liefern eine einfache Betrachtung des meandernden Polarjets. Hierbei wird häufig der Begriff der Wellenzahl verwendet, eine Welle der Wellenzahl n hat eine zonale räumliche Periode von $\frac{2\pi}{n}$ als Winkel. Rossby-Wellen breiten sich im Ozean aufgrund des geringen östlichen (nach Osten gerichteten) Grundstroms immer nach Westen aus (es ist $\beta \geq \omega$ auf der gesamten Erde).

6.4 Barokline Wellen

6.4.1 Schichtungswellen

Diese Wellen entstehen im kontinuierlichen, hydrostatischen, thermisch stabilen Medium bei vertikaler Auslenkung eines Teilchens. Von einer kontinuierlichen Schichtung spricht man, falls die Dichte eine kontinuierliche (stetig-differenzierbare) Funktion der Vertikalkoordinate ist: $\rho = \rho(z)$. Ein Teilchen der Dichte $\rho_0 = \rho(z_0)$ habe seine Ruhelage in der Höhe z_0 , die hier o. B. d. A. zu $z_0 = \omega$ festgelegt sei. Lenkt man das Teilchen vertikal aus, lautet die Bewegungsgleichung

$$\frac{d^2 z}{dt^2} = -\frac{1}{\rho_0} \frac{\partial p}{\partial z} - g = g \frac{\rho}{\rho_0} - g = \frac{g}{\rho_0} (\rho - \rho_0), \quad (6.167)$$

$z(t)$ sei die Auslenkung. Hierbei wurde angenommen, dass das Teilchen seine Dichte während der Auslenkung nicht ändert. Nähert man die Abweichung $\rho(z) - \rho_0$ mittels einer Taylor-Entwicklung zu

$$\rho(z) - \rho_0 = \frac{\partial \rho}{\partial z}(z = \omega) z, \quad (6.168)$$

so folgt für die Schwingungsgleichung

$$\frac{d^2 z}{dt^2}(t) = \frac{g}{\rho_0} \frac{\partial \rho}{\partial z} z(t). \quad (6.169)$$

Setzt man $z = Z_1 \exp(iNt) + Z_2 \exp(-iNt)$ an, so folgt für die Kreisfrequenz

$$N^2 = -\frac{g}{\rho} \frac{\partial \rho}{\partial z}, \quad (6.170)$$

N ist die *Brunt-Väisälä-Frequenz*, sie ist ein Maß für die Stabilität. Setzt man N in (6.169) ein, erhält man

$$\frac{d^2 z}{dt^2} = -N^2 z. \quad (6.171)$$

Hieran sieht man, dass im Fall $N^2 > 0$ eine Sinusschwingung als Lösung folgt, während im Fall $N^2 < 0$ eine reelle Exponentialfunktion die Lösung ist, da das Teilchen von seinem Ursprungsort wegbeschleunigt wird. Im Fall $N^2 > 0$ ist die Schichtung also stabil, während sie im Fall $N^2 < 0$ labil ist. Eine stabile Schichtung bezeichnet man auch als starke Schichtung. Im Fall $N^2 = 0$ ist die Schichtung neutral.

Die obige Herleitung ist noch nicht ganz vollständig, da Inkompressibilität angenommen wurde. Streng genommen bleibt bei der Auslenkung nicht die Dichte, sondern die potentielle Dichte bezogen auf das Referenzniveau erhalten. Bezeichnet $\tilde{\rho}(z)$ die Dichte des Teilchens bei einer Auslenkung z , so wird damit Gleichung (6.167) zu

$$\frac{d^2 z}{dt^2} = \frac{1}{\tilde{\rho}(z)} g \rho(z) - g = \frac{g}{\tilde{\rho}(z)} (\rho(z) - \tilde{\rho}(z)). \quad (6.172)$$

Der Ausdruck $\rho(z) - \tilde{\rho}(z)$ ist die Dichtedifferenz zwischen dem umgebenden Fluid und dem betrachteten Teilchen. Bringt man beide Systeme nun adiabatisch auf $z = 0$, so gilt nach Glg. (3.181) für ihre Dichtedifferenz

$$\Delta \rho = (\rho(z) - \tilde{\rho}(z)) \left(\frac{p_0}{p} \right)^{1/z}. \quad (6.173)$$

Hierbei sind $p := p(z)$ und $p_0 := p(0)$. In erster Ordnung ist $p = p_0$, $\Delta \rho$ ist dann die Differenz der potentiellen Dichten in Bezug aufs Referenzniveau $z = 0$. Deshalb kann man auch die potentiellen Dichten ρ_θ (bezogen auf $z = 0$) einsetzen. Man erhält in erster Ordnung

$$\frac{d^2 z}{dt^2} = \frac{g}{\tilde{\rho}(z)} (\rho_\theta(z) - \rho_\theta(0)) = \frac{g}{\tilde{\rho}(z)} \frac{\partial \rho_\theta}{\partial z} z. \quad (6.174)$$

Für die Brunt-Väisälä-Frequenz folgt

$$N^2 = -\frac{g}{\rho_\theta} \frac{\partial \rho_\theta}{\partial z}. \quad (6.175)$$

Dies ist der allgemeine Ausdruck für die Brunt-Väisälä-Frequenz in einem kompressiblen Medium. N^2 ist ein Feld, was von allen drei Koordinaten und der Zeit abhängen kann. Die potentielle Dichte muss dabei immer auf das Niveau bezogen werden, auf dem man sich befindet. In einer trockenen Atmosphäre kann man N^2 auch über die potentielle Temperatur θ ausdrücken:

$$\rho_\theta = \frac{p_0}{R_d \theta} \quad (6.176)$$

Somit folgt

$$\frac{\partial \rho_\theta}{\partial z} = -\frac{p_0}{R_d \theta^2} \frac{\partial \theta}{\partial z}. \quad (6.177)$$

Für die Brunt-Väisälä-Frequenz bedeutet dies

$$N^2 = \frac{g}{\theta} \frac{\partial \theta}{\partial z}. \quad (6.178)$$

Schichtungswellen entstehen zum Beispiel als Leewellen hinter Orographie, in diesem Fall ergeben sich sinusförmige Trajektorien $(ut, z_0 \sin(Nt))^T$. Wird dabei Sättigung erreicht, entstehen in den Wellenbergen Oszillationswolken.

6.4.2 Vertikale Moden

Hier geht man von einem ebenen Untergrund in der Tiefe $z = -D < 0$ aus und fordert die Randbedingungen

$$w(z=0) = 0, \quad (6.179)$$

$$w(z=-D) = 0. \quad (6.180)$$

Man verwendet folgendes Gleichungssystem, wobei man o. B. d. A. von einer in x-Richtung propagierenden Welle ausgeht:

$$\frac{\partial u}{\partial t} = -\frac{1}{\rho_0} \frac{\partial p'}{\partial x}, \quad (6.181)$$

$$\frac{\partial w}{\partial t} = -\frac{1}{\rho_0} \frac{\partial p'}{\partial z}, \quad (6.182)$$

$$\frac{\partial \rho'}{\partial t} = -\rho_0 \frac{\partial u}{\partial x} - \rho_0 \frac{\partial w}{\partial z}. \quad (6.183)$$

Hierbei ist

$$\rho = \rho_0 + \rho' \quad (6.184)$$

mit einer homogenen Hintergrunddichte ρ_0 und einer Fluktuation ρ' . Analog zerlegt man den Druck p , wobei gelten soll

$$\frac{\partial p_0}{\partial z} = -g\rho_0. \quad (6.185)$$

Man macht nun die Ansätze

$$u = U(z) \exp(ikx - i\omega t), \quad (6.186)$$

$$v = V(z) \exp(ikx - i\omega t), \quad (6.187)$$

$$p' = P(z) \exp(ikx - i\omega t), \quad (6.188)$$

$$\rho' = \tilde{\rho}(z) \exp(ikx - i\omega t). \quad (6.189)$$

Setzt man dies in das geltende Gleichungssystem ein, folgt

$$-i\omega U = -\frac{ikP}{\rho_0} \Rightarrow \omega U = \frac{kP}{\rho_0}, \quad (6.190)$$

$$-i\omega W = -\frac{P'}{\rho_0} \Rightarrow \omega W = -i\frac{P'}{\rho_0}, \quad (6.191)$$

$$-i\omega \tilde{\rho} = -\rho_0 ikU - \rho_0 W' \Rightarrow \omega \tilde{\rho} = \rho_0 kU - i\rho_0 W'. \quad (6.192)$$

Die dritte Gleichung ist immer erfüllbar, $\tilde{\rho}(z)$ kann entsprechend gewählt werden. Für W macht man den Ansatz

$$W(z) = \hat{W} \sin\left(n\pi \frac{z}{D}\right) \quad (6.193)$$

mit $n \geq 1$. Aus Glg. (6.191) folgt

$$P' = \rho_0 i\omega \hat{W} \sin\left(n\pi \frac{z}{D}\right). \quad (6.194)$$

Für P setzt man daher

$$P(z) = -\frac{D\rho_0 i\omega \hat{W}}{n\pi} \cos\left(n\pi \frac{z}{D}\right) \quad (6.195)$$

an. Setzt man dies in Glg. (6.191) folgt

$$U(z) = \frac{kP}{\omega\rho_0} = -\frac{ki\hat{W}D}{n\pi} \cos\left(n\pi \frac{z}{D}\right). \quad (6.196)$$

Es gilt also

$$\begin{aligned} u(x, z, t) &= \frac{Dk\hat{W}}{n\pi} \cos\left(n\pi\frac{z}{D}\right) \exp\left[i\left(kx - \omega t - \frac{\pi}{2}\right)\right] \\ \Rightarrow \Re(u(x, z, t)) &= \frac{Dk^2\hat{W}}{n\pi} \cos\left(n\pi\frac{z}{D}\right) \sin(kx - \omega t). \end{aligned} \quad (6.197)$$

Die Horizontaldivergenz δ an der Oberfläche ergibt sich zu

$$\delta(z = 0) = \frac{\partial \Re(u(x, z, t))}{\partial x} = \frac{Dk^2\hat{W}}{n\pi} \cos\left(n\pi\frac{z}{D}\right) \cos(kx - \omega t). \quad (6.198)$$

Vertikale Moden führen also an der Oberfläche zu alternierenden Streifen von Divergenz und Konvergenz. Im Bereich der Konvergenz werden die Oberflächenwellen horizontal komprimiert, was das Wellenfeld destabilisiert, andersherum wird das Wellenfeld im Bereich der Divergenz stabilisiert, wozu auch beiträgt, dass in diesem Bereich das Wasser aus der Tiefe an die Oberfläche kommt und dieses Wasser noch keiner Windeinwirkung ausgesetzt war.

6.4.3 Barokline Rossby-Wellen

Hier geht man aus vom hydrostatischen adiabatischen Gleichungssystem.

$$\frac{D_H V}{Dt} + \omega \frac{\partial V}{\partial p} \stackrel{\text{Glg.en (3.150), (3.151)}}{=} -f \mathbf{k} \times \mathbf{V} - \nabla \varphi, \quad (6.199)$$

$$\frac{\partial \varphi}{\partial p} \stackrel{\text{Glg. (4.13)}}{=} -a, \quad (6.200)$$

$$\frac{D_H T}{Dt} - S_p \omega \stackrel{\text{Glg. (3.171)}}{=} 0, \quad (6.201)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{V} + \frac{\partial \omega}{\partial p} \stackrel{\text{Glg. (3.147)}}{=} 0, \quad (6.202)$$

$$pa \stackrel{\text{Glg. (2.796)}}{=} R_d T. \quad (6.203)$$

Nun müssen zunächst einige Vereinfachungen vorgenommen werden. Ziel ist das *quasigeostrophische Gleichungssystem*. Dieses Konzept wendet man ausschließlich auf Kanäle in den Extratropen an, die schmal genug für die β -Ebene sind. Setzt man Glg. (6.203) in Glg. (6.200) ein, folgt

$$\frac{\partial \varphi}{\partial p} = -\frac{R_d T}{p} \Rightarrow T = -\frac{p}{R_d} \frac{\partial \varphi}{\partial p}. \quad (6.204)$$

Dies setzt man nun in Glg. (6.201) ein, es folgt

$$\frac{D_H}{Dt} \left(\frac{\partial \varphi}{\partial p} \right) + \frac{R_d S_p}{p} \omega = 0. \quad (6.205)$$

Man definiert nun den *statischen Stabilitätsparameter* σ durch

$$\sigma := \frac{R_d S_p}{p} \stackrel{\text{Glg. (3.180)}}{=} -\frac{R_d T}{p} \frac{1}{\theta} \frac{\partial \theta}{\partial p} = -\frac{a}{\theta} \frac{\partial \theta}{\partial p}. \quad (6.206)$$

Dies hängt nach Glg. (6.178) über

$$\sigma = -\frac{a}{\theta} \frac{\partial z}{\partial p} \frac{\partial \theta}{\partial z} = \frac{a^2}{g\theta} \frac{\partial \theta}{\partial z} = \frac{a^2 g}{g^2 \theta} \frac{\partial \theta}{\partial z} = \left(\frac{a}{g} N\right)^2 \quad (6.207)$$

mit der Brunt-Väisälä-Frequenz N zusammen. Man nähert außerdem den Coriolis-Parameter f zu

$$f = f_0 + \beta(y - y_0) \stackrel{y_0 \equiv 0}{=} f_0 + \beta y, \quad (6.208)$$

vgl. Absch. 4.5. Dann gilt für den geostrophischen Wind Glg. (4.22)

$$\mathbf{V}_g = \mathbf{k} \times \frac{\mathbf{I}}{f} \nabla \varphi = \mathbf{k} \times \frac{\mathbf{I}}{f_o} \nabla \varphi - \mathbf{k} \times \frac{\beta y}{f_o^2} \nabla \varphi + \mathcal{O}(f'') \xrightarrow{\text{in 0. Ordnung}} \mathbf{V}_g = \mathbf{k} \times \frac{\mathbf{I}}{f_o} \nabla \varphi. \quad (6.209)$$

Hieraus kann man für den thermischen Wind ableiten

$$\frac{\partial \mathbf{V}_g}{\partial p} = -\frac{\mathbf{I}}{f_o} \mathbf{k} \times \nabla a. \quad (6.210)$$

Die relative Vorticity ζ ersetzt man nun näherungsweise durch die relative Vorticity des geostrophischen Windes ζ_g , welche nach Glg. (5.81) näherungsweise durch

$$\zeta_g = \frac{\mathbf{I}}{f_o} \Delta \varphi. \quad (6.211)$$

gegeben ist. Für die absolute Vorticity nähert man hieraus folgernd

$$\eta_g := f + \zeta_g = f_o + \beta y + \zeta_g. \quad (6.212)$$

Mit Glg. (6.209) vereinfacht man nun die materielle Ableitung zu

$$\begin{aligned} \frac{D}{Dt} &= \frac{D_H}{Dt} + \omega \frac{\partial}{\partial p} = \frac{\partial}{\partial t} + \mathbf{V} \cdot \nabla_H + \omega \frac{\partial}{\partial p} \\ &\rightarrow \frac{D^{(g)}}{Dt} := \frac{D_H^{(g)}}{Dt} + \omega \frac{\partial}{\partial p} = \frac{\partial}{\partial t} + \mathbf{V}_g \cdot \nabla_H + \omega \frac{\partial}{\partial p}. \end{aligned} \quad (6.213)$$

Hiermit folgt für den Ersten Hauptsatz

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\partial \varphi}{\partial p} \right) = -\mathbf{V}_g \cdot \nabla_H \left(\frac{\partial \varphi}{\partial p} \right) - \sigma \omega. \quad (6.214)$$

Die Vorticitygleichung Glg. (5.80) wird hier noch einmal wiederholt:

$$\frac{\partial \zeta}{\partial t} = -v\beta - (f + \zeta) \nabla \cdot \mathbf{V} - \mathbf{V} \cdot \nabla \zeta - \omega \frac{\partial \zeta}{\partial p} + \mathbf{k} \cdot \left[\frac{\partial \mathbf{V}}{\partial p} \times \nabla \omega \right] \quad (6.215)$$

Der geostrophische Wind ist nach Absch. 4.3 eine Größenordnung größer als die ageostrophische Komponente, daher kann man die horizontale Advektion mit \mathbf{V}_g berechnen und ζ durch ζ_g ersetzen:

$$\frac{\partial \zeta_g}{\partial t} = -v_g \beta - (f + \zeta_g) \nabla \cdot \mathbf{V} - \mathbf{V}_g \cdot \nabla \zeta_g - \omega \frac{\partial \zeta_g}{\partial p} + \mathbf{k} \cdot \left[\frac{\partial \mathbf{V}_g}{\partial p} \times \nabla \omega \right] \quad (6.216)$$

Die Werte in Tab. 1.3 ergeben außerdem in SI-Einheiten

- $\frac{\partial \zeta_g}{\partial t} \sim 10^{-10}$,
- $\omega \frac{\partial \zeta_g}{\partial p} \sim 10^{-11}$,
- $\mathbf{k} \cdot \left[\frac{\partial \mathbf{V}_g}{\partial p} \times \nabla \omega \right] \sim 10^{-11}$.

Folglich können auch der Drehterm und die vertikale Advektion vernachlässigt werden und außerdem die relative gegenüber der absoluten Vorticity im Drehterm, dies führt mit $f \approx f_o$ auf die sogenannte *quasigeostrophische Vorticitygleichung*

$$\frac{\partial \zeta_g}{\partial t} = -\mathbf{V}_g \cdot \nabla (\zeta_g + f) - f_o \nabla \cdot \mathbf{V} = -\mathbf{V}_g \cdot \nabla (\zeta_g + f) + f_o \frac{\partial \omega}{\partial p}. \quad (6.217)$$

An dieser Stelle führt man zur Vereinfachung eine Stromfunktion

$$\psi := \frac{\varphi}{f_o} \quad (6.218)$$

ein, damit folgen

$$\mathbf{V}_g = \mathbf{k} \times \nabla \psi, \quad (6.219)$$

$$\zeta_g = \Delta_H \psi. \quad (6.220)$$

Hieraus folgt für die Vorticitygleichung Glg. (6.217) und den Ersten Hauptsatz Glg. (2.87)

$$\Delta \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\mathbf{V}_g \cdot \nabla (\Delta \psi + f) + f_o \frac{\partial \omega}{\partial p}, \quad (6.221)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\partial \psi}{\partial p} \right) &= -\mathbf{V}_g \cdot \nabla \left(\frac{\partial \psi}{\partial p} \right) - \frac{\sigma}{f_o} \omega \\ \Rightarrow \frac{f_o^2}{\sigma} \frac{\partial^2}{\partial p^2} \left(\frac{\partial \psi}{\partial t} \right) &= -\frac{f_o^2}{\sigma} \mathbf{V}_g \cdot \nabla \left(\frac{\partial^2 \psi}{\partial p^2} \right) - f_o \frac{\partial \omega}{\partial p} \end{aligned} \quad (6.222)$$

Bei der letzten Implikation wurde die p -Abhängigkeit von σ vernachlässigt und dies wird auch weiterhin getan werden. Da σ mit der Schichtung zusammenhängt, ist dies eine schlechte Annahme, da die Schichtung natürlich in der Realität innerhalb der Troposphäre stark ortsabhängig ist. Nichtsdestotrotz kann man diese Annahme hier machen, da die relevanten Phänomene durch diese Annahme nicht gefiltert werden. Außerdem wurde

$$\frac{\partial \mathbf{V}_g}{\partial p} \cdot \nabla \left(\frac{\partial \psi}{\partial p} \right) \stackrel{\text{Glg. (6.219)}}{=} \left(\mathbf{k} \times \nabla \frac{\partial \psi}{\partial p} \right) \cdot \nabla \left(\frac{\partial \psi}{\partial p} \right) = 0 \quad (6.223)$$

eingesetzt. Nun werden die beiden Gleichungen addiert

$$\frac{\partial}{\partial t} \left[f + \Delta \psi + \frac{f_o^2}{\sigma} \frac{\partial^2 \psi}{\partial p^2} \right] + \mathbf{V}_g \cdot \nabla \left(f + \Delta \psi + \frac{f_o^2}{\sigma} \frac{\partial^2 \psi}{\partial p^2} \right) = 0. \quad (6.224)$$

Die Größe

$$q_g := f + \Delta \psi + \frac{f_o^2}{\sigma} \frac{\partial^2 \psi}{\partial p^2} \quad (6.225)$$

bezeichnet man als *quasigeostrophische potentielle Vorticity*, damit lässt sich Glg. (6.224) als

$$\frac{D_H^{(g)}}{Dt} q_g = 0 \quad (6.226)$$

notieren. Dies ist die sogenannte *Tendenzgleichung*. ω kann hieraus diagnostiziert werden, hierzu wendet man zunächst den horizontalen Laplace-Operator Δ_H auf Glg. (6.214) an:

$$\Delta \frac{\partial}{\partial p} \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\Delta_H \left[\mathbf{V}_g \cdot \nabla \left(\frac{\partial \psi}{\partial p} \right) \right] - \frac{\sigma}{f_o} \Delta \omega. \quad (6.227)$$

Nun wird Glg. (6.217) nach p differenziert:

$$\frac{\partial}{\partial p} \Delta \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial p} [\mathbf{V}_g \cdot \nabla (\Delta \psi + f)] + f_o \frac{\partial^2 \omega}{\partial p^2} \quad (6.228)$$

Nun subtrahiert man Glg. (6.227) von (6.228) und erhält

$$0 = \Delta \left[\mathbf{V}_g \cdot \nabla \left(\frac{\partial \psi}{\partial p} \right) \right] + \frac{\sigma}{f_o} \Delta \omega - \frac{\partial}{\partial p} [\mathbf{V}_g \cdot \nabla (\Delta \psi + f)] + f_o \frac{\partial^2 \omega}{\partial p^2}$$

$$\Rightarrow \left[\Delta + \frac{f_o^2}{\sigma} \frac{\partial^2}{\partial p^2} \right] \omega = \frac{f_o}{\sigma} \frac{\partial}{\partial p} [\mathbf{V}_g \cdot \nabla (\Delta \psi + f)] + \frac{f_o}{\sigma} \Delta \left[\mathbf{V}_g \cdot \nabla \left(\frac{\partial \psi}{\partial p} \right) \right]. \quad (6.229)$$

Index	Druck / hPa	definierte Funktion
0	0	$\omega_0 = 0$ (Randbedingung)
1	250	ψ_1
2	500	ω_2
3	750	ψ_3
4	1000	$\omega_4 = 0$ (Randbedingung)

Table 6.2: Übersicht über das quasigeostrophische Zweischichtmodell. Vgl. [12].

Dies ist die ω -Gleichung. Dieser Formalismus ist aufgrund der darin enthaltenen linearen Entwicklung von f nicht global anwendbar, die Leistungsfähigkeit besteht darin, dass hiermit innerhalb zonaler Kanäle beschränkter Ausdehnung in den Extratropen barokline Rossby-Wellen und barokline Instabilitäten verstanden werden können, was die theoretische Grundlage der *Frontogenese* und der *Zyklogenese* ist.

Hierfür verwendet man das *quasigeostrophische Zweischichtmodell*. Dieses berechnet zwei Stromfunktionen ψ_1, ψ_3 , umfasst insgesamt aber fünf Schichten, die in Tab. 6.2 zusammengefasst sind. Es wird mit den Randbedingungen $\omega_0 = \omega_4 = 0$ gerechnet. Für die quasigeostrophischen potentiellen Vorticities gilt

$$q_1 = f + \Delta\psi_1 + \frac{f_0^2}{\sigma} \frac{\frac{\partial\psi}{\partial p}|_z - \frac{\partial\psi}{\partial p}|_o}{\Delta p} = f + \Delta\psi_1 + \frac{f_0^2}{\sigma\Delta p^2} (\psi_3 - \psi_1) - \frac{f_0^2 \frac{\partial\psi}{\partial p}|_o}{\sigma\Delta p}, \quad (6.230)$$

$$q_3 = f + \Delta\psi_3 + \frac{f_0^2}{\sigma} \frac{\frac{\partial\psi}{\partial p}|_4 - \frac{\partial\psi}{\partial p}|_z}{\Delta p} = f + \Delta\psi_3 - \frac{f_0^2}{\sigma\Delta p^2} (\psi_3 - \psi_1) + \frac{f_0^2 \frac{\partial\psi}{\partial p}|_4}{\sigma\Delta p}. \quad (6.231)$$

Es wird dabei $\Delta p := 500$ hPa definiert. Über die letzten Terme kann im Rahmen dieses Modells keine Aussage gemacht werden, daher nimmt man sie als konstant an und vernachlässigt sie somit. Man definiert weiter eine barotrope und eine barokline Komponente der Stromfunktion:

$$\psi_M := \frac{\psi_1 + \psi_3}{2}, \quad (6.232)$$

$$\psi_T := \frac{\psi_1 - \psi_3}{2}. \quad (6.233)$$

Außerdem definiert man eine barokline potentielle Vorticity:

$$q_T := \frac{q_1 - q_3}{2} = \frac{\zeta_1 - \zeta_3}{2} - \frac{f_0^2}{\sigma\Delta p^2} (\psi_1 - \psi_3) \quad (6.234)$$

Ferner wird die *Stabilitätswellenzahl* K durch

$$K^2 := \frac{2f_0^2}{\sigma\Delta p^2} \quad (6.235)$$

definiert. Damit kann man notieren

$$q_1 = f + \zeta_1 - K^2\psi_T, \quad (6.236)$$

$$q_3 = f + \zeta_3 + K^2\psi_T, \quad (6.237)$$

$$q_T = \zeta_T - K^2\psi_T. \quad (6.238)$$

Nun macht man einen Störungsansatz

$$\psi = \bar{\psi} + \psi' = -\bar{u}y + \psi' \quad (6.239)$$

mit einem mittleren homogenen zonalen Strömungsvektor \bar{u} . Nun nimmt man einen Spezialfall an, man geht davon aus, dass im Niveau 1 der Hintergrundwind

$$\bar{u}_1 = \bar{u}_T \quad (6.240)$$

weht und um Niveau 3 der Hintergrundwind

$$\bar{u}_3 = -\bar{u}_T. \quad (6.241)$$

Dann gelten

$$\bar{\psi}_1 = -\bar{u}_T y, \quad (6.242)$$

$$\bar{\psi}_3 = \bar{u}_T y. \quad (6.243)$$

Hieraus folgt

$$\bar{\psi}_T = -\bar{u}_T y. \quad (6.244)$$

Für den Grundzustand \bar{V} kann man somit notieren

$$\bar{V}_1 = \begin{pmatrix} \bar{u}_T \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (6.245)$$

$$\bar{V}_3 = \begin{pmatrix} -\bar{u}_T \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (6.246)$$

Das Feld \bar{u}_T sei von y unabhängig, dann gilt

$$\bar{\zeta}_1 = \bar{\zeta}_3 = 0. \quad (6.247)$$

Für die potentiellen Vorticities gilt

$$\bar{q}_1 = f_0 + \beta y - K^2 \bar{\psi}_T = f_0 + (\beta + K^2 \bar{u}_T) y, \quad (6.248)$$

$$\bar{q}_3 = f_0 + \beta y + K^2 \bar{\psi}_T = f_0 + (\beta - K^2 \bar{u}_T) y. \quad (6.249)$$

Dieses Feld ist stationär:

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + \bar{V}_1 \cdot \nabla \right) \bar{q}_1 = 0 \quad (6.250)$$

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + \bar{V}_3 \cdot \nabla \right) \bar{q}_3 = 0 \quad (6.251)$$

Wendet man den Störungsansatz auch auf die hier verwendete Form der materiellen Ableitung sowie auf die potentielle Vorticity an, folgt

$$\frac{D_H^{(g)}}{Dt} = \frac{\partial}{\partial t} + \bar{V} \cdot \nabla + V' \cdot \nabla, \quad (6.252)$$

$$q = \bar{q} + q'. \quad (6.253)$$

Nun nimmt man wiederum an, dass die Störungen nur meridionale Komponenten haben, also

$$V'_1 = \begin{pmatrix} 0 \\ v'_1 \end{pmatrix}, \quad (6.254)$$

$$V'_3 = \begin{pmatrix} 0 \\ v'_3 \end{pmatrix}. \quad (6.255)$$

Für die Stromfunktionen gelten

$$v'_1 = \frac{\partial \psi'_1}{\partial x}, \quad (6.256)$$

$$v'_3 = \frac{\partial \psi'_3}{\partial x}. \quad (6.257)$$

Für die potentiellen Vorticites folgt hieraus

$$q'_1 = \frac{\partial^2 \psi'_1}{\partial x^2} - K^2 \psi'_T, \quad (6.258)$$

$$q'_3 = \frac{\partial^2 \psi'_3}{\partial x^2} + K^2 \psi'_T. \quad (6.259)$$

Um die Tendenzgleichungen zu untersuchen, notiert man

$$\frac{\partial \bar{q}}{\partial t} + \bar{V} \cdot \nabla \bar{q} + \frac{\partial q'}{\partial t} + \bar{V} \cdot \nabla q' + V' \cdot \nabla \bar{q} + V' \cdot \nabla q' = \mathbf{o}. \quad (6.260)$$

Die ersten beiden Terme ergeben Null, wie bereits festgehalten. Das letzte Skalarprodukt verschwindet aufgrund der Orthogonalität der beteiligten Vektoren ebenfalls. Somit gelten

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + \bar{u}_T \frac{\partial}{\partial x} \right) q'_1 + (\beta + K^2 \bar{u}_T) \frac{\partial \psi'_1}{\partial x} = \mathbf{o}, \quad (6.261)$$

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} - \bar{u}_T \frac{\partial}{\partial x} \right) q'_3 + (\beta - K^2 \bar{u}_T) \frac{\partial \psi'_3}{\partial x} = \mathbf{o}. \quad (6.262)$$

Da die Glg.en (6.261) - (6.262) linear sind, kann man die Lösungen als Überlagerungen ebener Wellen verstehen und macht daher einen Ansatz

$$\psi'_1 = A_1 \exp[i(kx - \omega t)] =: A_1 f(x, t), \quad (6.263)$$

$$\psi'_3 = A_3 \exp[i(kx - \omega t)] =: A_3 f(x, t). \quad (6.264)$$

Damit erhält man

$$q'_1 = -k^2 A_1 f - K^2 \frac{A_1 - A_3}{2} f, \quad (6.265)$$

$$q'_3 = -k^2 A_3 f + K^2 \frac{A_1 - A_3}{2} f. \quad (6.266)$$

Das zu lösende Gleichungssystem ist also

$$(\omega - k\bar{u}_T) \left(k^2 A_1 + K^2 \frac{A_1 - A_3}{2} \right) + (\beta + K^2 \bar{u}_T) k A_1 = \mathbf{o}, \quad (6.267)$$

$$(\omega + k\bar{u}_T) \left(k^2 A_3 - K^2 \frac{A_1 - A_3}{2} \right) + (\beta - K^2 \bar{u}_T) k A_3 = \mathbf{o}. \quad (6.268)$$

In Matrixschreibweise lautet dies

$$\begin{pmatrix} M_{1,1} & M_{1,2} \\ M_{2,1} & M_{2,2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_1 \\ A_3 \end{pmatrix} = \mathbf{o} \quad (6.269)$$

mit den Matrixkoeffizienten

$$M_{1,1} = (\omega - k\bar{u}_T) \left(k^2 + \frac{K^2}{2} \right) + (\beta + K^2 \bar{u}_T) k, \quad (6.270)$$

$$M_{1,2} = -\frac{K^2}{2} (\omega - k\bar{u}_T), \quad (6.271)$$

$$M_{2,1} = -\frac{K^2}{2} (\omega + k\bar{u}_T), \quad (6.272)$$

$$M_{2,2} = (\omega + k\bar{u}_T) \left(k^2 + \frac{K^2}{2} \right) + (\beta - K^2 \bar{u}_T) k. \quad (6.273)$$

Nullsetzen der Determinante ergibt

$$\begin{aligned}
& M_{1,1}M_{2,2} - M_{2,1}M_{1,2} \stackrel{!}{=} 0 \\
\Rightarrow & (\omega^2 - k^2 \bar{u}_T^2) \left(k^2 + \frac{K^2}{2} \right)^2 + 2k \left(k^2 + \frac{K^2}{2} \right) (\omega\beta + kK^2 \bar{u}_T^2) + (\beta^2 - K^4 \bar{u}_T^2) k^2 - \frac{K^4}{4} (\omega^2 - k^2 \bar{u}_T^2) = 0 \\
\Rightarrow & (\omega^2 - k^2 \bar{u}_T^2) (k^4 + k^2 K^2) + 2k \left(k^2 + \frac{K^2}{2} \right) (\omega\beta + kK^2 \bar{u}_T^2) + (\beta^2 - K^4 \bar{u}_T^2) k^2 = 0 \\
\Rightarrow & (\omega^2 - k^2 \bar{u}_T^2) (k^2 + K^2) + \left(2k + \frac{K^2}{k} \right) (\omega\beta + kK^2 \bar{u}_T^2) + \beta^2 - K^4 \bar{u}_T^2 = 0 \\
\Rightarrow & (\omega^2 - k^2 \bar{u}_T^2) (k^2 + K^2) + 2k (\omega\beta + kK^2 \bar{u}_T^2) + \frac{K^2 \omega \beta}{k} + \beta^2 = 0 \\
\Rightarrow & \omega^2 k^2 + \omega^2 K^2 - k^4 \bar{u}_T^2 + k^2 K^2 \bar{u}_T^2 + 2k\omega\beta + \frac{K^2 \omega \beta}{k} + \beta^2 = 0 \\
\Rightarrow & \omega^2 [k^2 + K^2] + \omega \left[2k\beta + \frac{K^2 \beta}{k} \right] - k^4 \bar{u}_T^2 + k^2 K^2 \bar{u}_T^2 + \beta^2 = 0 \\
\Rightarrow & \omega^2 + \omega \frac{\beta}{k} \frac{2k^2 + K^2}{k^2 + K^2} + \frac{k^2 K^2 \bar{u}_T^2 - k^4 \bar{u}_T^2 + \beta^2}{k^2 + K^2} = 0 \\
\Rightarrow & \omega_{1,2} = -\frac{\beta}{2k} \frac{2k^2 + K^2}{k^2 + K^2} \pm \sqrt{\frac{\beta^2}{4k^2} \frac{(2k^2 + K^2)^2}{(k^2 + K^2)^2} - \frac{k^2 K^2 \bar{u}_T^2 - k^4 \bar{u}_T^2 + \beta^2}{k^2 + K^2}} \\
\Rightarrow & \omega_{1,2} = -\frac{\beta}{2k} \frac{2k^2 + K^2}{k^2 + K^2} \pm \frac{1}{k^2 + K^2} \sqrt{\frac{\beta^2}{4k^2} (4k^4 + K^4 + 4k^2 K^2) - (k^2 + K^2) (k^2 K^2 \bar{u}_T^2 - k^4 \bar{u}_T^2 + \beta^2)} \\
\Rightarrow & \omega_{1,2} = -\frac{\beta}{2k} \frac{2k^2 + K^2}{k^2 + K^2} \\
\pm & \frac{1}{k^2 + K^2} \sqrt{\beta^2 k^2 + \frac{\beta^2 K^4}{4k^2} + \beta^2 K^2 - k^4 K^2 \bar{u}_T^2 - k^2 \beta^2 - K^4 k^2 \bar{u}_T^2 - K^2 \beta^2 + k^6 \bar{u}_T^2 + K^2 k^4 \bar{u}_T^2} \\
\Rightarrow & \omega_{1,2} = -\frac{\beta}{k} \frac{k^2 + K^2 / 2}{k^2 + K^2} \pm \frac{1}{k^2 + K^2} \sqrt{\frac{\beta^2 K^4}{4k^2} + \bar{u}_T^2 k^2 (k^4 - K^4)}. \tag{6.274}
\end{aligned}$$

Unter der Annahme $k < K$ maximiert man den Ausdruck unter der Wurzel, indem man $\bar{u}_T = 0$ setzt, hieraus folgt

$$c = \frac{\omega}{k} \leq -\frac{\beta}{k^2 + K^2}, \tag{6.275}$$

barokline Rossby-Wellen pflanzen sich also immer nach Westen fort.

6.4.4 Schwerewellen

6.5 Instabilitäten

Findet man beim Einbringen einer ebenen Welle als Störung in ein Gleichungssystem und anschließender Linearisierung (gerechtfertigt für kleine Amplituden) Kreisfrequenzen mit positivem Imaginärteil, liegt eine *Instabilität* vor. Die Amplitude der Welle wächst in dieser linearen Anfangszeit exponentiell, bevor nichtlineare Effekte dominant werden und ein Brechen der Welle mit anschließender Dissipation der kinetischen Energie bewirken.

6.5.1 Barotrope Instabilität

Nehme einen westlichen Grundstrom $U > 0$ an, der nur von y abhängt

$$U = U(y) \tag{6.276}$$

und eine Störung

$$\mathbf{V}' = (u, v)^T = \mathbf{k} \times \nabla \psi \tag{6.277}$$

mit einer Stromfunktion ψ . Man betrachte einen zonalen Kanal der Ausdehnung $2b$ mit $b > 0$, die Gerade $y = 0$ liege in der Mitte dieses Kanals. Die Randbedingungen seien $\omega = 0$ bei $p = 0$ und $p = p_0$ und $v = 0$ bei $y = \pm b$. Dann ist der Horizontalwind divergenzfrei und es kann die *barotrope Vorticitygleichung* angewandt werden,

$$\frac{\partial \zeta}{\partial t} + \beta v + u \frac{\partial \zeta}{\partial x} + v \frac{\partial \zeta}{\partial y} = 0. \quad (6.278)$$

Hierbei sei β homogen, s. Absch. 4.5.2. Macht man hier einen Störungsansatz nach Absch. 6.2, so erhält man

$$\frac{\partial \zeta'}{\partial t} + \beta v + U \frac{\partial \zeta'}{\partial x} + v \frac{\partial \bar{\zeta}}{\partial y} = 0. \quad (6.279)$$

Hierbei wurde für die Vorticity geschrieben $\zeta = \bar{\zeta} + \zeta'$ mit $\bar{\zeta}$ als Vorticity von U und ζ' als Vorticity von V' . Setze für die Störung ψ

$$\psi(x, y, t) = Y(y) \psi_0 e^{i(kx - \omega t)} \quad (6.280)$$

an. Mit $Y(\pm b) = 0$ sind die Randbedingungen an v erfüllt, man erhält außerdem

$$v = \frac{\partial \psi}{\partial x} = ik\psi, \quad (6.281)$$

$$\zeta' = \Delta \psi = -k^2 \psi + Y'' \psi_0 e^{i(kx - \omega t)}, \quad (6.282)$$

$$\frac{\partial \zeta'}{\partial x} = -ik^3 \psi + Y'' \psi_0 ike^{i(kx - \omega t)}. \quad (6.283)$$

$$(6.284)$$

Setzt man dies in die barotrope Vorticitygleichung ein und streicht $\psi_0 e^{i(kx - \omega t)}$, erhält man

$$\begin{aligned} i\omega k^2 Y - i\omega Y'' + \beta ik Y - U ik^3 Y + Y'' ik U - ik Y \frac{d^2 U}{dy^2} &= 0 \\ \Leftrightarrow \omega k^2 Y - \omega Y'' + \beta k Y - U k^3 Y + Y'' k U - k Y \frac{d^2 U}{dy^2} &= 0. \end{aligned} \quad (6.285)$$

Instabilität bedeutet, dass ω nicht rein reell ist,

$$\omega = \omega_r + i\omega_c, \quad (6.286)$$

mit $\omega_r, \omega_c \in \mathbb{R} \setminus \{0\}$. Einsetzen in Glg. (6.285) liefert

$$k^2 Y(\omega_r + i\omega_c) - Y''(\omega_r + i\omega_c) + \beta k Y - U k^3 Y + Y'' k U = 0. \quad (6.287)$$

Der Imaginärteil hiervon ist

$$k^2 Y \omega_c - Y'' \omega_c = 0 \Leftrightarrow Y'' = k^2 Y. \quad (6.288)$$

Setzt man dies in den Realteil ein, erhält man

$$k^2 Y \omega_r - k^2 Y \omega_r + \beta k Y - U k^3 Y + U k^3 Y - k Y \frac{d^2 U}{dy^2} = 0 \Rightarrow \frac{d^2 U}{dy^2} = \beta. \quad (6.289)$$

dies ist eine notwendige Bedingung. Setzt man umgekehrt Glg. (6.289) voraus, wird Glg. (6.285) zu (man weiß hier noch nicht, ob ω reell ist)

$$\omega k^2 Y - \omega Y'' - U k^3 Y + Y'' k U = 0. \quad (6.290)$$

Geht man von einem jetförmigen Hintergrundwind

$$U(y) = U_{\min} + \frac{1}{2} (U_{\max} - U_{\min}) \left(1 + e^{i \frac{y\pi}{b}} \right) \quad (6.291)$$

mit $U_{\min}, U_{\max} > 0$ aus, erhält man im Imaginärteil von Glg. (6.290)

$$k^3 Y \frac{1}{2} (U_{\max} - U_{\min}) \sin\left(\frac{y\pi}{b}\right) = Y'' k \frac{1}{2} (U_{\max} - U_{\min}) \sin\left(\frac{y\pi}{b}\right), \quad (6.292)$$

also ist

$$Y'' = k^2 Y. \quad (6.293)$$

Dass ein Zustand labil ist, heißt nicht zwangsläufig, dass er zusammenbricht. Es genügt aber eine beliebig kleine Anfangsauslenkung v , um eine exponentiell anwachsende Störung zu erzeugen. Man kann in der Realität von der Existenz einer solchen sehr kleinen Anfangsstörung ausgehen, sodass Instabilität in der Realität immer zum Zusammenbruch des Grundzustandes führt.

6.5.2 Barokline Instabilität

Für den Ausdruck unter der Wurzel in Glg. (6.274) wird nun eine Abkürzung

$$g = g(\bar{u}_T, k) := \frac{\beta^2 K^4}{4k^2} + \bar{u}_T^2 k^2 (k^4 - K^4) \quad (6.294)$$

definiert. Im Fall $g < 0$ gilt

$$\omega = \omega_r + i \frac{1}{k^2 + K^2} \omega'_i \quad (6.295)$$

mit

$$\omega'_i := \pm \sqrt{|g(\bar{u}_T, k)|}. \quad (6.296)$$

Dies führt dazu, dass im Fall des negativen Vorzeichens die Amplitude exponentiell anwächst, es liegt also eine Instabilität vor. Definiere

$$N := \frac{\omega'_i}{k^2 + K^2} = \frac{\sqrt{|g(\bar{u}_T, k)|}}{k^2 + K^2}, \quad (6.297)$$

dies ist die Wachstumskonstante der Störung. Es gilt also im instabilen Fall

$$N^2 + \frac{g}{(k^2 + K^2)} = N^2 + \frac{\frac{\beta^2 K^4}{4k^2} + \bar{u}_T^2 k^2 (k^4 - K^4)}{(k^2 + K^2)^2} = 0. \quad (6.298)$$

An dieser Stelle definiert man eine dimensionslose Kreiswellenzahl

$$\chi := \frac{k}{K}, \quad (6.299)$$

damit folgt

$$\begin{aligned} N^2 + \frac{\frac{\beta^2}{4k^2} + \bar{u}_T^2 k^2 (\chi^2 + 1)(\chi^2 - 1)}{(\chi^2 + 1)^2} &= N^2 + \frac{\beta^2}{4k^2 (\chi^2 + 1)^2} + \bar{u}_T^2 k^2 \frac{\chi^2 - 1}{\chi^2 + 1} = 0 \\ \Rightarrow N^2 + \frac{\beta^2}{4k^2 (\chi^2 + 1)^2} + \frac{\beta^2}{K^2} \bar{u}_T^2 \chi^2 \frac{\chi^2 - 1}{\chi^2 + 1} &= 0 \end{aligned} \quad (6.300)$$

mit einem dimensionslosen thermischen Wind

$$\bar{u}_T^* := \frac{\bar{u}_T K^2}{\beta}. \quad (6.301)$$

Hieraus folgt weiter

$$\frac{N^2 K^2}{\chi^2 \beta^2} + \frac{1}{4\chi^4 (\chi^2 + 1)^2} + \bar{u}_T^* \frac{\chi^2 - 1}{\chi^2 + 1} = 0 \quad (6.302)$$

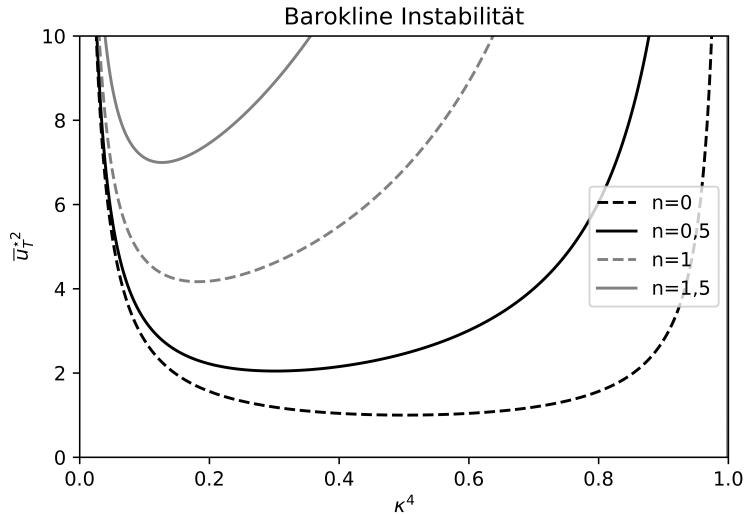


Abbildung 6.4: Die für gewisse Wachstumsraten notwendigen Windscherungen als Funktion der Wellenzahl.

Mit der dimensionslosen Wachstumsrate

$$n := \frac{NK}{\chi^\beta} \quad (6.303)$$

kann man dies als

$$n^2 + \frac{1}{4\chi^4 (\chi^2 + 1)^2} + \bar{u}_T^{*2} \frac{\chi^2 - 1}{\chi^2 + 1} = 0 \quad (6.304)$$

notieren. Stellt man dies nach \bar{u}_T^{*2} um, folgt

$$\bar{u}_T^{*2} = n^2 \frac{1 + \chi^2}{1 - \chi^2} + \frac{1}{4\chi^4 (1 - \chi^4)}. \quad (6.305)$$

Abb. 6.4 zeigt die für unterschiedliche Wellenzahlen und Wachstumsraten notwendigen thermischen Windscherungen. Aus den Definitionen von χ und \bar{u}_T^* wird klar, dass man sich bei abnehmender thermischer Stabilität in dieser Darstellung nach links oben bewegt, also in Richtung barokliner Labilität.

Bei der baroklinen Instabilität wird potentielle Energie der Schichtung, welche durch das Strahlungsfeld immer wieder neu erzeugt wird, in kinetische Energie des Horizontalwindes umgewandelt, bevor sie dissipiert wird.

6.5.3 Kelvin-Helmholtz-Instabilität

Die *Kelvin-Helmholtz-Instabilität* bezeichnet das Brechen von Schichtungswellen in einer vertikal gescherten Horizontalströmung.

6.5.3.1 In diskreter Schichtung

Die Bewegung sei y-symmetrisch, betrachtet wird also die xz-Ebene. Die xy-Ebene falle mit der Gleichgewichtslage einer Phasengrenze zusammen. Das Medium oberhalb der Grenzschicht ($z > 0$) erhält den Index 1, das Medium darunter ($z < 0$) den Index 2. Die Medien seien barotrop und inkompressibel. Zum Zeitpunkt $t = 0$ werde das Strömungsfeld durch

$$U_1 > 0, \quad (6.306)$$

$$U_2 > 0, \quad (6.307)$$

$$V_1 = V_2 = W_1 = W_2 = 0 \quad (6.308)$$

beschrieben. Die Coriolis-Kraft wird vernachlässigt. Es gilt

$$\nabla \times U_1 = \nabla \times U_2 = 0. \quad (6.309)$$

Aufgrund des Zirkulationssatzes in der Form Glg. (5.41) gilt dies auch für $t > 0$, solange sich die Medien nicht durchmischen. Daher beschreibt man die Geschwindigkeitsfelder durch zwei Stromfunktionen

$$\psi_1 = U_1 x + \psi'_1, \quad (6.310)$$

$$\psi_2 = U_2 x + \psi'_2, \quad (6.311)$$

wobei die gestrichenen Größen für die Störungen stehen. Aufgrund der Divergenzfreiheit gilt

$$\Delta \psi'_1 = \Delta \psi'_2 = 0. \quad (6.312)$$

Die Auslenkung der Phasengrenze sei mit ζ bezeichnet. Mit \mathbf{n} als Normalenvektor der Oberfläche und ζ als Oberflächenauslenkung gilt die kinematische Randbedingung

$$\mathbf{n} \cdot \nabla \psi_1 = \mathbf{n} \cdot \left(\frac{\partial \zeta}{\partial t} \mathbf{e}_z \right) = \mathbf{n} \cdot \nabla \psi_2 \text{ bei } z = \zeta. \quad (6.313)$$

Mit Vernachlässigung der Oberflächenspannung folgt die dynamische Randbedingung

$$p_1 = p_2 \text{ bei } z = \zeta. \quad (6.314)$$

Für den Normalenvektor \mathbf{n} gilt

$$\mathbf{n} = \frac{\mathbf{i}}{\sqrt{1 + \left(\frac{\partial \zeta}{\partial x} \right)^2}} \begin{pmatrix} -\frac{\partial \zeta}{\partial x} \\ 1 \end{pmatrix}. \quad (6.315)$$

Die kinematische Randbedingung Glg. (6.313) wird damit zu

$$-\left(U_1 + \frac{\partial \psi'_1}{\partial x} \right) \frac{\partial \zeta}{\partial x} + \frac{\partial \psi'_1}{\partial z} = \frac{\partial \zeta}{\partial t} = -\left(U_2 + \frac{\partial \psi'_2}{\partial x} \right) \frac{\partial \zeta}{\partial x} + \frac{\partial \psi'_2}{\partial z} \text{ bei } z = \zeta, \quad (6.316)$$

wobei der Wurzelausdruck herausmultipliziert wurde. Um diesen Ausdruck zu linearisieren, wendet man ihn bei $z = 0$ an und vernachlässigt quadratische Terme:

$$-U_1 \frac{\partial \zeta}{\partial x} + \frac{\partial \psi'_1}{\partial z} = \frac{\partial \zeta}{\partial t} = -U_2 \frac{\partial \zeta}{\partial x} + \frac{\partial \psi'_2}{\partial z} \text{ bei } z = 0 \quad (6.317)$$

Da das Strömungsfeld rotationsfrei ist und man außerdem von einem idealen Fluid ausgeht, kann man die zeitabhängigen Bernoulli-Gleichungen (s. Glg. (5.95)) der beiden Schichten

$$\frac{\partial \psi_1}{\partial t} + \frac{1}{2} |\nabla \psi_1|^2 + \frac{p_1}{\rho_1} + gz = C_1, \quad (6.318)$$

$$\frac{\partial \psi_2}{\partial t} + \frac{1}{2} |\nabla \psi_2|^2 + \frac{p_2}{\rho_2} + gz = C_2 \quad (6.319)$$

mit reellen Konstanten C_1, C_2 aufstellen. Die dynamische Randbedingung Glg. (6.314) impliziert bei $z = \zeta$ die Identität

$$\rho_1 \left(C_1 - \frac{\partial \psi_1}{\partial t} - \frac{1}{2} |\nabla \psi_1|^2 - gz \right) = \rho_2 \left(C_2 - \frac{\partial \psi_2}{\partial t} - \frac{1}{2} |\nabla \psi_2|^2 - gz \right). \quad (6.320)$$

Ohne Störung gilt

$$\rho_1 \left(C_1 - \frac{1}{2} U_1^2 \right) = \rho_2 \left(C_2 - \frac{1}{2} U_2^2 \right). \quad (6.321)$$

Subtrahieren von Glg. (6.321) von Glg. (6.320) führt zu

$$\rho_1 \left(-\frac{\partial \psi_1}{\partial t} + \frac{1}{2} U_1^2 - \frac{1}{2} |\nabla \psi_1|^2 - gz \right) = \rho_2 \left(-\frac{\partial \psi_2}{\partial t} + \frac{1}{2} U_2^2 - \frac{1}{2} |\nabla \psi_2|^2 - gz \right), \quad (6.322)$$

was bei $z = \zeta$ gilt. Mit den Glg.en (6.310) - (6.311) folgt

$$\frac{1}{2} \left| \nabla \psi_j \right|^2 = \frac{1}{2} \left(U_j^2 + \left(\frac{\partial \psi'_j}{\partial x} \right)^2 + 2 U_j \frac{\partial \psi'_j}{\partial x} + \left(\frac{\partial \psi'_j}{\partial z} \right)^2 \right) \quad (6.323)$$

für $j = 1, 2$. Setzt man dies in Glg. (6.322) ein, erhält man

$$\begin{aligned} & \rho_1 \left(-\frac{\partial \psi_1}{\partial t} - \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \psi'_1}{\partial x} \right)^2 - U_1 \frac{\partial \psi'_1}{\partial x} - \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \psi'_1}{\partial z} \right)^2 - gz \right) \\ &= \rho_2 \left(-\frac{\partial \psi_2}{\partial t} - \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \psi'_2}{\partial x} \right)^2 - U_2 \frac{\partial \psi'_2}{\partial x} - \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \psi'_2}{\partial z} \right)^2 - gz \right), \end{aligned} \quad (6.324)$$

bei $z = \zeta$. Diese Gleichung linearisiert man, indem man sie bei $z = 0$ auswertet und die quadratischen Terme vernachlässigt:

$$\rho_1 \left(\frac{\partial \psi_1}{\partial t} + U_1 \frac{\partial \psi'_1}{\partial x} + gz \right) = \rho_2 \left(\frac{\partial \psi_2}{\partial t} + U_2 \frac{\partial \psi'_2}{\partial x} + gz \right) \quad (6.325)$$

Nun macht man für $j = 1, 2$ den Ansatz

$$\psi'_j = A_j(z) \exp(ikx - i\omega t). \quad (6.326)$$

Mit den Laplace-Gleichungen Glg. (6.312) folgt

$$-k^2 A_j + \frac{d^2 A_j}{dz^2} = 0. \quad (6.327)$$

Die Lösungen sind von der Form

$$A_j(z) = A_{\pm} \exp(\pm kz). \quad (6.328)$$

Mit den Festlegungen

$$\lim_{z \rightarrow \infty} \psi'_1 = 0, \quad (6.329)$$

$$\lim_{z \rightarrow -\infty} \psi'_2 = 0, \quad (6.330)$$

welche bedeuten, dass die Störung in der Unendlichkeit verschwinden soll, folgen

$$\psi'_1 = A_- \exp[ikx - i\omega t - kz], \quad (6.331)$$

$$\psi'_2 = A_+ \exp[ikx - i\omega t + kz]. \quad (6.332)$$

Für die Oberflächenauslenkung nimmt man entsprechend

$$\zeta = \zeta_0 \exp(ikx - i\omega t) \quad (6.333)$$

an. Setzt man dies in die Glg.en (6.317) und (6.325) ein, erhält man

$$-U_1 ik \zeta_0 - k A_- = -i\omega \zeta_0 = -U_2 ik \zeta_0 + k A_+, \quad (6.334)$$

$$\rho_1 (-i\omega A_- + ik U_1 A_- + g \zeta_0) = \rho_2 (-i\omega A_+ + ik U_2 A_+ + g \zeta_0). \quad (6.335)$$

Glg. (6.334) impliziert

$$A_- = \frac{i}{k} \zeta_0 (\omega - U_1 k), \quad (6.336)$$

$$A_+ = \frac{i}{k} \zeta_0 (U_2 k - \omega). \quad (6.337)$$

Setzt man dies in Glg. (6.335) ein, folgt

$$\begin{aligned} \varrho_1 \left(-i\omega \frac{i}{k} \zeta_0 (\omega - U_1 k) + ikU_1 \frac{i}{k} \zeta_0 (\omega - U_1 k) + g\zeta_0 \right) &= \varrho_2 \left(-i\omega \frac{i}{k} \zeta_0 (U_2 k - \omega) + ikU_2 \frac{i}{k} \zeta_0 (U_2 k - \omega) + g\zeta_0 \right) \\ \Leftrightarrow \varrho_1 \left(\frac{\omega}{k} (\omega - U_1 k) - U_1 (\omega - U_1 k) + g \right) &= \varrho_2 \left(\frac{\omega}{k} (U_2 k - \omega) - U_2 (U_2 k - \omega) + g \right) \\ \Leftrightarrow \varrho_1 (\omega (\omega - U_1 k) - kU_1 (\omega - U_1 k) + kg) &= \varrho_2 (\omega (U_2 k - \omega) - U_2 k (U_2 k - \omega) + kg). \end{aligned} \quad (6.338)$$

Dies ist eine quadratische Gleichung für ω , also eine Dispersionsrelation. Weitere algebraische Umformung ergibt

$$\omega^2 - 2k\omega \frac{\varrho_1 U_1 + \varrho_2 U_2}{\varrho_1 + \varrho_2} - kg \frac{\varrho_2 - \varrho_1}{\varrho_1 + \varrho_2} + k^2 \frac{U_1^2 \varrho_1 + U_2^2 \varrho_2}{\varrho_1 + \varrho_2} = 0 \quad (6.339)$$

Dies ergibt zwei Lösungen für die Kreisfrequenz:

$$\begin{aligned} \omega_{\pm} &= \frac{\varrho_1 U_1 k + \varrho_2 U_2 k}{\varrho_1 + \varrho_2} \pm \left[kg \frac{\varrho_2 - \varrho_1}{\varrho_1 + \varrho_2} - k^2 \frac{U_1^2 \varrho_1 \varrho_2 + U_2^2 \varrho_1 \varrho_2 - 2\varrho_1 \varrho_2 U_1 U_2}{(\varrho_1 + \varrho_2)^2} \right]^{1/2} \\ \Leftrightarrow \omega_{\pm} &= \frac{\varrho_1 U_1 k + \varrho_2 U_2 k}{\varrho_1 + \varrho_2} \pm \left[kg \frac{\varrho_2 - \varrho_1}{\varrho_1 + \varrho_2} - k^2 \varrho_1 \varrho_2 \frac{(U_1 - U_2)^2}{(\varrho_1 + \varrho_2)^2} \right]^{1/2} \end{aligned} \quad (6.340)$$

Instabilität liegt vor im Fall

$$\begin{aligned} kg \frac{\varrho_2 - \varrho_1}{\varrho_1 + \varrho_2} - k^2 \varrho_1 \varrho_2 \frac{(U_1 - U_2)^2}{(\varrho_1 + \varrho_2)^2} &< 0 \\ \Leftrightarrow kg \frac{\varrho_2 - \varrho_1}{\varrho_1 + \varrho_2} &< k^2 \varrho_1 \varrho_2 \frac{(U_1 - U_2)^2}{(\varrho_1 + \varrho_2)^2} \\ \Leftrightarrow g (\varrho_2^2 - \varrho_1^2) &< k \varrho_1 \varrho_2 (U_1 - U_2)^2, \end{aligned} \quad (6.341)$$

also wenn

- die Dichtedifferenz klein genug ist,
- die Welle kurz genug ist oder die
- Geschwindigkeitsdifferenz groß genug ist.

Ein Beispiel ist das Entstehen von Wasseroberflächenwellen unter Windeinwirkung. Man kann davon ausgehen, dass fast immer spektrale Komponenten im Windfeld vorhanden sind, die die Bedingung Glg. (6.341) erfüllen. Die weitere zeitliche Entwicklung des Systems kann unterschiedlich aussehen, z. B. ist diese abhängig davon, ob sich die Medien durchmischen können oder nicht.

6.5.3.2 In kontinuierlicher Schichtung

Man betrachtet wieder die xz-Ebene und vernachlässigt die Coriolis-Beschleunigung. Außerdem macht man die Boussinesq-Approximation (s. Absch. 4.4). Impuls-, Kontinuitätsgleichung und Erster Hauptsatz der Thermodynamik lauten mit σ als potentieller Dichte

$$\frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial x} + w \frac{\partial w}{\partial z} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial x}, \quad (6.342)$$

$$\frac{\partial w}{\partial t} + u \frac{\partial w}{\partial x} + w \frac{\partial w}{\partial z} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial z} - g, \quad (6.343)$$

$$\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial w}{\partial z} = 0, \quad (6.344)$$

$$\frac{\partial \sigma}{\partial t} + u \frac{\partial \sigma}{\partial x} + w \frac{\partial \sigma}{\partial z} = 0. \quad (6.345)$$

Nun geht man von einem vertial gescharten Hintergrundwindfeld $\bar{u}(z) = u(x, z, t) - u'(x, z, t)$ aus, der vertikale Hintergrundwind \bar{w} verschwinde. Die Hintergrunddichte $\bar{\rho}(z) = \rho(x, z, t) - \rho'(x, z, t)$ sei in hydrostatischer Bal-

ance mit dem Hintergrunddruckfeld $\bar{p}(z) = p(x, z, t) - p'(x, z, t)$, also

$$\frac{\partial \bar{p}}{\partial z} = -g\bar{\rho}. \quad (6.346)$$

Setzt man dies in die Gleichungen ein und linearisiert sie, erhält man

$$\frac{\partial u'}{\partial t} + \bar{u} \frac{\partial u'}{\partial x} + w \frac{\partial \bar{u}}{\partial z} = -\frac{i}{\bar{\rho}} \frac{\partial p'}{\partial x} \approx -\frac{i}{\tilde{\rho}} \frac{\partial p'}{\partial x}, \quad (6.347)$$

$$\frac{\partial w}{\partial t} + \bar{u} \frac{\partial w}{\partial x} = -\frac{i}{\bar{\rho}} \frac{\partial p}{\partial z} - g \approx -\frac{i}{\tilde{\rho}} \frac{\partial p}{\partial z} - \frac{g\bar{\rho}}{\tilde{\rho}} = -\frac{i}{\tilde{\rho}} \frac{\partial p'}{\partial z} - \frac{g\bar{\rho}'}{\tilde{\rho}}, \quad (6.348)$$

$$\frac{\partial u'}{\partial x} + \frac{\partial w}{\partial z} = 0, \quad (6.349)$$

$$\frac{\partial \sigma'}{\partial t} + \bar{u} \frac{\partial \sigma'}{\partial x} + w \frac{\partial \bar{\sigma}}{\partial z} = 0. \quad (6.350)$$

In der x-Komponente der Impulsgleichung wurde im Nenner des Druckgradiententerms $\rho \rightarrow \tilde{\rho}$ ersetzt, wobei $\tilde{\rho}$ eine als homogen angenommene mittlere Dichte bezeichnet; in der z-Komponente wurde die rechte Seite mit $\frac{\bar{\rho}}{\tilde{\rho}}$ multipliziert, bevor Glg. (6.346) eingesetzt wurde. Die Störung der Strömung ist divergenzfrei, daher setzt man eine Stromfunktion $\psi = \psi(x, z, t)$ mit

$$u' = \frac{\partial \psi}{\partial z}, \quad (6.351)$$

$$w = -\frac{\partial \psi}{\partial x}. \quad (6.352)$$

an. Damit ist die Kontinuitätsgleichung automatisch erfüllt. Die verbleibenden drei Gleichungen lauten

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial t \partial z} + \bar{u} \frac{\partial^2 \psi}{\partial z \partial x} - \frac{\partial \psi}{\partial x} \frac{\partial \bar{u}}{\partial z} = -\frac{i}{\tilde{\rho}} \frac{\partial p'}{\partial x}, \quad (6.353)$$

$$-\frac{\partial^2 \psi}{\partial t \partial x} - \bar{u} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} = -\frac{i}{\tilde{\rho}} \frac{\partial p'}{\partial z} - \frac{g\bar{\rho}'}{\tilde{\rho}}, \quad (6.354)$$

$$\frac{\partial \sigma'}{\partial t} + \bar{u} \frac{\partial \sigma'}{\partial x} - \frac{\partial \psi}{\partial x} \frac{\partial \bar{\sigma}}{\partial z} = 0. \quad (6.355)$$

Nun macht man weiterhin die Ansätze

$$\psi(x, z, t) = \psi_o(z) \exp[ik(x - ct)], \quad (6.356)$$

$$p'(x, z, t) = p_o(z) \exp[ik(x - ct)], \quad (6.357)$$

$$\rho'(x, z, t) = \rho_o(z) \exp[ik(x - ct)], \quad (6.358)$$

$$\sigma'(x, z, t) = \sigma_o(z) \exp[ik(x - ct)]. \quad (6.359)$$

Daraus folgt

$$-ikc \frac{d\psi_o}{dz} + \bar{u} ik \frac{d\psi_o}{dz} - ik\psi_o \frac{\partial \bar{u}}{\partial z} = -ik \frac{p_o}{\tilde{\rho}}, \quad (6.360)$$

$$-k^2 c \psi_o + \bar{u} k^2 \psi_o = -\frac{i}{\tilde{\rho}} \frac{dp_o}{dz} - g \frac{\rho_o}{\tilde{\rho}}, \quad (6.361)$$

$$-ikc\sigma_o + \bar{u} ik\sigma_o - ik\psi_o \frac{d\bar{\sigma}}{dz} = 0. \quad (6.362)$$

Dies ergibt vereinfacht

$$-c \frac{d\psi_o}{dz} + \bar{u} \frac{d\psi_o}{dz} - \psi_o \frac{\partial \bar{u}}{\partial z} = -\frac{p_o}{\tilde{\rho}}, \quad (6.363)$$

$$\psi_o k^2 (\bar{u} - c) = -\frac{i}{\tilde{\rho}} \frac{dp_o}{dz} - g \frac{\varphi_o}{\tilde{\rho}}, \quad (6.364)$$

$$\sigma_o (\bar{u} - c) - \psi_o \frac{d\bar{\sigma}}{dz} = o. \quad (6.365)$$

Differenziert man die erste Gleichung nach z , erhält man

$$\frac{d^2 \psi_o}{dz^2} (\bar{u} - c) - \psi_o \frac{d^2 \bar{u}}{dz^2} = -\frac{i}{\tilde{\rho}} \frac{dp_o}{dz}. \quad (6.366)$$

Setzt man hier Glg. (6.364) ein, folgt

$$(\bar{u} - c) \left[\frac{d^2 \psi_o}{dz^2} - k^2 \psi_o \right] - \psi_o \frac{d^2 \bar{u}}{dz^2} - g \frac{\varphi_o}{\tilde{\rho}} = o. \quad (6.367)$$

Um φ_o zu eliminieren, stellt man zunächst Glg. (6.365) nach σ_o um und erhält

$$\sigma_o = \frac{\psi_o}{\bar{u} - c} \frac{d\bar{\sigma}}{dz}. \quad (6.368)$$

O. B. d. A. kann man das Referenzniveau in das gerade betrachtete Niveau legen und $\varphi_o = \sigma_o$ verwenden. Dies ergibt eingesetzt

$$(\bar{u} - c) \left[\frac{d^2 \psi_o}{dz^2} - k^2 \psi_o \right] - \psi_o \frac{d^2 \bar{u}}{dz^2} - \frac{\psi_o}{\bar{u} - c} \frac{g}{\tilde{\rho}} \frac{d\bar{\sigma}}{dz} = o. \quad (6.369)$$

Hier setzt man die Brunt-Väisälä-Frequenz

$$N^2 := -\frac{g}{\tilde{\rho}} \frac{d\bar{\sigma}}{dz} \quad (6.370)$$

ein und erhält

$$(\bar{u} - c) \left(\frac{d^2}{dz^2} - k^2 \right) \psi + \left(\frac{N^2}{\bar{u} - c} - \frac{d^2 \bar{u}}{dz^2} \right) \psi = o. \quad (6.371)$$

Diese Gleichung bezeichnet man als *Taylor-Goldstein-Gleichung*. Es handelt sich um ein Eigenwertproblem $\{\psi, c\}$ an die Funktion ψ mit dem Eigenwert c abhängig von $\bar{u}(z)$. Ist $\{\psi, c\}$ eine Lösung, so ist $\{\psi^*, c^*\}$ ebenfalls eine Lösung. Ein postiver Imaginärteil von c bedeutet, dass ψ eine instabile Lösung ist. Eine Scherung $\bar{u} = \bar{u}(z)$ ist genau dann stabil, wenn alle Lösungen von Glg. (6.371) reelle Eigenwerte haben. Man geht nun weiter davon aus, dass bei $z = 0, H$ die Randbedingungen $w = o$ gelten, daraus folgt

$$\psi(o) = \psi(H) = o. \quad (6.372)$$

Nun definiert man φ durch

$$\psi = \sqrt{\bar{u} - c} \varphi. \quad (6.373)$$

Differenzieren nach z ergibt

$$\frac{d\psi}{dz} = \frac{i}{2} \frac{1}{\sqrt{\bar{u} - c}} \varphi \frac{d\bar{u}}{dz} + \sqrt{\bar{u} - c} \frac{d\varphi}{dz}, \quad (6.374)$$

$$\Rightarrow \frac{d^2 \psi}{dz^2} = \frac{i}{\sqrt{\bar{u} - c}} \frac{d\bar{u}}{dz} \frac{d\varphi}{dz} - \frac{i}{4} \frac{1}{\sqrt{\bar{u} - c}} \varphi \left(\frac{d\bar{u}}{dz} \right)^2 + \frac{i}{2} \frac{1}{\sqrt{\bar{u} - c}} \frac{d^2 \bar{u}}{dz^2} \varphi + \sqrt{\bar{u} - c} \frac{d^2 \varphi}{dz^2}. \quad (6.375)$$

Setzt man dies in Glg. (6.371) ein und dividiert durch $\sqrt{\bar{u} - c}$, erhält man

$$\frac{d}{dz} \left[(\bar{u} - c) \frac{dg}{dz} \right] - \left[k^2 (\bar{u} - c) + \frac{1}{2} \frac{d^2 \bar{u}}{dz^2} + \frac{1}{\bar{u} - c} \left(\frac{1}{4} \left(\frac{d\bar{u}}{dz} \right)^2 - N^2 \right) \right] g = 0. \quad (6.376)$$

Die Randbedingungen bleiben unter der Annahme $c \neq \bar{u}$

$$g(\alpha) = g(H) = 0. \quad (6.377)$$

Die Glg. (6.376) wird nun mit g^* multipliziert:

$$g^* \frac{d}{dz} \left[(\bar{u} - c) \frac{dg}{dz} \right] - \left[k^2 (\bar{u} - c) + \frac{1}{2} \frac{d^2 \bar{u}}{dz^2} + \frac{1}{\bar{u} - c} \left(\frac{1}{4} \left(\frac{d\bar{u}}{dz} \right)^2 - N^2 \right) \right] |g|^2 = 0. \quad (6.378)$$

Inegriert man den ersten Term von α bis H , folgt mittels partieller Integration

$$\int_{\alpha}^H g^* \frac{d}{dz} \left[(\bar{u} - c) \frac{dg}{dz} \right] dz = - \int_{\alpha}^H (\bar{u} - c) \left| \frac{dg}{dz} \right|^2 dz. \quad (6.379)$$

Glg. (6.378) wird nun von α nach H integriert:

$$\int_{\alpha}^H \left[N^2 - \frac{1}{4} \left(\frac{d\bar{u}}{dz} \right)^2 \right] \frac{|g|^2}{\bar{u} - c} dz = \int_{\alpha}^H (\bar{u} - c) \left(\left| \frac{dg}{dz} \right|^2 + k^2 |g|^2 \right) + \frac{1}{2} \frac{d^2 \bar{u}}{dz^2} |g|^2 dz. \quad (6.380)$$

Man schreibt nun für die Phasengeschwindigkeit

$$c = c_r + i c_i \quad (6.381)$$

mit $c_r, c_i \in \mathbb{R}$. Der Imaginärteil von Glg. (6.380) schreibt sich als

$$\begin{aligned} c_i \int_{\alpha}^H \left[N^2 - \frac{1}{4} \left(\frac{d\bar{u}}{dz} \right)^2 \right] \frac{|g|^2}{|\bar{u} - c|^2} dz &= -c_i \int_{\alpha}^H \left(\left| \frac{dg}{dz} \right|^2 + k^2 |g|^2 \right) dz \\ \Rightarrow c_i \int_{\alpha}^H \left[N^2 - \frac{1}{4} \left(\frac{d\bar{u}}{dz} \right)^2 \right] \frac{|g|^2}{|\bar{u} - c|^2} + \left| \frac{dg}{dz} \right|^2 + k^2 |g|^2 dz &= 0. \end{aligned} \quad (6.382)$$

Gilt $N^2 - \frac{1}{4} \left(\frac{d\bar{u}}{dz} \right)^2 > 0$ überall im Intervall (α, H) , so ist $c_i = 0$. Man definiert die *Richardson-Zahl* R_i durch

$$R_i := \frac{N^2}{\left(\frac{d\bar{u}}{dz} \right)^2}. \quad (6.383)$$

Die Frequenz

$$M := \frac{d\bar{u}}{dz} \quad (6.384)$$

bezeichnet man als *Prandtl-Frequenz*. Die Bedingung

$$R_i > \frac{1}{4} \text{ überall in } (\alpha, H) \quad (6.385)$$

ist hinreichend für Stabilität.

6.5.4 Thermische Instabilität

Die Atmosphäre habe an einem gegebenen Punkt die Schichtung $T = T(z)$. Üblicherweise ist

$$\frac{\partial T}{\partial z} < 0, \quad (6.386)$$

bei $\frac{\partial T}{\partial z} > 0$ spricht man von einer *Inversion*. Der trockenadiabatische Temperaturgradient ist nach Glg. (3.184) durch

$$\Gamma_d = \frac{g}{c(p)} \quad (6.387)$$

definiert. Im Fall

$$\frac{\partial T}{\partial z} < -\Gamma_d \quad (6.388)$$

ist die Schichtung *lokal instabil*, solange die Luft dabei ungesättigt bleibt.

Ist die Luft jedoch gesättigt, findet bei der Abkühlung, die infolge der Hebung stattfindet, Kondensation oder Resublimation statt, wobei Phasenübergangswärme frei wird. Lenkt man das Teilchen bei z vertikal aus, ergibt sich das *lifted condensation level (LCL)* z_{LCL} , in der es gesättigt wäre, also erfüllt es die Gleichung

$$p_v^{(S)}(T(z) - \Gamma_d(z_{LCL} - z)) \equiv p_v(z) \left(1 - \frac{\Gamma_d(z_{LCL} - z)}{T(z)} \right)^{\frac{g}{R_d \Gamma_d}} \quad (6.389)$$

Man geht bei der anschließenden weiteren Hebung zunächst davon aus, dass das komplette Wasser in der Wolke verbleibt, was man als *reversible Feuchtadiabate* bezeichnet. Bei der *irreversiblen Feuchtadiabate*, worauf in Absch. 6.5.4.3 näher eingegangen wird, wird hingegen davon ausgegangen, dass das gesamte Wasser ausregnet. Dies soll nun betrachtet werden. Nehme also an, dass die Luft in einem Teilchen mit dem Volumen V und der konstanten Masse m aus einem Gemisch aus feuchter Luft und Kondensationsprodukten einer Phase besteht, wobei alle Komponenten die gleiche Temperatur T haben sollen. Mit dem Ersten Hauptsatz der Thermodynamik Glg. (3.167) erhält man

$$\begin{aligned} c^{(v)} \frac{dT}{dz} + p \frac{d}{dz} \frac{1}{\varrho} &= \frac{1}{\varrho} \frac{dq}{dz} \\ \Rightarrow \frac{dT}{dz} &= \frac{1}{c^{(v)}} \left[\frac{1}{\varrho} \frac{dq}{dz} - p \frac{d}{dz} \frac{1}{\varrho} \right] = \frac{1}{\varrho c^{(v)}} \left[\frac{dq}{dz} + \frac{p}{\varrho} \frac{d\varrho}{dz} \right] = -\frac{g}{c^{(v)}} \left[\frac{dq}{dp} + \frac{p}{\varrho} \frac{d\varrho}{dp} \right]. \end{aligned} \quad (6.390)$$

Hierbei wurde die hydrostatische Grundgleichung eingesetzt. Für die Wärmeleistung pro Volumen infolge des Phasenübergangs dq gilt

$$dq = \frac{c_e}{V} dm_e \quad (6.391)$$

mit m_e als kondensiert oder resublimierter Masse und c_e als Phasenübergangswärme. Mit der Zustandsgleichung für Wasserdampf gilt

$$\begin{aligned} p_v &= \varrho_v R_v T \Rightarrow m_v = \frac{V_v p_v}{R_v T} = \frac{V_h p_v}{R_v T} = \frac{m_h R_h p_v^{(S)}(T)}{p R_v} \\ \Rightarrow dm_e &= -dm_v = \frac{m_h R_h p_v^{(S)}(T)}{p R_v} \left(\frac{dp}{p} - \frac{dp_v^{(S)}}{p_v^{(S)}} + \frac{dm_e}{m_h} \right) \\ \Rightarrow dm_e \left(1 - \frac{R_h p_v^{(S)}(T)}{p R_v} \right) &= \frac{m_h R_h p_v^{(S)}(T)}{p R_v} \left(\frac{dp}{p} - \frac{dp_v^{(S)}}{p_v^{(S)}} \right) \\ \Rightarrow dm_e &= m_h \frac{\frac{dp}{p} - \frac{dp_v^{(S)}}{p_v^{(S)}}}{\frac{p R_v}{R_h p_v^{(S)}} - 1}. \end{aligned} \quad (6.392)$$

Hierbei ist $p_v^{(S)} = p_v^{(S)}(T)$ der Sättigungsdampfdruck. Daraus folgt

$$\begin{aligned}
 dq &= \frac{c_c}{T} \frac{dp - \frac{p}{p_v^{(S)}} dp_v^{(S)}}{\frac{p R_v}{p_v^{(S)}} - R_h} \\
 \Rightarrow \frac{dq}{dp} &= \frac{c_c}{\frac{p R_v T}{p_v^{(S)}} - R_h T} \left(1 - \frac{p}{p_v^{(S)}} \frac{dp_v^{(s)}}{dp} \right) = \frac{c_c}{\frac{p R_v T}{p_v^{(S)}} - T R_h} \left(1 + \frac{1}{g \rho} \frac{dT}{dz} \frac{p}{p_v^{(S)}} \frac{dp_v^{(s)}}{dT} \right) \\
 &= \frac{c_c}{T p R_v - T p_v^{(S)} R_h} \left(p_v^{(S)} + \frac{p}{g \rho} \frac{dT}{dz} \frac{dp_v^{(s)}}{dT} \right) \\
 &= \frac{c_c p_v^{(S)}}{T p R_v - T p_v^{(S)} R_h} + \frac{p}{T g \rho} \frac{c_c}{p R_v - p_v^{(S)} R_h} \frac{dp_v^{(s)}}{dT} \frac{dT}{dz}.
 \end{aligned} \tag{6.393}$$

Setzt man dies in Glg. (6.390) ein und wendet ein weiteres Mal die Kettenregel an, erhält man

$$\begin{aligned}
 \frac{dT}{dz} &= -\frac{g}{c^{(v)}} \left[\frac{c_c p_v^{(S)}}{T p R_v - T p_v^{(S)} R_h} \right. \\
 &\quad \left. + \frac{p}{T g \rho} \frac{c_c}{p R_v - p_v^{(S)} R_h} \frac{dp_v^{(s)}}{dT} \frac{dT}{dz} + \frac{p}{\rho} \frac{\partial \rho}{\partial p} - \frac{p}{g \rho^2} \frac{\partial \rho}{\partial T} \frac{dT}{dz} \right].
 \end{aligned} \tag{6.394}$$

Nun braucht man eine Zustandsgleichung. Für die Dichte gilt

$$\rho = \rho_h + \rho_c = \frac{p}{R_h T} + \rho_c. \tag{6.395}$$

Man erhält damit

$$\begin{aligned}
 \frac{dT}{dz} &= \frac{g}{c^{(v)}} \left[-\frac{c_c p_v^{(S)}}{T p R_v - T p_v^{(S)} R_h} \right. \\
 &\quad \left. - \frac{p}{T g \rho} \frac{c_c}{p R_v - p_v^{(S)} R_h} \frac{dp_v^{(s)}}{dT} \frac{dT}{dz} - \frac{p}{\rho R_h T} - \frac{p^2}{R_h g \rho^2 T^2} \frac{dT}{dz} \right] \\
 &= \frac{g}{c^{(v)}} \left[-\frac{c_c p_v^{(S)}}{T p R_v - T p_v^{(S)} R_h} - \frac{p}{T g \rho} \frac{c_c}{p R_v - p_v^{(S)} R_h} \frac{dp_v^{(s)}}{dT} \frac{dT}{dz} \right. \\
 &\quad \left. - 1 + \frac{\rho_c}{\rho} - \frac{1}{g} \left(1 - \frac{\rho_c}{\rho} \right) \frac{p}{\rho T} \frac{dT}{dz} \right].
 \end{aligned} \tag{6.396}$$

Dies stellt man nun nach $\frac{dT}{dz}$ um:

$$\begin{aligned}
 \frac{dT}{dz} &= \frac{d}{dz} \left(1 + \frac{p}{T c^{(v)} \rho} \frac{c_c}{p R_v - p_v^{(S)} R_h} \frac{dp_v^{(s)}}{dT} + \frac{1}{c^{(v)}} \left(1 - \frac{\rho_c}{\rho} \right) \frac{p}{\rho T} \right) \\
 &= \frac{g}{c^{(v)}} \left(\frac{\rho_c}{\rho} - 1 \right) - \frac{g c_c p_v^{(S)}(T)}{c^{(v)} T (R_v p - p_v^{(S)} R_h)} \\
 \Rightarrow \frac{dT}{dz} &= -\frac{g}{c^{(p)}} \frac{\frac{1}{\rho} + \frac{c_c p_v^{(S)}}{T (R_v p - p_v^{(S)} R_h)}}{\frac{c^{(v)}}{c^{(p)}} + \frac{p}{T \rho c^{(p)}} \frac{c_c}{p R_v - p_v^{(S)} R_h} \frac{dp_v^{(s)}}{dT} + \left(1 - \frac{\rho_c}{\rho} \right) \frac{p}{c^{(p)} T \rho}} \\
 &= -F_d \beta
 \end{aligned} \tag{6.397}$$

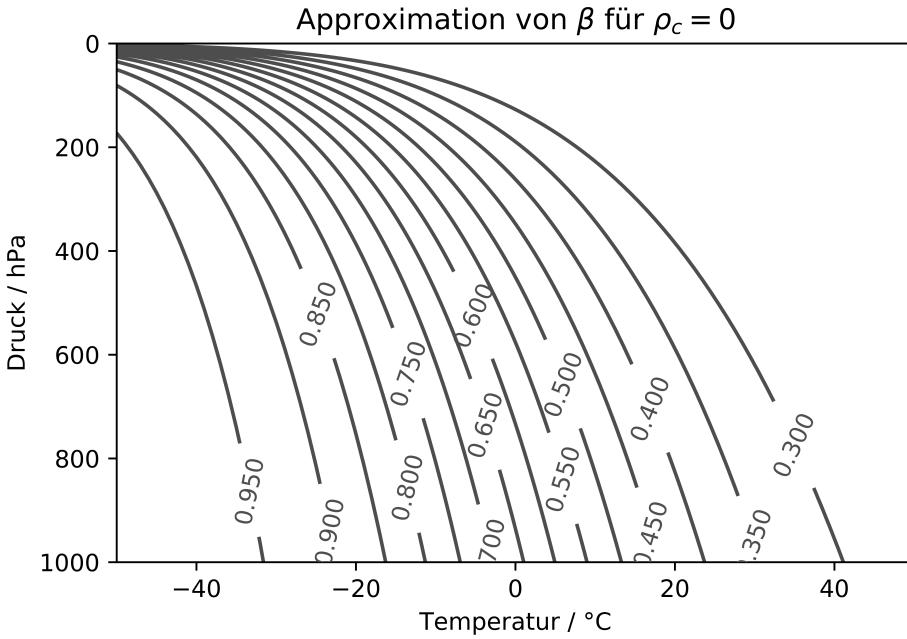


Abbildung 6.5: Approximation von β gemäß Glg. (6.401).

Hierbei ist

$$\beta = \beta(p, T, \rho_c) := \frac{\mathbf{I} - \frac{\rho_c}{\rho} + \frac{c_v p_v^{(S)}}{T(R_v p - p_v^{(S)} R_h)}}{\frac{c_v^{(p)}}{c^{(p)}} + \frac{p}{T_f c^{(p)}} \frac{c_v}{p R_v - p_v^{(S)} R_h} \frac{dp_v^{(S)}}{dT} + \left(\mathbf{I} - \frac{\rho_c}{\rho} \right) \frac{p}{c^{(p)} T_f}}. \quad (6.398)$$

Für die Ableitung $\frac{dp_v^{(S)}}{dT}$ kann die Clausius-Clapeyron-Gleichung eingesetzt werden. Der sogenannte *feuchtadiabatische Temperaturgradient* wird nun durch

$$\Gamma_h := \Gamma_d \beta \quad (6.399)$$

definiert. Setzt man in Glg. (6.398) $\rho_c = 0, R_h = R_d$ sowie $p_v \ll p$ ein, folgt der in der Literatur häufig angetroffene Ausdruck

$$\frac{dT}{dz} = -\frac{g}{c^{(p)}} \frac{\mathbf{I} + \frac{c_v p_v^{(S)}}{T R_v p}}{\mathbf{I} + \frac{R_d c_v}{R_v c^{(p)} p} \frac{dp_v^{(S)}}{dT}} = -\Gamma_d \beta' \quad (6.400)$$

mit einem vereinfachten Faktor

$$\begin{aligned} \beta' &\approx \beta'(p, T) := \frac{\mathbf{I} + \frac{c_v p_v^{(S)}}{T R_v p}}{\mathbf{I} + \frac{\varepsilon' c_v}{p c^{(p)}} \frac{dp_v^{(S)}}{dT}} \stackrel{(2.877)}{\approx} \frac{\mathbf{I} + \frac{c_v p_v^{(S)}}{T R_v p}}{\mathbf{I} + \frac{\varepsilon' c_v^* p_v^{(S)}}{R_v c^{(p)} T^* p}} \\ &\stackrel{(2.814)}{\approx} \frac{\mathbf{I} + \frac{c_v r^{(S)}}{T R_d}}{\mathbf{I} + \frac{c_v^* p_v^{(S)}}{R_v c^{(p)} T^*}}, \end{aligned} \quad (6.401)$$

welcher nicht mehr von der Dichte des bereits auskondensierten Wassers abhängt. Im Fall $\frac{dp_v^{(S)}}{dT} = p_v^{(S)} = 0$ folgt

$$\Gamma_h = \Gamma_d. \quad (6.402)$$

Im Fall gesättigter Luft und

$$\frac{\partial T}{\partial z} < -\Gamma_h \quad (6.403)$$

ist die Schichtung ebenfalls *lokal instabil*.

6.5.4.1 Pseudopotentielle Temperatur

Um die pseudopotentielle Temperatur θ_e eines Teilchens zu erhalten, sind drei Schritte notwendig:

1. Hebe das Teilchen trockenadiabatisch auf sein LCL.
2. Hebe das Teilchen irreversibel-feuchtadiabatisch in eine unendliche Höhe.
3. Führe das Teilchen trockenadiabatisch auf den Referenzdruck p_0 . Die dann erhaltene Temperatur ist θ_e .

6.5.4.2 Reversibel-pseudopotentielle Temperatur

Die reversibel-pseudopotentielle Temperatur ist analog zur pseudopotentiellen Temperatur definiert, nur dass bei Schritt 2. aus Absch. 6.5.4.1 eine reversible Feuchtadiabate verfolgt wird.

6.5.4.3 CAPE

Die in diesem Abschnitt durchgeführten Herleitungen beziehen sich auf eine vertikale Luftsäule, wobei dynamische, d. h. durch das Geschwindigkeitsfeld entstehende Effekte, nicht berücksichtigt werden. Man definiert eine Funktion $f(z, z')$ als die spezifische Kraft, also die Beschleunigung, die auf das Teilchen bei z wirkt, wenn man es adiabatisch auf das Niveau z' bringt und von einer hydrostatischen Atmosphäre ausgeht, also

$$f(z, z') := -\frac{1}{\rho'(z, z')} \frac{\partial p(z')}{\partial z} - g = \frac{g\rho(z')}{\rho'(z, z')} - g = g \frac{\rho(z') - \rho'(z, z')}{\rho'(z, z')}, \quad (6.404)$$

wobei $\rho'(z, z')$ die Dichte des Teilchens bei z ist, nachdem man es adiabatisch nach z' verschoben hat. Man definiert außerdem eine Funktion $\tilde{F}(z, z')$ durch

$$\tilde{F}(z, z') := g \int_z^{z'} \frac{\rho(z'') - \rho'(z, z'')}{\rho'(z, z'')} dz'' \quad (6.405)$$

als die Arbeit, die die Schichtung an einem Teilchen geleistet hat, welches adiabatisch von z nach z' ausgelenkt wurde. Üblicherweise wählt man $z = z_{2m} := Z_{SFC} + 2$ m, man definiert

$$F(z) := g \int_{z_{2m}}^z \frac{\rho(z') - \rho'(z')}{\rho'(z')} dz' \quad (6.406)$$

mit dem Bezeichnungsmisbrauch

$$\rho'(z') := \rho'(z_{2m}, z'). \quad (6.407)$$

Für den Integranden wird ebenso

$$f(z') := g \frac{\rho(z') - \rho'(z')}{\rho'(z')} \quad (6.408)$$

definiert. In Termen der Funktionen F und f lassen sich viele der üblicherweise im Zusammenhang mit Konvektion verwendeten Größen definieren. z_T sei die als bekannt vorausgesetzte Tropopausenhöhe. Man definiert die sogenannte *konvektiv verfügbare potentielle Energie* CAPE durch

$$\text{CAPE} := \int_{z_{2m}}^{z_T} \Theta(f(z')) dz', \quad (6.409)$$

wobei Θ die Θ -Funktion bezeichnet. Im Falle eines idealen Gases kann man für f notieren

$$f(z') := g \frac{\frac{1}{T} - \frac{1}{T'}}{\frac{1}{T'}} = g \frac{T' - T}{T} = g \frac{\theta' - \theta}{\theta}. \quad (6.410)$$

Das *level of free convection* z_{LFC} ist die Höhe, in der das adiabatisch aufstiegende Teilchen zum ersten mal leichter ist als die Umgebung

$$z_{\text{LFC}} := \inf\{z | f(z) > 0\}. \quad (6.411)$$

Wenn das Teilchen diese Höhe erreicht, wird es weiter aufsteigen, was man als *freie Konvektion* bezeichnet, also Konvektion, die auch ohne dynamischen Antrieb stattfinden würde. Analog bezeichnet man

$$z_{\text{EL}} := \sup\{z | f(z) > 0, z < z_{\text{LFC}}\} \quad (6.412)$$

als *Gleichgewichtsniveau (equilibrium level)*. Die tiefe Stratosphäre wurde sicherheitshalber ausgeklammert. Dies ist die Höhe, in der ein frei aufsteigendes Teilchen wieder schwerer wäre als seine Umgebung. Häufig wird in Glg. (6.409) die Θ -Funktion weggelassen und nur von z_{LFC} bis z_{EL} integriert, was genau dann richtig ist, wenn in genau einem Höhenintervall thermische Labilität vorliegt, was häufig der Fall ist. Die *maximale Wolkenobergrenze* ist definiert als die Höhe, in der ein solches Teilchen seine kinetische Energie wieder verloren hätte, also

$$z_{\text{MCT}} := \inf\{z | \tilde{F}(z_{\text{LFC}}, z) < 0\}. \quad (6.413)$$

Das Phänomen $z_{\text{MCT}} > z_{\text{EL}}$ führt bei hochreichender Konvektion zur Ausprägung von Schichtungswellen an der Tropopause (*overshooting tops*), was generell überall dort der Fall ist, wo ein stabil auf ein labil geschichtetes Höhenintervall folgt.

Hat ein Teilchen in zwei Metern Höhe die sogenannte *Auslösetemperatur* erreicht, kann es auch ohne dynamischen Antrieb in das LFC aufsteigen, also

$$0 \equiv g \int_{z_{2m}}^{z_{\text{LFC}}} \frac{\varrho(z') - \tilde{\varrho}'(z')}{\tilde{\varrho}'(z')}, \quad (6.414)$$

wobei $\tilde{\varrho}'(z')$ die Dichte des adiabatisch von z_{2m} nach z' gehobenen Teilchens ist, was in zwei Metern Höhe die Auslösetemperatur hätte. Die Energie CIN, die dabei überwunden werden muss, also

$$\text{CIN} := \tilde{F}(z_{2m}, z_{\text{LFC}}). \quad (6.415)$$

bezeichnet man als *konvektive Schranke* oder *convective inhibition*. Die Höhe, in der ein auf die Auslösetemperatur aufgeheiztes Teilchen beim adiabatischen Aufstieg gesättigt wäre, bezeichnet man als *convective condensation level (CCL)*. Dies ist mindestens so groß wie das LCL, also

$$z_{\text{CCL}} \geq z_{\text{LCL}}. \quad (6.416)$$

7 SYNOPTIK UND MESO- α -SAKLA DER EXTRATROPEN

Die Gebiete zwischen den *Wendekreisen*, die bei Breiten $\pm\beta$ liegen, werden als *Tropen* bezeichnet, die Bereiche außerhalb dieses Streifens als *Extratropen*. Die Gebiete bei Breiten jenseits der *Polarkreise*, die sich bei Breiten $\pm(\frac{\pi}{2} - \beta)$ befinden, werden als *hohe Breiten* bezeichnet. Die Bereiche zwischen den Tropen und den hohen Breiten bezeichnet man als *mittlere Breiten*. Die Dynamik der Extratropen unterscheidet sich wesentlich von der der Tropen, da in ersteren die diabatischen Flüsse durch die schwächere Konvektion und Strahlung kleiner sind und die geostrophische Annahme gerechtfertigter ist. Die Dynamik der Tropen enthält also gewisse Schwierigkeiten und wird daher separat in Kap. 8 untersucht.

7.1 Quasigeostrophie

Die Geostrophie gilt in nullter Ordnung auf der synoptischen Skala in den Extratropen, Folgerungen daraus wurden in Absch. 4.3 besprochen. In Absch. 6.5.2 wurde bereits das quasigeostrophische Gleichungssystem, bestehend aus Tendenzgleichung Glg. (6.224) und ω -Gleichung Ggl. (6.229), abgeleitet, welches auf zonale Kanäle in den Extratropen angewandt werden kann, deren meridionale Ausdehnung eine Anwendung der β -Ebenen-Approximation erlaubt. Es wurde gezeigt, dass die baroklinen Wellen, die man als Lösungen eines quasigeostrophischen linearisierten Zweischichtmodells findet, instabil sind. Der hierdurch angestoßene Prozess ist die Zyklogenese, was hier näher behandelt werden soll. Man definiert zunächst die *Geopotentialtendenz* durch

$$\chi := \frac{\partial \varphi}{\partial t}, \quad (7.1)$$

7.1.1 Tendenzgleichung

Mit Glg. (7.1) kann man Glg. (6.224) wie folgt umschreiben:

$$\underbrace{\left[\Delta + \frac{f_o^2}{\sigma} \frac{\partial^2}{\partial p^2} \right] \chi}_{=:A} = \underbrace{-f_o v_g \beta}_{=:B} - \underbrace{V_g \cdot \nabla (\Delta \varphi)}_{=:C} - \underbrace{\frac{f_o^2}{\sigma} \frac{\partial}{\partial p} \left[V_g \cdot \nabla \frac{\partial \varphi}{\partial p} \right]}_{=:D} \quad (7.2)$$

Dabei wurde im Term D eine Ableitung nach p herausgezogen, wobei Glg. (4.26) ausgenutzt wurde, da dies den Term anschaulicher macht. Diese Gleichung soll nun konzeptionell untersucht werden. Geht man davon aus, dass χ aus nur einer einzigen Fourier-Komponente im dreidimensionalen Raum besteht, folgt

$$A \sim -\chi \sim \text{Zyklogenese}, \quad (7.3)$$

wobei mit Zyklogenese hier ein Absinken der Druckfläche gemeint ist. In den Extratropen findet man häufig meridionale Wellen, die einem zonalen Grundstrom U überlagert sind, daher macht man für das Geopotential φ den Ansatz

$$\varphi(x, y, p) = -U f_o y + \frac{\hat{v} f_o L}{2\pi} \sin\left(\frac{2\pi}{L} x\right) \sin(ap + b) + \varphi_o(p), \quad (7.4)$$

wobei \hat{v} die Geschwindigkeitsamplitude der meridionalen Schwingung bezeichnet. Die linere Funktion $ap + b$ ermöglicht eine Phasenverschiebung der Störung mit der Höhe; φ_o steht für einen Hintergrundzustand. Für den Term B findet man in diesem Fall

$$B = -f_o \beta \hat{v} \cos\left(\frac{2\pi}{L} x\right). \quad (7.5)$$

Dieser Term führt also überall dort zu Zyklogenese, wo v_g negativ ist, also stromaufwärts des Tropos und stromabwärts des Rückens. Er trägt also zu retrograder Progression bei. Term B ist die Advektion planetarer Vorticity. Für den Ausdruck C, welcher die Advektion relativer Vorticity ist, berechnet man zunächst

$$\Delta \varphi = -\frac{2\pi}{L} \hat{v} f_o \sin\left(\frac{2\pi}{L} x\right), \quad (7.6)$$

wobei daran erinnert sei, dass $\Delta \varphi$ sich hier nur auf die Horizontale bezieht. Hieraus folgt

$$C = U \frac{4\pi^2}{L^2} \hat{v} f_o \cos\left(\frac{2\pi}{L} x\right) = -\frac{2\pi U}{L \beta} B. \quad (7.7)$$

Dieser Term führt also stromabwärts des Troges und stromaufwärts des Rückens zu Zyklogenese, anderswo zu Antizyklonen. Er trägt also zu normaler Progression bei und nimmt mit der Wellenlänge ab. Bei einer Grenzwellenlänge

$$\tilde{L} = \frac{2\pi U}{\beta} \quad (7.8)$$

kompensieren sich B und C , die Welle ist stationär. Noch längere Wellen propagieren retrograd. Beide Terme B und C verschwinden an den Achsen der Druckgebilde, also tragen sie ausschließlich zu deren Verlagerung bei, nicht jedoch zu ihrer Vertiefung. Hierfür ist der Term D zuständig. Das Skalarprodukt $V_g \cdot \nabla \frac{\partial \varphi}{\partial p}$ ist die horizontale Temperaturadvektion, wie sich aus der hydrostatischen Grundgleichung in der Form Glg. (4.13) ergibt. Daher bezeichnet man D auch als negative *differenzielle Temperaturadvektion*. Es gilt

$$D = \begin{cases} \text{postiv, falls Kaltluftadvektion mit der Tiefe zunimmt,} \\ \text{negativ, falls Warmluftadvektion mit der Tiefe zunimmt.} \end{cases} \quad (7.9)$$

Warmluftadvektion in der Höhe und Kaltluftadvektion in der Tiefe führt also zu Zyklogenese, während Kaltluftadvektion in der Höhe und Warmluftadvektion in der Tiefe zu Antizyklonen führt. Dies ist anschaulich, da wärmere Luft ein größeres spezifisches Volumen hat.

7.1.2 ω -Gleichung

7.2 Semigeostrophie

Die semigeostrophische Annahme ist eine Relaxation der quasigeostrophischen Annahme. Als Teil des Lösungsspektrums erhält man Flächen im Raum besonderer Baroklinität, sogenannte *Fronten*.

7.3 PV-Denken

8.1 Skalenanalyse

8.2 Zyklogenese

9 TURBULENZ

Es gibt keine mathematisch exakte Definition dafür, ob ein Strömungsfeld turbulent ist oder nicht. Es kann davon ausgegangen werden, dass jedes Strömungsfeld, wenn man es nur aus genügend großer Entfernung betrachtet, turbulent aussieht. Zoomt man jedoch weit genug hinein, wird man meistens eine Skala finden, auf der des Feld einen *laminaren* Eindruck macht, was man als das Gegenteil von Turbulenz versteht. Ist diese Skala die molekulare Skala, liegt *volle Turbulenz* vor. Seien \bar{f} ein Mittelungsoperator und f' eine Funktion von Ort und Zeit, die man in der Form

$$f \equiv \bar{f} + f' \quad (9.1)$$

zerlegt; hierzu definiert man die Fluktuation oder Turbulenz durch

$$f' := f - \bar{f}. \quad (9.2)$$

Wenn die Aussagen

$$\overline{\frac{\partial f}{\partial x_i}} = \frac{\partial \bar{f}}{\partial x_i}, \quad (9.3)$$

$$\overline{\frac{\partial f}{\partial t}} = \frac{\partial \bar{f}}{\partial t}, \quad (9.4)$$

$$\overline{f'g} = o \quad (9.5)$$

mit einem beliebigen Feld g gelten, bezeichnet man \bar{f} als *Reynolds-Operator* und die entsprechende Mittelung als *Reynolds-Mittelung*. Man macht sich leicht klar, dass hieraus auch die beiden Aussagen

$$\bar{f}' = o, \quad (9.6)$$

$$\bar{\bar{f}} = \bar{f} \quad (9.7)$$

folgen. Man kümmert sich an dieser Stelle nicht darum, wie ein solcher Operator konkret aussehen könnte, in Absch. 9.2 wird festgestellt werden, dass die üblichen Mittelungsoperatoren keine Reynolds-Operatoren sind. Wendet man dies auf das trockenadiabatische Gleichungssystem an, folgt

$$\frac{\partial \bar{U}}{\partial t} = -(\bar{U} \cdot \nabla) \bar{U} - (\bar{U}' \cdot \nabla) \bar{U}' - \bar{a} \frac{\partial \bar{p}}{\partial x} - \bar{a}' \frac{\partial \bar{p}'}{\partial x} - \bar{f} \times \bar{U} + \bar{g}, \quad (9.8)$$

$$\frac{\partial \bar{\theta}}{\partial t} = -\bar{U} \cdot \nabla \bar{\theta} - \bar{U}' \cdot \nabla \bar{\theta}, \quad (9.9)$$

$$\frac{\partial \bar{\rho}}{\partial t} = -\bar{\rho} \nabla \cdot \bar{U} - \bar{U} \cdot \nabla \bar{\rho} - \bar{\rho}' \nabla \cdot \bar{U}' - \bar{U}' \cdot \nabla \bar{\rho}', \quad (9.10)$$

$$\bar{p}\bar{a} = R_d \bar{T} - \bar{p}'\bar{a}'. \quad (9.11)$$

Die prognostischen Gleichungen der gemittelten Felder sind also gegenüber denen der unmittelten Felder um Terme der Form $\bar{f}'g'$ korrigiert, wobei f', g' linear in den Feldern und ihren Ableitungen sind. Diese Terme bezeichnet man als die Konvergenzen der *turbulenten Korrelationsflüsse*. Diese sind natürlich von der Größe der Menge abhängig, über die gemittelt wird, d. h. im Falle eines numerischen Modells auflösungsabhängig. Im Falle einer immer kleiner werdenden Mittelungsmege verlieren die Kovarianzterme an Bedeutung, bis sie schließlich ganz verschwinden.

Für die turbulenten Größen liegen jedoch keine prognostischen Gleichungen vor, was man als *Schließungsproblem* bezeichnet. Um die Korrelationsterme in der Impulsgleichung näher zu spezifizieren, wendet man den Reynolds-Mittelungsoperator auf Glg. an, man erhält so

$$\frac{\partial (\varrho \bar{U})}{\partial t} + \nabla p + \nabla \cdot \Pi + \nabla \cdot \tilde{\Pi} - \varrho \bar{g} = o, \quad (9.12)$$

wobei die Horizontalstriche der Übersichtlichkeit halber weggelassen wurden. Außerdem ist der *Turbulenzkorrelationstensor* $\tilde{\Pi}$ durch

$$\tilde{\Pi} := \varrho \begin{pmatrix} \overline{u'u'} & \overline{u'v'} & \overline{u'w'} \\ \overline{v'u'} & \overline{v'v'} & \overline{v'w'} \\ \overline{w'u'} & \overline{w'v'} & \overline{w'w'} \end{pmatrix} =: \begin{pmatrix} -\tau_{x,x} & -\tau_{x,y} & -\tau_{x,z} \\ -\tau_{y,x} & -\tau_{y,y} & -\tau_{y,z} \\ -\tau_{z,x} & -\tau_{z,y} & -\tau_{z,z} \end{pmatrix} \quad (9.13)$$

definiert. Es wurde von der gerechtfertigten Annahme

$$\left| \frac{\rho'}{\bar{\rho}} \right| \ll \left| \frac{u'}{\bar{u}} \right| \quad (9.14)$$

ausgegangen. $-\nabla \cdot \tilde{\Pi}$ liefert die *Eddy-Stress-Terme*, die sich in der Impulsgleichung niederschlagen und anstatt der $-(\bar{U}' \cdot \nabla) \bar{U}' - a' \frac{\partial p'}{\partial x}$ verwendet werden. Die $\tau_{i,j}$ sind jedoch immernoch unbekannte Größen, um diese zu parametrisieren (s. hierzu auch Absch. 9.3), verwendet man den *Mischungswegansatz*. Hierbei geht man davon aus, dass Druckgradient und Coriolis-Kraft keine bedeutende Rolle spielen, woraus

$$\frac{DU}{Dt} = 0 \quad (9.15)$$

folgt, was man als *Burgers-Gleichung* bezeichnet. Ihr entsprechend bewegt sich jedes Fluidteilchen auf einer geradlinig-gleichförmigen Bahn. Dies ist jedoch kein vollständig sinnvoller Ansatz, es ergibt sich daraus jedoch eine sinnvolle Möglichkeit, die u', v', w' zu parametrisieren. Bewegt sich ein Teilchen von z nach $z + l$ und behält dabei seine Horizontalgeschwindigkeit \bar{V} bei, gilt nach Glg. (9.15)

$$V'(z + l) = V(z + l) - \bar{V}(z + l) = \bar{V}(z) - \bar{V}(z + l) = \bar{V}(z + l) - l \frac{\partial \bar{V}}{\partial z} - \bar{V}(z + l) = -l \frac{\partial \bar{V}}{\partial z} \quad (9.16)$$

Man beachte hierbei auch das Vorzeichen von l , welches im Fall nach unten gerichteter Bewegung als negativ verstanden werden muss. Somit folgt beispielsweise

$$\tau_{x,z} = -\rho \bar{u}' w' = \rho \bar{w}' l \frac{\partial \bar{u}}{\partial z}. \quad (9.17)$$

Im Falle einer indifferent geschichteten Atmosphäre gilt $|w'| \sim |V'|$, was der Tatsache entspricht, dass in diesem Fall die horizontale Skala der Wirbel genauso groß ist wie die vertikale, man setzt daher

$$w' = l \left| \frac{\partial \bar{V}}{\partial z} \right|. \quad (9.18)$$

Daraus folgt

$$\tau_{x,z} = -\rho \bar{u}' w' = \rho \bar{l}^2 \left| \frac{\partial \bar{V}}{\partial z} \right| \frac{\partial \bar{u}}{\partial z} \equiv A_z \frac{\partial \bar{u}}{\partial z}. \quad (9.19)$$

Den Koeffizienten

$$A_z := \rho \bar{l}^2 \left| \frac{\partial \bar{V}}{\partial z} \right| \quad (9.20)$$

bezeichnet man als *Eddy-Austauschkoeffizienten*.

Die *planetare Grenzschicht* ist definiert als diejenige untere Schicht der Atmosphäre, in der die *Bodenreibung*, d. h. die Existenz der Erdoberfläche, einen Einfluss hat. Als Kräftegleichgewicht setzt man hier an

$$-fv = -\frac{\rho}{\rho} \frac{\partial p}{\partial x} + \frac{\rho}{\rho} \frac{\partial \tau_{x,z}}{\partial z}, \quad (9.21)$$

$$fu = -\frac{\rho}{\rho} \frac{\partial p}{\partial y} + \frac{\rho}{\rho} \frac{\partial \tau_{y,z}}{\partial z}. \quad (9.22)$$

wobei die Mittelungsoperatoren der Übersichtlichkeit halber wieder weggelassen wurden. Ebenfalls unterschlagen wurden an dieser Stelle die horizontalen Korrelationsflüsse. Geht man außerdem davon aus, dass die Dichte

innerhalb des betrachteten Höhenintervalls nur wenig variiert, folgt

$$-fv = -\frac{\mathbf{i}}{\rho} \frac{\partial p}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{\tau_{x,z}}{\rho} \right), \quad (9.23)$$

$$fu = -\frac{\mathbf{i}}{\rho} \frac{\partial p}{\partial y} + \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{\tau_{y,z}}{\rho} \right). \quad (9.24)$$

Man nimmt nun an, dass die Bewegung nur eine x-Komponente hat und definiert die sogenannte *Reibungsgeschwindigkeit* $u_* > 0$ durch

$$u_* := \frac{\tau_{x,z}}{\rho} = \frac{A_z}{\rho} \frac{\partial \bar{u}}{\partial z} \quad (9.25)$$

Bisher wurde angenommen, dass die Mischungsweglänge l höhenunabhängig ist. Sehr nahe an der Erdoberfläche ist jedoch zu erwarten, dass die vertikale Ausdehnung der Wirbel mit der Höhe zunimmt, was man im einfachsten Fal über

$$l(z) = kz \quad (9.26)$$

ausdrücken kann, wobei die Zahl $k > 0$ als *von Karman-Konstante* bezeichnet wird. Diese hat einen typischen Wert von ≈ 4 . Glg. (9.26) ist nur bis zu einer gewissen Höhe gültig. Somit folgt

$$u_*^2 = k^2 z^2 \left| \frac{\partial \bar{u}}{\partial z} \right|^2, \quad (9.27)$$

also im Fall $\frac{\partial \bar{u}}{\partial z} > 0$

$$u_* = kz \frac{\partial \bar{u}}{\partial z}. \quad (9.28)$$

Die Lösung für $\bar{u}(z)$ ist das logarithmische Windprofil

$$\bar{u}(z) = \frac{u_*}{k} \ln \left(\frac{z}{z_0} \right) \quad (9.29)$$

Die Konstante $z_0 > 0$ ist die *Rauhigkeitslänge*, es gilt $\bar{u}(z_0) = 0$. Glg. (9.29) sollte überhaupt nur für $z > z_0$ angewandt werden.

Die Schicht, in der Glg. (9.26) eine gute Approximation ist, bezeichnet man als *Prandtl-Schicht*. Sie hat typischerweise Ausdehnungen von ein bis zwei freien Mischungsweglängen l . Nach unten hin ist sie begrenzt durch die *laminare Unterschicht*, welche im Bereich ~ 1 mm dick ist und in welcher molekulare Diffusion vorherrscht. Laminare Unterschicht und Prandtl-Schicht zusammengenommen bilden die *Oberflächenschicht*. Nach oben hin ist die Oberflächenschicht durch die *Eckman-Schicht* begrenzt.

9.1 Ekman-Transport

Der *Ekman-Transport* tritt überall dort auf, wo ein geostrophisches Medium auf eine horizontale Begrenzung trifft, an der die Adhäsionsbedingung gilt. Definiert man den *Eddy-Viskositäts-Koeffizienten* K durch

$$K := \frac{A_z}{\rho}, \quad (9.30)$$

schreibt sich Glg. (9.19) als

$$\tau_{x,z} = K \rho \frac{\partial \bar{u}}{\partial z}. \quad (9.31)$$

Unter der Voraussetzung $\frac{\partial}{\partial z} (K \rho) = 0$, was nur oberhalb der Prandtl-Schicht eine brauchbare Annahme ist, gilt

$$\frac{\mathbf{i}}{\rho} \frac{\partial \tau_{x,z}}{\partial z} = K \frac{\partial^2 \bar{u}}{\partial z^2}. \quad (9.32)$$

Die Glg.en (9.21) - (9.22) werden dann zu

$$\text{o} = f\tilde{v} + K \frac{\partial^2 \bar{u}}{\partial z^2}, \quad (9.33)$$

$$\text{o} = -f\tilde{u} + K \frac{\partial^2 \bar{v}}{\partial z^2}. \quad (9.34)$$

Es wurde die Definition

$$\tilde{u} := \bar{u} - u_g, \quad (9.35)$$

$$\tilde{v} := \bar{u} - v_g \quad (9.36)$$

mit $\mathbf{V}_g = (u_g, v_g)^T$ als geostrophischem Wind eingesetzt. Vernachlässigt man den thermischen Wind, folgt

$$\text{o} = f\tilde{v} + K \frac{\partial^2 \tilde{u}}{\partial z^2}, \quad (9.37)$$

$$\text{o} = -f\tilde{u} + K \frac{\partial^2 \tilde{v}}{\partial z^2} \quad (9.38)$$

$$\Rightarrow \frac{if}{K} (\tilde{u} + i\tilde{v}) = \frac{\partial^2 (\tilde{u} + i\tilde{v})}{\partial z^2}. \quad (9.39)$$

Dies wird gelöst durch

$$\tilde{u} + i\tilde{v} = C_1 \exp\left(\sqrt{\frac{if}{K}}z\right) + C_2 \exp\left(-\sqrt{\frac{if}{K}}z\right) \quad (9.40)$$

mit $C_1, C_2 \in \mathbb{C}$. Im Falle der unteren Grenze der Atmosphäre gelten in der Nordhemisphäre die Randbedingungen

$$\lim_{z \rightarrow \infty} \tilde{u} + i\tilde{v} = \text{o} \Rightarrow C_1 = \text{o}, \quad (9.41)$$

$$(\tilde{u} + i\tilde{v})(z = \text{o}) = -u_g - iv_g \Rightarrow C_2 = -u_g - iv_g, \quad (9.42)$$

und auf der Südhalbkugel

$$\lim_{z \rightarrow \infty} \tilde{u} + i\tilde{v} = \text{o} \Rightarrow C_2 = \text{o}, \quad (9.43)$$

$$(\tilde{u} + i\tilde{v})(z = \text{o}) = -u_g - iv_g \Rightarrow C_1 = -u_g - iv_g, \quad (9.44)$$

also lautet die Lösung nördlich des Äquators

$$\tilde{u} + i\tilde{v} = -(u_g + iv_g) \exp\left(-\sqrt{\frac{if}{K}}z\right) = -(u_g + iv_g) \exp\left(-\sqrt{\frac{f}{2K}}z\right) \exp\left(-i\sqrt{\frac{f}{2K}}z\right) \quad (9.45)$$

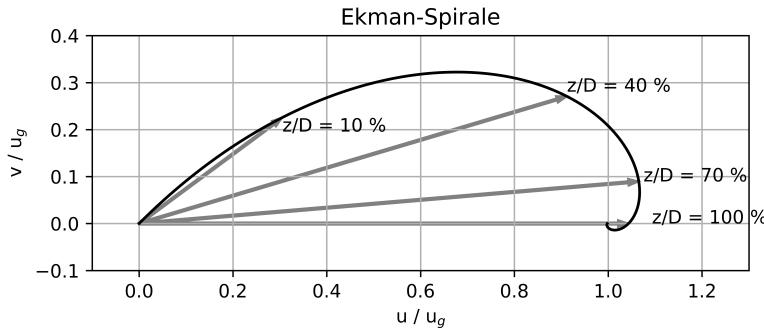
und südlich davon

$$\tilde{u} + i\tilde{v} = -(u_g + iv_g) \exp\left(-\sqrt{\frac{|f|}{iK}}z\right) = -(u_g + iv_g) \exp\left(-\sqrt{\frac{|f|}{2K}}z\right) \exp\left(i\sqrt{\frac{|f|}{2K}}z\right). \quad (9.46)$$

Dies kann man verallgemeinern zu

$$\bar{u} = u_g - \left[\text{sign}(f) v_g \sin\left(\sqrt{\frac{|f|}{2K}}z\right) + u_g \cos\left(\sqrt{\frac{|f|}{2K}}z\right) \right] \exp\left(-\sqrt{\frac{|f|}{2K}}z\right), \quad (9.47)$$

$$\bar{v} = v_g + \left[\text{sign}(f) u_g \sin\left(\sqrt{\frac{|f|}{2K}}z\right) - v_g \cos\left(\sqrt{\frac{|f|}{2K}}z\right) \right] \exp\left(-\sqrt{\frac{|f|}{2K}}z\right). \quad (9.48)$$

Abbildung 9.1: Die Ekman-Spirale, es ist $v_g = 0$.

Man kann o. B. d. A. $u_g > 0, v_g = 0$ annehmen, dann gilt

$$\bar{u} = u_g - u_g \cos \left(\sqrt{\frac{|f|}{2K}} z \right) \exp \left(-\sqrt{\frac{|f|}{2K}} z \right), \quad (9.49)$$

$$\bar{v} = \text{sign}(f) u_g \sin \left(\sqrt{\frac{|f|}{2K}} z \right) \exp \left(-\sqrt{\frac{|f|}{2K}} z \right). \quad (9.50)$$

$\text{sign}(f) \rho \bar{v}$ ist die Massenflussdichte ins Tief hinein, daher rechnet man mit zweifacher partieller Integration

$$\begin{aligned} \int_0^\infty \sin(az) \exp(-\beta z) dz &= \frac{a}{\beta} \int_0^\infty \cos(az) \exp(-\beta z) dz = \frac{a}{\beta^2} - \frac{a^2}{\beta^2} \int_0^\infty \sin(az) \exp(-\beta z) dz \\ \Rightarrow \int_0^\infty \sin(az) \exp(-\beta z) dz &= \frac{\frac{a}{\beta^2}}{1 + \frac{a^2}{\beta^2}} = \frac{a}{\beta^2 + a^2}. \end{aligned} \quad (9.51)$$

In einer isothermen Atmosphäre gilt

$$a = \sqrt{\frac{|f|}{2K}}, \quad (9.52)$$

$$\beta = -\sqrt{\frac{|f|}{2K}} - \frac{I}{H}, \quad (9.53)$$

$$\Rightarrow a^2 + \beta^2 = \frac{|f|}{K} + \frac{I^2}{H^2} + \sqrt{\frac{2|f|}{KH^2}} \quad (9.54)$$

$$\Rightarrow \frac{a}{\beta^2 + a^2} = \frac{I}{\sqrt{\frac{2|f|}{K}} + \sqrt{\frac{2K}{|f|H^4}} + \frac{I}{H}} = \frac{H}{2 + H\sqrt{\frac{2|f|}{K}} + \sqrt{\frac{2K}{|f|H^2}}}. \quad (9.55)$$

mit $H \approx 8$ km als Skalenhöhe. Die Höhe D , in der der Wind parallel zum geostrophischen Wind ist, verwendet man häufig als eine technische Definition der *Dicke der Grenzschicht*. Es gilt

$$D = \sqrt{\frac{2K}{|f|}} \pi \quad (9.56)$$

Dort ist die Windgeschwindigkeit etwas höher als die geostrophische Geschwindigkeit, weshalb diese Höhe auch als *Gradientenwindhöhe* bezeichnet wird. Aus Beobachtungen weiß man, dass in ca. 1 km Höhe der Wind seinen geostrophischen Wert anstrebt, daraus folgt

$$K \approx \frac{|f| D^2}{2\pi^2} \approx 5 \text{ m}^2/\text{s}. \quad (9.57)$$

Dies ist über fünf Größenordnungen über dem Wert der kinematischen Viskosität von $1,5 \cdot 10^{-5} \text{ m}^2/\text{s}$. Mit Glg. (9.20) folgt für die Mischungsweglänge

$$l = \sqrt{\frac{K}{\left| \frac{\partial V}{\partial z} \right|}} \sim \sqrt{\frac{KD}{u_g}} \sim 2 \cdot 10^1 \text{ m}. \quad (9.58)$$

Dies entspricht der Erwartung, dass $l \ll D$ sein muss, damit das Mischungswegkonzept in der planetaren Grenzschicht sinnvoll ist. Es ergibt sich mit Glg. (9.26) eine Höhe D_P der Prandtl-Schicht von ca.

$$D_P = \frac{l}{k} = 50 \text{ m} \quad (9.59)$$

mit $k = 0,4$. Man definiert die *Ekman-Zahl* Ek als das Verhältnis von Reibungs- zu Coriolistermen, also

$$\text{Ek} := \frac{KU}{H^2 f U} = \frac{K}{f H^2}, \quad (9.60)$$

wobei H die charakteristische Vertikalausdehnung des Phänomens ist. Bei kleinen Ekman-Zahlen kann die Reibungskraft durch die Coriolis-Kraft ausgeglichen werden. In der Grenzschicht erhält man eine Ekman-Zahl von $\text{Ek} \sim 5\%$.

Die Ekman-Spirale führt bei einer Zyklone mit Radius R zu einer Drucktendenz $\frac{\partial p}{\partial t}$ in der Größenordnung

$$\frac{\partial p}{\partial t} \sim \frac{2g}{R} \frac{u_g \rho_0 a}{\beta^2 + a^2}. \quad (9.61)$$

Man erhält mit $u_g \sim 10 \text{ m/s}$, $\rho_0 \approx 1,2 \text{ kg/m}^3$ und $R \sim 500 \text{ km}$

$$\frac{\partial p}{\partial t} \sim 2,6 \frac{\text{hPa}}{\text{hr}}. \quad (9.62)$$

Dies ist deutlich geringer als der in Absch. 4.7 abgeschätzte Wert. Die Obergrenze der Grenzschicht ist gleichzeitig die Obergrenze der Ekman-Schicht.

9.1.1 Spin-down

9.2 Konkrete Mittelungsoperatoren

Sei f eine skalare oder vektorielle Funktion von Ort und Zeit. Ein allgemeiner Mittelungsoperator \bar{f} wird definiert durch

$$\bar{f}(x_i) := \frac{\int_{\Omega} f(x_i) h(x_i) dx_1 \dots dx_n}{\int_{\Omega} h(x_i) dx_1 \dots dx_n}, \quad (9.63)$$

wobei die Zeit t als eine der x_i aufgefasst werden soll und h eine Gewichtungsfunktion darstellt.

9.2.1 Gleitendes Zeitmittel

Das *gleitende Zeitmittel* mit der Mittelungslänge T erhält man aus Glg. (9.63) mit $\Omega = (t - \frac{T}{2}, t + \frac{T}{2})$ und $g = 1$, also

$$\bar{f}(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{T} \int_{t - \frac{T}{2}}^{t + \frac{T}{2}} f(\mathbf{r}, t') dt'. \quad (9.64)$$

Man überprüft nun, ob dieser Operator die Eigenschaften eines Reynolds-Operators Glgs. (9.3) - (9.5) erfüllt. Zunächst gilt

$$\frac{\partial \bar{f}}{\partial x_i} = \frac{1}{T} \int_{t - \frac{T}{2}}^{t + \frac{T}{2}} \frac{\partial f}{\partial x_i}(\mathbf{r}, t') dt' = \overline{\frac{\partial f}{\partial x_i}}, \quad (9.65)$$

Glg. (9.3) ist also erfüllt. Die Überprüfung der Erfüllung von Glg. (9.4) erfolgt mittels des Haupsatz der Differenzial- und Integralrechnung:

$$\frac{\partial \bar{f}}{\partial t} = \frac{f(\mathbf{r}, t + \frac{T}{2}) - f(\mathbf{r}, t - \frac{T}{2})}{T} = \frac{1}{T} \int_{t - \frac{T}{2}}^{t + \frac{T}{2}} \frac{\partial f}{\partial t'}(\mathbf{r}, t') dt' = \frac{\overline{\partial f}}{\partial t} \quad (9.66)$$

Die ersten beiden Eigenschaften sind also erfüllt. Für die dritte rechnet man mit $g = 1$

$$\bar{f} = \frac{1}{T} \int_{t - \frac{T}{2}}^{t + \frac{T}{2}} f(\mathbf{r}, t') - \bar{f}(\mathbf{r}, t') dt' \stackrel{!}{=} 0. \quad (9.67)$$

Dies soll für beliebige Zeitpunkte gelten, also folgt hieraus bereits

$$\bar{f} = f \quad (9.68)$$

zu allen Zeitpunkten als Kriterium für die Gültigkeit von Glg. (9.5) für den einfachen Fall $g = 1$, was nur für lineare Funktionen f der Fall ist.

9.2.2 Allgemeines gewichtetes Mittel

9.3 Herleitung von Parametrisierungen

Die Abschätzung der Auswirkungen subskaliger Variabilität auf die gemittelten Größen bezeichnet man als *Parametrisierung*. In einer anderen Konvention bezeichnet man all das als Parametrisierung, was formal über das trockenadiabatische Gleichungssystem hinausgeht, wovon hier kein Gebrauch gemacht wird.

9.3.1 Beispiel: skalare Diffusion

Die Natur diffundiert die Größen Temperatur T und Gasdichten ρ_n . Sei ψ eine solche Größe. Die Diffusion erfolgt durch einen von den thermodynamischen Zustandsgrößen abhängenden Diffusionskoeffizienten χ_ψ , der somit von Ort und Zeit abhängt. Man notiert

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = \dots + \nabla \cdot (\chi_\psi \nabla \psi). \quad (9.69)$$

χ_{psi} ist zunächst einmal molekularen Ursprungs. Durch die in nichtlinearen Systemen bei Mittelung entstehenden Kovarianzterme jedoch parametrisiert man subskaligen Fluss skalarer Größen sinnvollerweise so, dass man ansetzt

$$\chi_{\psi, \Delta} = \chi_\psi + \chi_{\psi, S}, \quad (9.70)$$

wobei der Index Δ für den in die Diskretisierung einzusetzenden Diffusionskoeffizienten steht und der Index S für die Auswirkung der Subskala. Auf diese Weise ist physikalische Konsistenz gewährleistet. Mit kleiner werdenden $\Delta x, \Delta t$, also mit höherer Ausflösung, konvergiert $\chi_{\psi, \Delta}$ gegen χ_ψ . Bei niedriger Ausflösung gilt in guter Näherung $\chi_{\psi, \Delta} = \chi_{\psi, S}$. Da der vertikale Gitterpunktstand üblicherweise deutlich kleiner ist als der horizontale, kann man $\chi_{\psi, S}$ richtungsabhängig ansetzen, also

$$\chi_{\psi, \Delta} \nabla \psi \rightarrow \chi_{\psi, \Delta, H} \nabla_H \psi + \chi_{\psi, \Delta, z} \frac{\partial \psi}{\partial z} \mathbf{k}. \quad (9.71)$$

Dabei ist der horizontale Diffusionskoeffizient größer als der vertikale.

9.3.2 Beispiel: Phasenübergangsraten

9.4 Turbulenzspektren

9.4.1 Das -3-Spektrum

9.4.2 Das -5/3-Spektrum

9.5 Energiekaskade

10 KLIMATOLOGIE DER ATMOSPHÄRE

10.1 Zonal gemittelte Gleichungen

10.2 Frontalzonen und Jets

11 OZEANZIRKULATION

11.1 Tide

11.2 Windgetriebene Zirkulation

Die in Absch. 9.1 durchgeführte Herleitung der Ekman-Spirale kann man ohne Modifikationen auf einen ebenen Ozeanboden übertragen. An der Ozeanoberfläche hingegen fehlt die Adhäsionsbedingung $\lim_{r \rightarrow \partial V} \mathbf{U} = \mathbf{o}$, vielmehr wäre die Annahme sinnvoll, dass an der Ozeanoberfläche Windgeschwindigkeit und Strömungsgeschwindigkeit gegen einen gemeinsamen Grenzwert konvergieren. Man müsste dann die Ekman-Spirale simultan in Ozean und Atmosphäre lösen. Es gibt jedoch eine einfachere Möglichkeit, den Einfluss des Windes auf die Zirkulation im Ozean grundlegend zu untersuchen. Hierzu setzt man zunächst das Kräftegleichgewicht der Glg.en (9.21) - (9.22) an:

$$f\mathbf{k} \times \mathbf{V} = -\nabla \varphi + \frac{\mathbf{I}}{\rho_0} \frac{\partial \boldsymbol{\tau}}{\partial z} \quad (11.1)$$

Man geht nun davon aus, dass die vertikalen Dichtegradienten so klein sind, dass man den Term $\frac{1}{\rho_0}$ in die partielle Ableitung hereinziehen kann, also

$$f\mathbf{k} \times \mathbf{V} = -\nabla \varphi + \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{\boldsymbol{\tau}}{\rho_0} \right). \quad (11.2)$$

Hieraus wendet man nun die Rotation an, also

$$\nabla \times f\mathbf{k} \times \mathbf{V} = \nabla \times \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{\boldsymbol{\tau}}{\rho_0} \right). \quad (11.3)$$

Mit Glg. (A.230) folgt

$$\nabla \times f\mathbf{k} \times \mathbf{V} = (\mathbf{V} \cdot \nabla) f\mathbf{k} - \mathbf{V} (\nabla \cdot f\mathbf{k}) + f\mathbf{k} \nabla \cdot \mathbf{V} - (f\mathbf{k} \cdot \nabla) \mathbf{V} \quad (11.4)$$

Projektion auf die vertikale Richtung ergibt

$$\begin{aligned} \mathbf{k} \cdot \nabla \times f\mathbf{k} \times \mathbf{V} &= \mathbf{k} \cdot (\mathbf{V} \cdot \nabla) f\mathbf{k} + f\nabla \cdot \mathbf{V} \\ \Rightarrow \mathbf{k} \cdot \nabla \times f\mathbf{k} \times \mathbf{V} &= v\beta - f \frac{\partial w}{\partial z}. \end{aligned} \quad (11.5)$$

Integration über das Höhenintervall $[z_B, z_T]$ ergibt somit

$$\beta \int_{z_B}^{z_T} v dz - f(w_T - w_B) = \mathbf{k} \cdot \frac{\mathbf{I}}{\rho_0} \nabla \times (\boldsymbol{\tau}_T - \boldsymbol{\tau}_B). \quad (11.6)$$

Mit den Definitionen

$$D := z_T - z_B, \quad (11.7)$$

$$\bar{v} := \frac{1}{D} \int_{z_B}^{z_T} v dz \quad (11.8)$$

kann man dies kürzer als

$$\beta D \bar{v} - f(w_T - w_B) = \mathbf{k} \cdot \frac{\mathbf{I}}{\rho_0} \nabla \times (\boldsymbol{\tau}_T - \boldsymbol{\tau}_B) \quad (11.9)$$

notieren. Da es hier um die ganze Wassersäule geht, kann man die einfache Randbedingung

$$w_T = w_B = \mathbf{o} \quad (11.10)$$

anwenden. Damit erhält man

$$\beta D \bar{v} = \mathbf{k} \cdot \frac{\mathbf{I}}{\rho_0} \nabla \times (\boldsymbol{\tau}_T - \boldsymbol{\tau}_B) \quad (11.11)$$

Um den Reibungsterm am Grund zu parametrisieren, verwendet man das *Stommel-Modell*, welches lautet

$$\boldsymbol{\tau}_B = r \bar{V} \quad (11.12)$$

mit einer Konstante $r > 0$. Mit $w = 0$ gilt auch $\nabla \cdot \mathbf{V} = 0$, weshalb man den gemittelten Wind durch eine Stromfunktion ψ ausdrücken kann:

$$\bar{u} = -\frac{\partial \psi}{\partial y} \quad (11.13)$$

$$\bar{v} = \frac{\partial \psi}{\partial x} \quad (11.14)$$

Somit kann man notieren

$$\begin{aligned} \beta D \frac{\partial \psi}{\partial x} + \mathbf{k} \cdot \frac{\mathbf{I}}{\rho_0} \nabla \times \boldsymbol{\tau}_B &= \mathbf{k} \cdot \frac{\mathbf{I}}{\rho_0} \nabla \times \boldsymbol{\tau}_T \\ \Leftrightarrow \beta D \frac{\partial \psi}{\partial x} + \frac{r}{\rho_0} \Delta \psi &= \mathbf{k} \cdot \frac{\mathbf{I}}{\rho_0} \nabla \times \boldsymbol{\tau}_T \\ \Leftrightarrow \frac{\partial \psi}{\partial x} + \frac{r}{\rho_0 \beta D} \Delta \psi &= \frac{\mathbf{I}}{\rho_0 \beta D} \mathbf{k} \cdot \nabla \times \boldsymbol{\tau}_T \\ \Leftrightarrow \frac{\partial \psi}{\partial x} + \varepsilon \Delta \psi &= \frac{\varepsilon}{r} \mathbf{k} \cdot \nabla \times \boldsymbol{\tau}_T \end{aligned} \quad (11.15)$$

mit

$$\varepsilon := \frac{r}{\rho_0 \beta D}. \quad (11.16)$$

Es gilt

$$\frac{\frac{\partial \psi}{\partial x}}{\varepsilon \Delta \psi} \sim \frac{L \rho_0 \beta D}{r} \quad (11.17)$$

mit L als horizontaler Längenskala. Für r skaliert man

$$fV \sim \frac{Vr}{D\rho_0} \Rightarrow r \sim D\rho_0 f. \quad (11.18)$$

Somit folgt

$$\frac{\frac{\partial \psi}{\partial x}}{\varepsilon \Delta \psi} \sim \frac{L \beta}{f} \sim \frac{L}{a} \quad (11.19)$$

In grober Näherung kann man für sehr große Skalen also konzeptionell von

$$\frac{\partial \psi}{\partial x} = \frac{\varepsilon}{r} \mathbf{k} \cdot \nabla \times \boldsymbol{\tau}_T \quad (11.20)$$

ausgehen, was man als *Sverdrup-Balance* bezeichnet. Hieraus lässt sich die Ozeanströmung bei gegebener Windeinwirkung diagnostisch ableiten.

Nun wird Glg. (11.15) auf der Menge $[0, a] \times [0, a]$ mit $a > 0$ gelöst, also für ein quadratisches Becken.

11.3 Thermohaline Zirkulation

11.4 Windsee

Teil III

Strahlung und Wolkenmikrophysik

12 STRAHLUNGSTRANSPORT

12.1 Zwei-Strom-Methode

12.2 Berechnung der Streu- und Absorptionskoeffizienten

12.3 Atmosphärische Optik

13.1 Mehr zum Sättigungsdampfdruck

13.1.1 Mehr-Stoff-Systeme

13.1.2 Kelvin-Formel

13.1.3 Köhler-Formel

13.2 Zirkulation um Kondensate

13.2.1 Stokes'sche Reibung

13.3 Zirkulation in Kondensaten

Teil IV

Numerik

14 NUMERISCHE GRUNDLAGEN

Ein Wettermodell ist eine Kopie der Atmosphäre. In ihm sind alle Felder und Differenzialoperatoren durch diskretisierte Versionen ersetzt, da man nur endlich viel Information abspeichern kann. Man schreibt für einen Differenzialoperator D eine Ersetzung

$$D \rightarrow D', \quad (14.1)$$

analog für atmosphärische Zustände

$$Z \rightarrow Z'. \quad (14.2)$$

Anschließend legt man eine Dynamik fest, also ein Verfahren

$$Z'(t) \xrightarrow{D'} Z'(t + \Delta t) \quad (14.3)$$

zur Bestimmung der Zeitentwicklung der Modellatmosphäre mit dem Ziel, die Zustandstrajektorie des Modells möglichst nah an diejenige der realen Atmosphäre zu bringen. Hierzu definiert man einen Abstand

$$|Z - Z'| \geq 0. \quad (14.4)$$

Wettervorhersage hat den folgenden Arbeitsablauf:

1. Beobachtung des Zustandes der Atmosphäre.
2. Bestimmung des Anfangszustandes des Modells.
3. Integration des Modells.

Dabei entstehen aus folgenden Gründen Fehler:

1. Der Anfangszustand wurde nicht vollständig beobachtet.
2. Der Anfangszustand wurde fehlerhaft beobachtet.
3. Die herrschenden Gleichungen sind Gleichungen der statistischen Physik und gelten somit nicht exakt.
4. Das Modell kann weniger Information abspeichern als die reale Atmosphäre.
5. Die Dynamik des Modells ist von der der realen Atmosphäre verschieden.
6. Es existieren Rundungsfehler durch die endliche Rechnergrenauigkeit.
7. Der Rechner macht Fehler.

14.1 Allgemeines über Diskretisierungen

Die Lösung einer Differenzialgleichung sei mit F bezeichnet und die Lösung einer diskretisierten Version der Gleichung mit F_d . Ein numerisches Verfahren heißt genau dann *konsistent*, wenn die Lösung des Schemas bei kleiner werdenden Δx und Δt gegen die Lösung der Differenzialgleichung konvergiert, also $\lim_{\Delta x \rightarrow 0} F_d = F$ in obigen Begriffen. Eine Diskretisierung heißt genau dann *selbstkonsistent*, wenn alle Erhaltungsgrößen des kontinuierlichen Systems auch Erhaltungsgrößen des diskretisierten Systems sind. Dies lässt sich auch auf Näherungen übertragen. Ein Schema heißt genau dann *stabil*, wenn die berechnete Lösung für alle Zeiten beschränkt ist, wenn also ein $C > 0$ existiert mit $|F_d| < C$ für alle $t \geq t_0$ mit t_0 als Startzeitpunkt. *Lineare Instabilität* entsteht bereits bei linearen Differenzialgleichungen, wohingegen *nichtlineare Instabilität* nur bei nichtlinearen Differenzialgleichungen entstehen kann.

14.1.1 Finite Differenzen

Sei eine unendlich oft differenzierbare Funktion $f: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ gegeben. Mittels einer Taylorreihe kann man schreiben

$$f(x + \Delta x) = f(x) + \Delta x f'(x) + \frac{f''(x)}{2!} \Delta x^2 + \frac{f'''(x)}{3!} \Delta x^3 + \dots \quad (14.5)$$

und

$$f(x - \Delta x) = f(x) - \Delta x f'(x) + \frac{f''(x)}{2!} \Delta x^2 - \frac{f'''(x)}{3!} \Delta x^3 + \dots \quad (14.6)$$

Subtrahiert man beide Gleichungen, erhält man

$$f(x + \Delta x) - f(x - \Delta x) = 2\Delta x f'(x) + R', \quad (14.7)$$

wobei der Rest R' für die Terme dritter und höherer Ordnung steht. Dies ergibt umgestellt

$$f'(x) = \frac{f(x + \Delta x) - f(x - \Delta x)}{2\Delta x} + R, \quad (14.8)$$

wobei R ein Polynom in Δx mit der geringsten Potenz 2 ist, man sagt, dass durch (14.8) eine Approximation zweiter Ordnung der Ableitung gegeben ist und schreibt anstelle von R das Symbol $\mathcal{O}(\Delta x^2)$. Man nennt diese Art, Ableitungen zu approximieren, zentrale Differenzenquotienten. Ein einseitiger Differenzenquotient, zum Beispiel

$$f'(x) \approx \frac{f(x + \Delta x) - f(x)}{\Delta x} \quad (14.9)$$

ist ebenfalls eine geeignete Approximation, jedoch konvergiert dies nur in erster Ordnung, wie leicht durch Umstellen von Glg. (14.5) ersichtlich ist. Desto höher die Ordnung, desto besser, da die Genauigkeit einer Taylor-Entwicklung ja mit der Ordnung anwächst. Aus diesem Grund werden, soweit möglich, zentrale räumliche Differenzenquotienten verwendet. Man kann aus den Glg.en (14.5) und (14.6) auch eine Approximation für die zweite Ableitung einer Funktion herleiten:

$$\begin{aligned} f(x + \Delta x) + f(x - \Delta x) &= 2f(x) + f''(x) \Delta x^2 + \mathcal{O}(\Delta x^4) \\ \Leftrightarrow f''(\Delta x) &= \frac{f(x + \Delta x) - 2f(x) + f(x - \Delta x)}{\Delta x^2} + \mathcal{O}(\Delta x^2) \end{aligned} \quad (14.10)$$

Hat man beispielsweise eine Funktion $f(x) = A \sin(kx)$ gegeben, so gilt $f' = Ak \cos(kx)$, Glg. (14.8) ergibt jedoch

$$f' \approx \frac{A}{2\Delta x} (\sin(kx + k\Delta x) - \sin(kx - k\Delta x)) = \frac{A}{\Delta x} \cos(kx) \sin(k\Delta x) = \frac{\sin(k\Delta x)}{k\Delta x} f'. \quad (14.11)$$

Hieran sieht man, dass die Approximation, wie erwartet, gegen den richtigen Wert der Ableitung konvergiert, falls Δx gegen Null geht (es gilt $\lim_{a \rightarrow 0} \frac{\sin(a)}{a} = 1$ nach der Regel von L'Hospital). Schreibt man für $k = \frac{2\pi}{\lambda}$ mit λ als Wellenlänge und setzt $\Delta x = \lambda/2$ ein, so ergibt der zentrale Differenzenquotient immer $f' = 0$. Hinreichend lange Wellen ($\lambda \gg 2\Delta x$) werden jedoch gut aufgelöst.

14.1.2 Zeitschrittverfahren

In diesem Abschnitt soll verständlich gemacht werden, wie sich die zeitliche Diskretisierung einer linearen Differenzialgleichung auf die Dispersionsrelation und die Stabilität einer Wellenlösung auswirken kann. Es wird die lineare Advektionsgleichung

$$\frac{\partial f}{\partial t} + U \frac{\partial f}{\partial x} = 0 \quad (14.12)$$

betrachtet mit $U \neq 0$ als homogener Advektionsgeschwindigkeit und f als irgendeiner Teilcheneigenschaft. Die analytische Lösung lautet in der komplexen Schreibweise

$$f = \exp(i(kx - \omega t)), \quad (14.13)$$

setzt man dies ein folgt $-i\omega + Uik = 0$, also als Dispersionsrelation

$$\omega = U k. \quad (14.14)$$

Phasen- und Gruppengeschwindigkeit sind also gleich U . Nun werden Ort und Zeit diskretisiert, man schreibt $f_l^{(m)} = f(l\Delta x, m\Delta t)$ und setzt an

$$f_l^{(m)} = e^{Cm\Delta t} e^{i(kl\Delta x - \omega m\Delta t)} \quad (14.15)$$

mit $f_l^{(0)} = e^{ikl\Delta x}$ als Anfangszustand. Es sollen C und die Dispersion $\omega(k)$ bestimmt werden.

14.1.2.1 Explizites Euler-Verfahren

Zunächst wird folgende Diskretisierung untersucht:

$$\frac{f_l^{(m+1)} - f_l^{(m)}}{\Delta t} + U \frac{f_{l+1}^{(m)} - f_{l-1}^{(m)}}{2\Delta x} = 0 \quad (14.16)$$

Dies bezeichnet man als *explizites Euler-Verfahren*. Einsetzen ergibt

$$\frac{e^{C\Delta t} e^{-i\omega\Delta t} - 1}{\Delta t} + U \frac{e^{ik\Delta x} - e^{-ik\Delta x}}{2\Delta x} = \frac{e^{C\Delta t} \cos(\omega\Delta t) - i e^{C\Delta t} \sin(\omega\Delta t) - 1}{\Delta t} + \frac{i U \sin(k\Delta x)}{\Delta x} = 0. \quad (14.17)$$

Der Realteil ist

$$e^{C\Delta t} \cos(\omega\Delta t) = 1, \quad (14.18)$$

hieraus folgt i. A. $C > 0$, es liegt Instabilität vor. Hierbei handelt es sich um *lineare Instabilität*, da Glg. (14.12) linear in f ist. Der Imaginärteil ist

$$e^{C\Delta t} \sin(\omega\Delta t) = \frac{U \Delta t \sin(k\Delta x)}{\Delta x}. \quad (14.19)$$

Hieraus folgt

$$\tan(\omega\Delta t) = \frac{U \Delta t \sin(k\Delta x)}{\Delta x}, \quad (14.20)$$

also die Dispersion

$$\omega(k) = \frac{1}{\Delta t} \arctan \left(\frac{U \Delta t \sin(k\Delta x)}{\Delta x} \right). \quad (14.21)$$

λ sei die Wellenlänge, also $k = \frac{2\pi}{\lambda}$. Für $\lambda \gg \Delta x$ gilt $\sin(k\Delta x) \approx k\Delta x$, also $\omega \approx \frac{1}{\Delta t} \arctan(Uk\Delta t)$. Im Fall $U\Delta t \ll \lambda$, also $Uk\Delta t \ll 1$, ist $\omega \approx \frac{1}{\Delta t} U \Delta t k = Uk$ wie im kontinuierlichen Fall. Lange Wellen werden bei hinreichend kleinem Zeitschritt also gut aufgelöst. Bei der kürzesten aufgelösten Welle $\lambda = 2\Delta x$ jedoch folgt $\omega = \frac{1}{\Delta t} \arctan \left(\frac{U \Delta t \sin \pi}{\Delta x} \right) = 0$, die Welle ist also stationär. Abb. 14.1 zeigt die Dispersionsrelation für den Fall $U = 10$ m/s. Man erkennt, dass Wellen mit $k \leq \frac{1}{\Delta x}$, also $\lambda \geq 2\pi\Delta x$ anständig simuliert werden.

14.1.2.2 Implizites Euler-Verfahren

Verwendet man einen linksseitigen Differenzenquotienten für die Zeitableitung (dies bezeichnet man als *implizites Euler-Verfahren*), schreibt also

$$\frac{f_l^{(m+1)} - f_l^{(m)}}{\Delta t} + U \frac{f_{l+1}^{(m+1)} - f_{l-1}^{(m+1)}}{2\Delta x} = 0, \quad (14.22)$$

so ergibt dies eingesetzt

$$\begin{aligned} & \frac{e^{C\Delta t} e^{-i\omega\Delta t} - 1}{\Delta t} + U \frac{e^{ik\Delta x} e^{C\Delta t} e^{-i\omega\Delta t} - e^{-ik\Delta x} e^{C\Delta t} e^{-i\omega\Delta t}}{2\Delta x} = 0 \\ \Leftrightarrow & \frac{1 - e^{-C\Delta t} e^{i\omega\Delta t}}{\Delta t} + U \frac{e^{ik\Delta x} - e^{-ik\Delta x}}{2\Delta x} = 0. \end{aligned} \quad (14.23)$$

Der Realteil ergibt

$$1 = e^{-C\Delta t} \cos(\omega\Delta t). \quad (14.24)$$

Das bedeutet $C < 0$, die Lösung ist also stabil, sie verschwindet jedoch irgendwann. Der Imaginärteil wird zu

$$\frac{e^{-C\Delta t} \sin(\omega\Delta t)}{\Delta t} = U \frac{\sin(k\Delta x)}{\Delta x}. \quad (14.25)$$

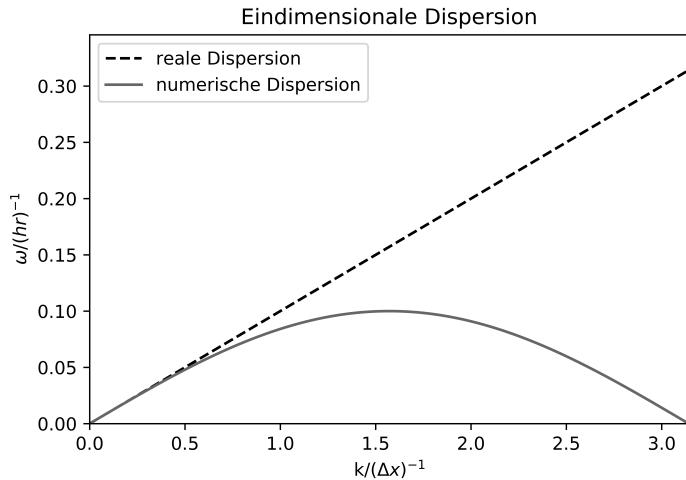


Abbildung 14.1: Numerische und tatsächliche Dispersion in der 1D-Advektionsgleichung. Es wurde mit $U = 10$ m/s gerechnet, für Δt wurde ein sehr geringer Wert eingesetzt. Man beachte den Vorzeichenwechsel der Gruppengeschwindigkeit. Wellen mit der geringsten aufgelösten Wellenlänge $2\Delta x$ sind stationär. Wellen mit einer Wellenlänge $\geq 6\Delta x$ werden gut simuliert.

Daraus folgt

$$\tan(\omega\Delta t) = U \frac{\Delta t}{\Delta x} \sin(k\Delta x), \quad (14.26)$$

also die gleiche Dispersionsrelation wie beim expliziten Euler-Verfahren.

14.1.2.3 Runge-Kutta-Verfahren

14.1.2.4 Multischrittverfahren

Verwendet man einen zentralen zeitlichen Differenzenquotienten, schreibt also

$$\frac{f_l^{(m+2)} - f_l^{(m)}}{2\Delta t} + U \frac{f_{l+1}^{(m+1)} - f_{l-1}^{(m+1)}}{2\Delta x} = 0, \quad (14.27)$$

so ergibt dies eingesetzt

$$\begin{aligned} \frac{e^{2C\Delta t} e^{-2i\omega\Delta t} - 1}{2\Delta t} + U \frac{e^{ik\Delta x} e^{C\Delta t} e^{-i\omega\Delta t} - e^{-ik\Delta x} e^{C\Delta t} e^{-i\omega\Delta t}}{2\Delta x} &= 0 \\ \Leftrightarrow \frac{e^{C\Delta t} e^{-i\omega\Delta t} - e^{-C\Delta t} e^{i\omega\Delta t}}{2\Delta t} + U \frac{e^{ik\Delta x} - e^{-ik\Delta x}}{2\Delta x} &= 0. \end{aligned} \quad (14.28)$$

Der Realteil ergibt

$$e^{C\Delta t} \cos(\omega\Delta t) = e^{-C\Delta t} \cos(\omega\Delta t). \quad (14.29)$$

Das bedeutet $C = 0$, die Lösung ist also stabil. Der Imaginärteil wird zu

$$\frac{\sin(\omega\Delta t)}{2\Delta t} (e^{-C\Delta t} + e^{C\Delta t}) = \frac{\sin(\omega\Delta t)}{\Delta t} = U \frac{\sin(k\Delta x)}{\Delta x}. \quad (14.30)$$

Daraus folgt

$$\sin(\omega\Delta t) = U \frac{\Delta t}{\Delta x} \sin(k\Delta x) \Rightarrow \omega = \frac{1}{\Delta t} \arcsin \left[\frac{U\Delta t}{\Delta x} \sin(k\Delta x) \right], \quad (14.31)$$

also eine andere Dispersionsrelation als im expliziten Fall. Allgemein scheint die Stabilität der Lösung aus dem Realteil ersichtlich zu sein, während die Dispersion aus dem Imaginärteil zu folgen scheint. Schemata sind weiterhin entweder stabil ($C \leq 0$), labil ($C > 0$) oder bedingt stabil (stabil für hinreichend kleine Δt). Dies wird vom Zeitschrittverfahren beeinflusst. Der Optimalfall ist $C = 0$, er ergibt sich für das Leapfrogverfahren, daher ist dieses Verfahren das geeignete.

14.2 Probleme und Methoden der Geofluidsimulation

Es gibt kaum theoretisches Handwerkszeug, um nichtlineare partielle Differenzialgleichungen (Abk. PDEs für engl. *partial differential equations*) untersuchen zu können. Im inkompressiblen, viskosen Fall eines Fluids mit der Dynamik

$$\frac{DU}{Dt} = -\frac{\mathbf{i}}{\rho} \nabla p + r \Delta \mathbf{U} + \mathbf{f}(\mathbf{r}, t), \quad (14.32)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{U} = 0 \quad (14.33)$$

mit gegebenen Kräften $\mathbf{f}(\mathbf{r}, t)$, welches den gesamten \mathbb{R}^3 ausfüllt, ist es eine ungeklärte Fragestellung, ob für physikalisch realistische Anfangsbedingungen eine eindeutige Lösung für alle nachfolgenden Zeiten existiert. Daher ist die Frage nach der optimalen Methode einer Wettervorhersage derzeit nicht zu beantworten und es ist anzunehmen, dass diese Frage in mathematischer Rigorosität auch nie zu beantworten sein wird. Praktische hydrodynamische Probleme (wie z. B. Wettervorhersage) werden also meistens mit numerischen Problemen bearbeitet.

Zunächst einmal macht man sich noch einmal klar, was durch Tracer gegenüber einer trockenen Atmosphäre an zusätzlichen Komplikationen hinzukommt:

1. bei N Tracern kommen N Kontinuitätsgleichungen mit verknüpften Quelltermen hinzu
2. bei M kondensierten Tracern kommen M Erste Hauptätze hinzu
3. die spezifischen Wärmekapazitäten, die individuelle Gaskonstante sowie die thermische Zustandsgleichung ändern sich

Die ersten beiden Punkte sind formal bereits im trockenen Gleichungssystem vorhanden, da bereits in diesem eine Kontinuitätsgleichung und ein Erster Hauptsatz vorhanden sind. Wenn man also bei einer Diskretisierung der Gleichungen einer trockenen Atmosphäre darauf achtet, eine Ankopplung an Tracer zu ermöglichen (s. Punkt 3.), ist es möglich, die numerische Leistungsfähigkeit einer Diskretisierung nur mittels des trockenen Gleichungssystems zu untersuchen:

$$\frac{DU}{Dt} = -\frac{\mathbf{i}}{\rho} \nabla p + \mathbf{U} \times \mathbf{f} + \mathbf{g}, \quad (14.34)$$

$$p = TR_d \rho, \quad (14.35)$$

$$\frac{D\rho}{Dt} = 0, \quad (14.36)$$

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{U}) = 0. \quad (14.37)$$

Dieses System bezeichnet man auch als das der *primitiven, nichthydrostatischen Gleichungen* (Abk. PNEs von engl. *primitive, nonhydrostatic equations*).

Weiterhin hängt die optimale Vorhersagemethode nicht nur von rein mathematischen Fragestellungen ab, sondern auch von der verwendeten Rechnerarchitektur. Die Entwicklung der Großrechner geht in die Richtung von Systemen aus sehr vielen Prozessoren [23]. Die Kapazitäten eines solchen Rechners nutzt man dann optimal aus, wenn jeder Prozessor fortwährend beschäftigt ist. Dies bezeichnet man als *Parallelisierung*. Hierbei fließen Daten zwischen den Prozessoren hin und her, was zeitkritisch ist. Daher ist eine notwendige Bedingung an eine zukunftsrechte Diskretisierung der herrschenden Gleichungen deren *Skalierbarkeit* auf parallelen Rechnerarchitekturen. Mit *Skalierung* ist dabei das Anwachsen der Rechenzeit mit der Auflösung gemeint. Das Länge-Breite-Gitter sowie die spektrale Formulierung stellen sich bezüglich dieses Punktes als unvorteilhaft heraus. Hierzu sind viel mehr *quasi-uniforme* Gitter geeignet. Von *Uniformität* spricht man, wenn alle Ecken, Kanten und Flächen des Gitters kongruent sind. Quasi-Uniformität liegt vor, wenn das Verhältnis von maximalem zu minimalem Gitterpunktabstand mit wachsender Auflösung gleich bleibt und nicht viel größer als Eins ist. Dies ist notwendig für die Skalierbarkeit auf Parallelrechnern.

Ein Gitter heißt orthogonal, wenn ein zweites existiert, dessen Verbindungslien diejenigen des ersten senkrecht schneiden, und die Schnittpunkte der Verbindungslien des einen Gitters in den geometrischen Zentren der Boxen des jeweils anderen liegen. Diese beiden Gitter nennt man dual. Orthogonalität ist bei der Formulierung der Differenzialoperatoren hilfreich.

Es gibt nur fünf platonische Körper. Dementsprechend existieren nur fünf uniforme Gitter auf der Kugel. Diese entstehen aus den platonischen Körpern, indem man ihre Ecken vom Mittelpunkt auf die Kugeloberfläche projiziert. All diese Gitter sind zu grob für ein Atmosphärenmodell. Daher haben alle verwendbaren Gitter irgendwo Punkte, Linien oder Flächen, an denen die lokale Gitterstruktur von der allgemeinen Struktur abweicht. An diesen Stellen sind die Fehler der Diskretisierung ebenfalls anders, was zu einer Sichtbarkeit des Gitters in der Lösung führen kann oder Wellen erzeugen kann, die als Lärm durch die Lösung propagieren.

14.3 Festlegung auf das C-Gitter

Diskretisiert man ein zweidimensionales Vektorfeld auf ein ebenes Gitter, so müssen keineswegs alle Variablen an den gleichen Punkten ausgewertet werden. Die unterschiedlichen Größen können an unterschiedlichen Stellen der Polygone definiert werden. Fünf Arten, dies zu tun, sind die Arakawa-Gitter [4], die in Abb. 14.2 dargestellt sind.

14.3.1 Skalare Erhaltungseigenschaft

Ist q eine Erhaltungsgröße, also eine Größe, für die $\frac{Dq}{Dt} = 0$ gilt, so kann man für $\tilde{q} := \rho q$ eine Kontinuitätsgleichung herleiten:

$$\frac{Dq}{Dt} = \frac{\partial q}{\partial t} + \mathbf{U} \cdot \nabla q = 0, \quad (14.38)$$

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \mathbf{U} \cdot \nabla \rho + \rho \nabla \cdot \mathbf{U} = 0, \quad (14.39)$$

$$\Rightarrow \frac{\partial \tilde{q}}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{j}_{\tilde{q}} = 0, \quad (14.40)$$

wobei die Größe $\mathbf{j}_{\tilde{q}} := \tilde{q} \mathbf{U}$ den Fluss der Größe q bezeichnet. Definiert man

$$Q := \int_A \tilde{q} d^3 r \quad (14.41)$$

als das globale Integral der Größe q , so ist Q unter kinematischen Randbedingungen erhalten:

$$\frac{dQ}{dt} = - \int_A \nabla \cdot \mathbf{j}_{\tilde{q}} d^3 r = - \int_{\partial A} \mathbf{j}_{\tilde{q}} \cdot \mathbf{n} \quad (14.42)$$

Zerlegt man A nun in $N \geq 1$ Gitterboxen $A = A_1 \cup A_2 \cup \dots \cup A_N$, so gilt

$$Q = \sum_{i=1}^N Q_i \quad (14.43)$$

mit

$$Q_i := \int_{A_i} \tilde{q} d^3 r. \quad (14.44)$$

Somit gilt

$$\frac{dQ}{dt} = \sum_{i=1}^N \frac{dQ_i}{dt} = - \sum_{i=1}^N \int_{\partial A_i} \mathbf{j}_{\tilde{q}} \cdot \mathbf{n} = - \sum_{i=1}^N \sum_{F \in F_i} \mathbf{j}_{\tilde{q}} \cdot \mathbf{n}_F, \quad (14.45)$$

wobei F_i die Menge aller Seitenflächen der Gitterbox i ist, und \mathbf{n}_F der auf der Fläche F senkrecht stehende Normalenvektor (nach außen zeigend). Dabei wird davon ausgegangen, dass ∂A_i jeweils aus einer Anzahl glatter Flächen besteht, über die einzeln zu summieren ist, da sie durch Kanten getrennt sind. Da jede Fläche F in der Doppelsumme zweimal auftritt, jedoch der Vektor \mathbf{n} dabei in zwei entgegengesetzte Richtungen zeigt, ergibt sich die Summe zu null, sodass auf einem C-Gitter auch nach der Diskretisierung

$$Q = \text{const.} \quad (14.46)$$

gilt. Flächen, die Teil von ∂A sind, stellen dabei trivialerweise kein Problem da, da durch sie unter kinematischen Randbedingungen per Definition überhaupt kein Massenfluss stattfindet. Auch unter der verallgemeinerten Vo-

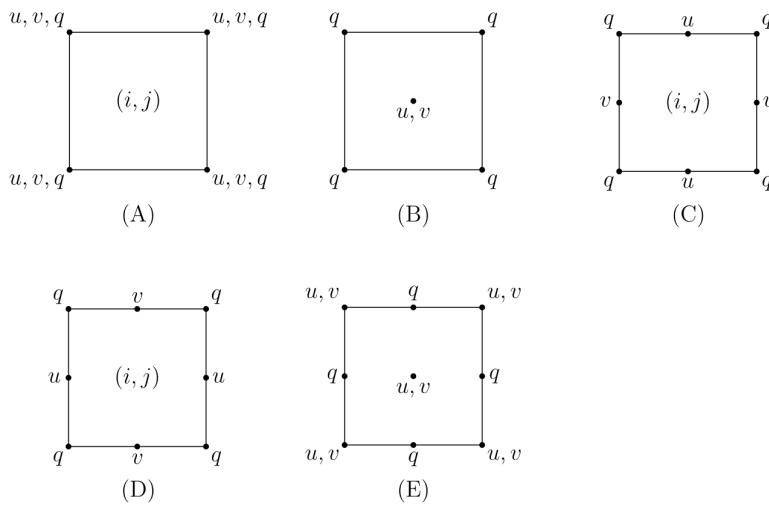


Abbildung 14.2: Die fünf Gitterstrukturen nach Arakawa. Die Massenvariable wurde mit q bezeichnet [24].

raussetzung, dass $j_{\tilde{q}}$ nicht nur aus $\tilde{q}U$, sondern aus weiteren, insbesondere diffusiven Flüssen besteht, gilt dies noch. Angemerkt werden sollte außerdem, dass selbst bei fehlerhafter Berechnung von Gittergeometrien Q eine Erhaltungsgröße bleibt.

Auch die Diskretisierung des Gradienten ist einfach und sofort zweiter Ordnung, da es um einen zentralen Differenzenquotienten handelt (s. Absch. 14.1.1). Die Vorticity kann auf dem dualen Gitter ohne weiteres aus dem Stokes'schen Satz bestimmt werden.

Es werden alle als notwendig identifizierten Punkte zusammengefasst:

- keine spektrale Formulierung
- quasi-uniformes Gitter
- orthogonales Gitter
- ellipsoidisches Gitter

14.4 Festlegung auf das hexagonale Gitter

[3] vergleicht fünf quasi-uniforme, sphärische C-Gitter anhand verschiedener numerischer Tests, wobei die SWEs verwendet werden. Den Ergebnissen ist zu entnehmen, dass das hexagonale Gitter den anderen überlegen ist.

15 ENTWICKLUNG EINES GLOBALEN DYNAMISCHEN KERNS

15.1 Gitter

15.1.1 Konstanten des hexagonalen Gitters

Zunächst schreibt man einen Ikosaeder in eine Kugel ein. Dieser besteht aus 20 Dreiecken, somit ergibt sich die Anzahl E der Ecken zu

$$E = \frac{3 \cdot 20}{5} = 12, \quad (15.1)$$

da jede Ecke von fünf Polygonen berührt wird. Die Anzahl K der Kanten ist

$$K = \frac{3 \cdot 20}{2} = 30. \quad (15.2)$$

Nun wird jedes Dreieck n -mal in jeweils vier Dreiecke unterteilt, hierbei ist $n \in \mathbb{N}$. Anschließend existieren

$$D = 20 \cdot 4^n \quad (15.3)$$

Dreiecke. Die Flächen dieser Dreiecke sind identisch, sie betragen

$$A_D = r^2 \frac{4\pi}{D} = \frac{\pi r^2}{5 \cdot 4^n}. \quad (15.4)$$

Das duale Gitter des so entstehenden Gitters ist das hexagonale Gitter. Dieses besteht aus

$$N = N_5 + N_6 \quad (15.5)$$

Polygonen, wobei N_5 die Anzahl der Fünfecke und N_6 die Anzahl der Sechsecke bezeichnet. Fünfecke entstehen nur an den zwölf Ecken des Ikosaeders, also ist $N_5 = 12$ unabhängig von n . Die Anzahl der Ecken dieses Gitters ist

$$\frac{5N_5 + 6N_6}{3} = D = 20 \cdot 4^n, \quad (15.6)$$

da jede Ecke von drei Polygonen berührt wird; dies ist gleich der Anzahl der Dreiecke. Also folgt

$$5N_5 + 6N_6 = 60 + 6N_6 = 60 \cdot 4^n \Rightarrow N_6 = 10(4^n - 1) \Rightarrow N = 10(4^n - 1) + 12. \quad (15.7)$$

Dies ist die Anzahl der skalaren Freiheitsgrade pro Modellebene $N_S^{(H)}$. Die Anzahl $N_V^{(H)}$ der vektoriellen Freiheitsgrade pro Modellebene ergibt sich zu

$$N_V^{(H)} = \frac{5N_5 + 6N_6}{2} = \frac{60 \cdot 4^n}{2} = 30 \cdot 4^n. \quad (15.8)$$

Die Anzahl der Layer N_L willkürlich zu

$$N_L = 2 + 6 \cdot n \quad (15.9)$$

festgelegt. Die Gesamtzahl der horizontalen Vektoren ist $N_L \cdot N_V^{(H)}$, hierzu ist die Anzahl der vertikalen Vektoren $N_S^{(H)} \cdot (N_L + 1)$ zu addieren, um die Gesamtanzahl

$$N_V = N_L \cdot N_V^{(H)} + N_S^{(H)} \cdot (N_L + 1) \quad (15.10)$$

der Vektoren zu erhalten. Für die Gesamtzahl der Skalare N_S gilt

$$N_S = N_L \cdot N_S^{(H)} = N_L [10(4^n - 1) + 12]. \quad (15.11)$$

Die Grundflächen A_5 der Pentagone ergeben sich zu

$$A_5 = \frac{5}{3} A_D = \frac{\pi r^2}{3 \cdot 4^n}, \quad (15.12)$$

diejenigen der Hexagone zu

$$A_6 = \frac{6}{3} A_D = \frac{2\pi r^2}{5 \cdot 4^n}. \quad (15.13)$$

Auf dem dualen Gitter (dem Dreiecksgitter) gelten

$${}^{(D)}N_S^{(H)} = 20 \cdot 4^n, \quad (15.14)$$

$${}^{(D)}N_S = 20 \cdot 4^n (N_L + 1), \quad (15.15)$$

$${}^{(D)}N_V^{(H)} = 30 \cdot 4^n, \quad (15.16)$$

$${}^{(D)}N_V = 30 \cdot 4^n (N_L + 1) + 20 \cdot 4^n \cdot N_L. \quad (15.17)$$

15.1.2 Horizontales Gitter

15.1.2.1 Delaunay-Triangulation

15.1.2.2 Voronoi-Diagramme

15.1.2.3 Gittergenerierung auf der Einheitskugel

15.1.2.4 Berechnung von Längen und horizontalen Flächen

15.1.3 Vertikale Erweiterung

Man definiert die Höhenkoordinate σ durch

$$\sigma := \frac{R - h}{H - h} \quad (15.18)$$

mit H als Oberrand der Atmosphäre und h als Höhe der Erdoberfläche. Die geometrischen Höhen R bezeichnen Geopotentialflächen über deren Äquatorradius, s. Absch. ???. Die Vorstellung, dass h eine Funktion der horizontalen Koordinaten ist, ist falsch, wenn man an Gebäude, Pflanzen und Schluchten denkt. Diese Strukturen sind jedoch kleinträumig. Erst, wenn die horizontale Modellauflösung die Größenordnung von zehn Metern erreicht, muss man sie berücksichtigen.

Um leichter kommunizieren zu können, werden folgende Festlegungen getroffen:

- Ein *Layer* ist eine Schicht von Gitterzellen.
- Ein *Level* ist der Rand eines Layers.
- Die Nummerierung beginnt am Oberrand der Atmosphäre bei Null. Gibt es n Layer, so gibt es $n + 1$ Level.
- Alle Variablen werden in der Mitte der Layer angeordnet (der Begriff *Mitte* bezieht sich auf die oben definierte σ -Koordinate), Vertikalkomponenten von Vektorfeldern in den Levels.
- Die Radialkomponente eines Vektorfeldes zeigt positiv nach oben.

Sei ein Gitter mit n Layern gegeben. σ_i sei die σ -Koordinate des i -ten Levels. Das vertikale Gitter soll sich an der Forderung orientieren, dass im klimatologischen Mittel bei $h = 0$ alle Schichten gleich viel Masse enthalten sollten. Hierzu geht man von einer isothermen, hydrostatischen Atmosphäre aus. Die p -Koordinate von σ_i ist im Fall $h = 0$ gegeben durch

$$p(\sigma_i) = p_0 \frac{i + 1}{n + 1} \quad (15.19)$$

mit p_0 als Druck bei $z = 0$. Dies kann man mit der barometrischen Höhenformel verknüpfen,

$$p_0 \frac{i + 1}{n + 1} = p_0 \exp\left(-\frac{z_i}{S}\right) \Leftrightarrow z_i = S \ln\left(\frac{n + 1}{i + 1}\right), \quad (15.20)$$

hierbei ist S die Skalenhöhe. Für H gilt mit $i = 0$

$$H = S \ln(1 + n). \quad (15.21)$$

Ist dies größer als die in Absch. 3.6.1 berechneten 85 km, wird $H = 85$ km gesetzt. Mit Glg. (15.18) folgt

$$\sigma_i = \frac{S}{H} \ln \left(\frac{1 + n}{1 + i} \right). \quad (15.22)$$

Die σ -Koordinate m_i des i -ten Layers wird definiert durch

$$m_i := \frac{s_i + s_{i+1}}{2}. \quad (15.23)$$

Die so berechneten σ_i und m_i werden auch auf den Fall $h \neq 0$ übertragen, um sicherzustellen, dass die unteren Level der Orographie deutlicher folgen als die oberen.

15.1.3.1 Berechnung von vertikalen Flächen und Volumina

15.2 Felder

Zunächst einige Definitionen. Seien f ein Skalarfeld und \mathbf{U}, \mathbf{V} Vektorfelder, dann bezeichne die diskretisierten Versionen dieser Felder durch $f', \mathbf{U}', \mathbf{V}'$. Seien weiter $B \subseteq \mathbb{R}^3$ eine Gitterbox mit dem Volumen $V(B)$, B_A die Menge aller Seitenflächen von B und B_B die Menge aller angrenzenden Gitterboxen, bezeichne weiter den Abstand zweier Gitterboxen B, B' mit $B' \in B_B$ durch $L_{B,B'}$. Definiere außerdem für alle $B' \in B_B$ eine Abbildung $A = A(B')$ sowie für alle $A \in B_A$ eine Abbildung $B' = B'(A)$, welche jede angrenzende Fläche A mit der jeweiligen Gitterbox B' verknüpfen. Für den Flächeninhalt einer Fläche $A \subseteq \mathbb{R}^3$ wird der Ausdruck $V_2(A) \geq 0$ notiert. Die diskretisierten Operatoren werden, genau wie die Felder, mit gestrichenen Symbolen gekennzeichnet, um sie von ihren kontinuierlichen Gegenstücken abzugrenzen. Wichtig ist außerdem, zu berücksichtigen, dass horizontale Verbindungslien entlang eines Großkreises berechnet werden.

Der Strich als Symbol der Diskretisierung wird von nun an vernachlässigt.

15.2.1 Skalarfelder

Die Übersetzung $f \rightarrow f'$ definiert man durch

$$f'_B := \frac{1}{V(B)} \int_B f d^3r \quad (15.24)$$

für alle Gitterboxen B . Die Gitterpunkte der skalaren Variablen befinden sich in den massengewichteten Zentren der Gitterboxen, wobei von der Standardatmosphäre ausgegangen wird.

15.2.2 Vektorfelder

Die Übersetzung $\mathbf{U} \rightarrow \mathbf{U}'$ definiert man durch

$$u_A := \frac{1}{V_2(A)} \int_A \mathbf{U} \cdot d\mathbf{n}, \quad (15.25)$$

die Richtung von \mathbf{n} wird willkürlich festgelegt. u_A wird dort angeordnet, wo die Verbindungsline der beiden angrenzenden Gitterboxen durch A hindurchtritt. Es macht Sinn, an dieser Stelle eine Vorzeichenfunktion $s = s(\bar{B}, A)$ mit $A \in B_A$ zu definieren, die für alle Gitterboxen B definiert ist. Diese sei positiv, wenn u_A in Bezug auf B nach außen zeigt, sonst negativ.

15.2.3 Duale Vektorfelder

Duale Vektorfelder werden analog zu Vektorfeldern definiert, da das duale Gitter auch als C-Gitter verstanden wird.

Durch die Definitionen in den Abschnitten 15.2.1 - 15.2.3 sind auch Linearkombinationen der jeweiligen Felder festgelegt.

15.3 Operatoren

Ziel dieses Abschnittes ist es, herzuleiten, wie Skalarfelder, Vektorfelder, differentielle und algebraische Operatoren und Randbedingungen zu diskretisieren sind. Hierzu betrachtet man die Atmosphäre $A \subseteq \mathbb{R}^3$ zunächst als offene Kugelschale und verwendet als Gleichungssystem die reversiblen Gleichungen

$$\frac{DU}{Dt} = -\frac{\mathbf{I}}{\rho} \nabla p - \mathbf{f} \times \mathbf{U} + \mathbf{g}, \quad (15.26)$$

$$\frac{\partial \varphi}{\partial t} + \nabla \cdot (\varphi \mathbf{U}) = \mathbf{o}, \quad (15.27)$$

$$c^{(v)} \frac{DT}{Dt} - \frac{p}{\varphi} \frac{D\varphi}{Dt} = \mathbf{o}, \quad (15.28)$$

$$p = \varphi R_d T \quad (15.29)$$

ohne Näherungen mit der Randbedingung

$$\mathbf{U} \cdot \mathbf{n} = \mathbf{o} \quad (15.30)$$

auf ∂A . Man fordert nun, dass alle Gleichungen in Termen von $p, \varphi, T, \mathbf{U}$, die durch algebraische Umformung, Differentiation bis zur dritten Ordnung und Integration über A aus diesem Gleichungssystem hervorgehen, auch nach der Diskretisierung noch zu gelten haben. Dies ist eine endliche, aber sehr große und heterogene Menge an Implikationen. Insbesondere sind damit alle Wellenlösungen und ihre Dispersionsrelationen abgedeckt. Voraussetzungen hierfür sind die Gültigkeit der unabhängigen Rechenregeln für den Nabla-Operator aus Absch. A.10.2, die hier noch einmal aufgezählt werden, sowie die wichtigen Idenditäten, die für Skalarprodukt und Vektorprodukt gelten. $\mathbf{U}, \mathbf{V}, \mathbf{W}$ seien Vektorfelder und ψ ein Skalarfeld:

$$\nabla \times \nabla \psi = \mathbf{o} \quad (15.31)$$

$$\nabla \cdot \nabla \times \mathbf{o} = \mathbf{o} \quad (15.32)$$

$$\nabla \cdot (\psi \mathbf{V}) = \mathbf{V} \cdot \nabla \psi + \psi \nabla \cdot \mathbf{V} \quad (15.33)$$

$$\nabla \times \psi \mathbf{V} = -\mathbf{V} \times \nabla \psi + \psi \nabla \times \mathbf{V} \quad (15.34)$$

$$\nabla (\mathbf{V} \cdot \mathbf{W}) = (\mathbf{V} \cdot \nabla) \mathbf{W} + (\mathbf{W} \cdot \nabla) \mathbf{V} + \mathbf{V} \times (\nabla \times \mathbf{W}) + \mathbf{W} \times (\nabla \times \mathbf{V}) \quad (15.35)$$

$$\nabla \times (\mathbf{V} \times \mathbf{W}) = (\mathbf{W} \cdot \nabla) \mathbf{V} - \mathbf{W} (\nabla \cdot \mathbf{V}) + \mathbf{V} (\nabla \cdot \mathbf{W}) - (\mathbf{V} \cdot \nabla) \mathbf{W} \quad (15.36)$$

$$\nabla (\nabla \cdot \mathbf{V}) = \Delta \mathbf{V} + \nabla \times (\nabla \times \mathbf{V}) \quad (15.37)$$

$$\nabla \cdot (\mathbf{V} \times \mathbf{V}) = \mathbf{W} \cdot (\nabla \times \mathbf{V}) - \mathbf{V} \cdot (\nabla \times \mathbf{W}) \quad (15.38)$$

$$\mathbf{U} \cdot [(V \cdot \nabla) \nabla \psi] = \mathbf{V} \cdot [(U \cdot \nabla) \nabla \psi] \quad (15.39)$$

$$(U \cdot \nabla) (V \cdot \mathbf{W}) = \mathbf{W} \cdot [(U \cdot \nabla) \mathbf{V}] + \mathbf{V} \cdot [(U \cdot \nabla) \mathbf{W}] \quad (15.40)$$

$$\mathbf{V} \times \mathbf{W} = -\mathbf{W} \times \mathbf{V} \quad (15.41)$$

$$\mathbf{V} \cdot (\mathbf{V} \times \mathbf{W}) = \mathbf{o} \quad (15.42)$$

$$\mathbf{V} \cdot \mathbf{W} = V W \cos(\angle\{\mathbf{V}, \mathbf{W}\}) \quad (15.43)$$

Dabei schränkt man sich noch wie folgt ein:

- Man betrachtet ein dreidimensionales, duales C-Gitter-Paar.
- Die Divergenz macht aus einem Vektorfeld ein Skalarfeld.
- Die **duale Divergenz** macht aus einem dualen Vektorfeld ein **duales Skalarfeld**.
- Die Rotation macht aus einem Vektorfeld ein duales Vektorfeld.
- Die duale Rotation macht aus einem dualen Vektorfeld ein Vektorfeld.

Die **grün** markierten Felder und Operatoren benötigt man nur für die Überprüfung der Gültigkeit der obigen Forderungen, jedoch nicht für den dynamischen Kern selbst. Dieses Verfahren wird als *konditionelles Framework* bezeichnet und es erlaubt, zwischen *richtigen* und *falschen* Diskretisierungen zu unterscheiden.

15.3.1 Multiplikation eines Skalarfeldes mit einem Vektorfeld

Man definiert

$$(f\mathbf{U})_A := u_A \frac{w_B f_B + w}{w_B f_B + w}. \quad (15.44)$$

Die Gewichtungsfaktoren
Hier definiert man

$$(U \cdot V) = \sum_{A \in B_A} u_A v_A. \quad (15.45)$$

15.3.2 Skalarprodukt

15.3.3 Vektorprodukt

Gesucht wird nach einer Diskretisierung des Vektorproduktes so, dass die Eigenschaften

$$U \times V = -V \times U \quad (15.46)$$

sowie

$$U \cdot (U \times V) = V \cdot (U \times V) = 0 \quad (15.47)$$

erhalten bleiben. Das Vektorprodukt ist ein Operator, welcher aus zwei Vektoren einen neuen macht. Es gibt auf dem einem C-Gitter also acht verschiedene Vektorprodukte:

1. (Vektorfeld, Vektorfeld) → Vektorfeld
2. (Vektorfeld, duales Vektorfeld) → Vektorfeld
3. (duales Vektorfeld, Vektorfeld) → Vektorfeld
4. (duales Vektorfeld, duales Vektorfeld) → Vektorfeld
5. (Vektorfeld, Vektorfeld) → duales Vektorfeld
6. (Vektorfeld, duales Vektorfeld) → duales Vektorfeld
7. (duales Vektorfeld, Vektorfeld) → duales Vektorfeld
8. (duales Vektorfeld, duales Vektorfeld) → duales Vektorfeld

Die zweite Variante ist jedoch ausreichend für das gesamte Modell.

15.3.4 Gradient

Das Gradientenfeld ∇f ist ein Vektorfeld. Sei $(\nabla f)_A$ mit $A \in B_A$ eine Komponente dieses Feldes, dann definiert man diese durch

$$(\nabla f)_A := s(B, A) \frac{f_{B'(A)} - f_B}{L_{B, B'}}. \quad (15.48)$$

15.3.5 Divergenz

Für das Mittel

$$\overline{\nabla \cdot U} = \frac{1}{V(B)} \int_B \nabla \cdot U d^3 r \quad (15.49)$$

der Divergenz von U in der Menge B gilt mit dem Gauß'schen Satz

$$\overline{\nabla \cdot U} = \frac{1}{V(B)} \int_{\partial B} U \cdot d\mathbf{n}. \quad (15.50)$$

Man definiert somit

$$\nabla \cdot U := \frac{1}{V(B)} \sum_{A \in B_A} s(B, A) V_*(A) u_A. \quad (15.51)$$

15.3.6 Rotation

15.3.7 Duale Rotation

15.4 Zusammensetzung der prognostischen Gleichungen

Das Gleichungssystem des dynamischen Kerns ist das der PNE Glg.en (14.34) - (14.37). Die Striche an den Feldern und Operatoren werden nun der Übersichtlichkeit halber weggelassen.

$$\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} \stackrel{\text{Glg.en (A.234), (3.205)}}{=} -c^{(p)} \exp\left(\frac{\tilde{s}}{\varrho}\right) \nabla \Pi + \mathbf{U} \times \boldsymbol{\eta} - \nabla k + \mathbf{g} \quad (15.52)$$

$$\frac{\partial \tilde{s}}{\partial t} \stackrel{\text{Glg. (3.195)}}{=} -\nabla \cdot (\tilde{s} \mathbf{U}) \quad (15.53)$$

$$\frac{\partial \varrho}{\partial t} \stackrel{\text{Glg. (A.226)}}{=} -\nabla \cdot (\varrho \mathbf{U}) \quad (15.54)$$

$$\Pi \stackrel{\text{Glg. (3.202)}}{=} \left(\frac{\varrho R_d \exp\left(\frac{\tilde{s}}{\varrho}\right)}{p_\circ} \right)^{R_d/c^{(v)}}. \quad (15.55)$$

In Glg. (15.52) bietet sich das in Absch. 4.1 hergeleitete Verfahren an, die Schwere \mathbf{g} durch einen hydrostatisch balancierten Grundzustand $\{\bar{\theta}, \bar{\Pi}\}$ auszudrücken, also

$$-c^{(p)} \theta \nabla \Pi + \mathbf{g} = -c^{(p)} \theta' \nabla \Pi' - c^{(p)} \bar{\theta} \nabla \Pi' - c^{(p)} \theta' \nabla \bar{\Pi} = -c^{(p)} \theta \nabla \Pi' - c^{(p)} \theta' \nabla \bar{\Pi}. \quad (15.56)$$

Den Grundzustand berechnet man über die hydrostatische Grundgleichung Glg. (4.1)

$$\frac{\partial \bar{p}}{\partial z} = -g \bar{\rho} = -g \frac{\bar{p}}{R_d \bar{T}(z)}. \quad (15.57)$$

Zunächst geht man von einem homogenen Betrag der Schwere g aus. Als Temperaturprofil verwendet man

$$\bar{T}(z) = T_{\text{str}} + (T_{\text{sl}} - T_{\text{str}}) \exp\left(-\frac{z}{H}\right) \quad (15.58)$$

mit einer Skalenhöhe $H > 0$, T_{sl} als mittlerer Temperatur auf Meereshöhe und $T_{\text{str}} < T_{\text{sl}}$ als einer geringeren Temperatur, die ungefähr der Temperatur der Stratosphäre entspricht. Setzt man dies in Glg. (15.57) ein, erhält man

$$\frac{\partial \bar{p}}{\partial z} = -\frac{g}{R_d} \frac{\bar{p}}{T_{\text{str}} + (T_{\text{sl}} - T_{\text{str}}) \exp\left(-\frac{z}{H}\right)} = -\frac{g}{R_d T_{\text{str}}} \frac{\bar{p}}{1 + \left(\frac{T_{\text{sl}}}{T_{\text{str}}} - 1\right) \exp\left(-\frac{z}{H}\right)}. \quad (15.59)$$

Für den Druck macht man den Ansatz $\bar{p} = p_{\text{sl}} e^{f(z)}$ mit p_{sl} als mittlerem Druck auf Meereshöhe und einer Funktion $f(z)$ mit $f(0) = 0$. Setzt man dies ein, folgt

$$f'(z) = -\frac{g}{R_d T_{\text{str}}} \frac{1}{1 + \left(\frac{T_{\text{sl}}}{T_{\text{str}}} - 1\right) \exp\left(-\frac{z}{H}\right)}. \quad (15.60)$$

Die Funktionenschar

$$g_a(z) = \beta H \ln\left(a + e^{\frac{z}{H}}\right) \quad (15.61)$$

erfüllt

$$g'_a(z) = \beta \frac{e^{\frac{z}{H}}}{a + e^{\frac{z}{H}}} = \beta \frac{1}{1 + ae^{-\frac{z}{H}}}. \quad (15.62)$$

Wählt man also

$$\alpha = \frac{T_{\text{sl}}}{T_{\text{str}}} - 1, \quad (15.63)$$

$$\beta = -\frac{g}{R_d T_{\text{str}}}, \quad (15.64)$$

$$(15.65)$$

so ist Glg. (15.60) erfüllt. Es ist also

$$\begin{aligned} \bar{p}(z) &= p_{\text{sl}} \exp \left(-\frac{gH}{R_d T_{\text{str}}} \ln \left(\frac{T_{\text{sl}}}{T_{\text{str}}} - 1 + e^{\frac{z}{H}} \right) + \frac{gH}{R_d T_{\text{str}}} \ln \left(\frac{T_{\text{sl}}}{T_{\text{str}}} \right) \right) \\ &= p_{\text{sl}} \exp \left(\frac{gH}{R_d T_{\text{str}}} \ln \left(\frac{T_{\text{sl}}}{T_{\text{sl}} - T_{\text{str}} + T_{\text{str}} e^{\frac{z}{H}}} \right) \right) \\ &= p_{\text{sl}} \left(\frac{T_{\text{sl}}}{T_{\text{sl}} - T_{\text{str}} + T_{\text{str}} e^{\frac{z}{H}}} \right)^{\frac{gH}{R_d T_{\text{str}}}}. \end{aligned} \quad (15.66)$$

Hieraus folgt für den Exner-Druck des Hintergrundzustandes

$$\bar{\Pi} = \left(\frac{\bar{p}}{p_{\circ}} \right)^{\frac{R_d}{c(p)}} = \left(\frac{p_{\text{sl}}}{p_{\circ}} \right)^{\frac{R_d}{c(p)}} \left(\frac{T_{\text{sl}}}{T_{\text{sl}} - T_{\text{str}} + T_{\text{str}} e^{\frac{z}{H}}} \right)^{\frac{gH}{c(p) T_{\text{str}}}}. \quad (15.67)$$

Für die potentielle Temperatur $\bar{\theta}$ folgt mit Glg. (15.58)

$$\bar{\theta} = \frac{\bar{T}}{\bar{\Pi}}. \quad (15.68)$$

Für den Gradienten $\nabla \bar{\Pi}$ folgt

$$\begin{aligned} c^{(p)} \bar{\theta} \nabla \bar{\Pi} &= \mathbf{g} \\ c^{(p)} \theta' \nabla \bar{\Pi} &= \frac{\theta'}{\bar{\theta}} \mathbf{g}. \end{aligned} \quad (15.69)$$

Somit wurden alle Terme in Glg. (15.56) berechnet. Bei höhenabhängiger Schwere ist die Ersetzung

$$z \rightarrow z_g, \quad (15.70)$$

$$g \rightarrow g(z = 0) \quad (15.71)$$

ist nach Absch. 4.1 möglich. Das Volumen V eines Rotationsellipsoids mit großer bzw. kleiner Halbachse a bzw. c berechnet sich nach Glg. (A.313) zu

$$V = \frac{4}{3} \pi a^2 c. \quad (15.72)$$

Den sogenannten *volumenkonformen Radius* r berechnet man daraus zu

$$\frac{4}{3} \pi a^2 c \stackrel{!}{=} \frac{4}{3} \pi r^3 \Rightarrow r = (a^2 c)^{1/3}. \quad (15.73)$$

Setzt man für a (c) die große (kleine) Halbachse der Erde ein, erhält man einen sinnvollen Wert für den Erdradius im Modell.

15.4.1 Relaxation der SGA

Die SGA zu relaxieren bedeutet in Kugelkoordinaten, horizontale Schwerekomponenten zuzulassen. Dies erfordert einen hydrostatisch balancierten Grundzustand $\{\bar{\theta}, \bar{\Pi}\}$, der numerisch berechnet werden muss und der nicht-verschwindende horizontale Gradienten hat. Dies wird iterativ nach jeder Bisektion vorgenommen, der dabei berechnete Zustand wird bei der jeweils nächsten Verfeinerung des Gitters auf das neue Gitter interpoliert.

15.4.1.1 Gitteroptimierung

15.4.2 Geländefolgende Koordinaten

Die Orographie ist eine Abbildung $h(\varphi, \lambda)$, die nur von den horizontalen Koordinaten abhängt und die Erdoberfläche um die Höhe h vom Kugelrand auslenkt. Wichtige Forderung an die nun zu formulierende Einbeziehung einer solchen Abbildung in die Diskretisierung ist, dass keine der zu Beginn von Absch. 15.3 aufgeführten Forderungen ihre Gültigkeit verlieren.

15.4.3 Ankopplung eines Strahlungsmodells

15.4.4 Berücksichtigung von Zusatzkomponenten

Führt man $N \geq 1$ Zusatzkomponenten ein (also Anteile der Luft, die nicht zur trockenen Luft gehören), von denen $1 \leq N_C \leq N$ kondensiert sind, so benötigt man N zusätzliche Kontinuitätsgleichungen und N_C zusätzliche Erste Hauptsätze der Thermodynamik. Für die gasförmigen Komponenten sind keine zusätzlichen Ersten Hauptsätze notwendig, anstatt dessen muss man den Hauptsatz für die Gasphase modifizieren. Der Druckgradientterm in der Impulsgleichung ist mit $\frac{\rho_h}{\rho}$ zu multiplizieren, um die Massenträgheit der Kondensate zu berücksichtigen.

15.4.5 Zeitschrittverfahren

15.5 JW-Test

Der Jablonowski-Williamson-Test [15] (im Folgenden JW-Test genannt) ist ein Standardtest für dynamische Kerne. Er geht von einem durch analytische Ausdrücke definierten, baroklinen, realistischen Grundzustand aus, der eine stationäre Lösung der trockenen adiabatischen herrschenden Gleichungen ist. Anschließend wird eine kleine Störung überlagert, die sich in Form barokliner Wellen über mehrere Tage fortpflanzt. Der Test soll zwei Fragen beantworten:

1. Ist der dynamische Kern in der Lage, den stationären Grundzustand beizubehalten?
2. Wie gut wird die Störung simuliert?

15.5.1 Stationärer Grundzustand

15.5.2 Störung

Teil V

Anhang

A MATHEMATISCHE GRUNDLAGEN

A.1 cgs-System

Physikalische Größen werden über ihre Messvorschrift und daher über eine Einheit festgelegt. Alles, was ein Experimentator dabei tut, ist, auf irgendwelchen Gerätschaften eine Skala abzulesen. Eine Eins gibt es in der realen Welt nicht, da keine absolute Grundeinheit vorliegt. Daher können unendlich viele Maßsysteme konstruiert werden, es gibt kein ausgezeichnetes. Welches man verwendet, ist Konvention und daher letzten Endes jedem selbst überlassen. Dass man das eine als natürlicher als das andere wahrnimmt, liegt an der Gewöhnung.

Das gesetzlich verwendete Maßsystem ist das *SI-System* (*Système international d'unités*). Das *cgs-System*, welches ebenfalls in diesem Skript verwendet wird, wird auch als Gaußsystem bezeichnet. Die Grundeinheiten der Mechanik sind bis auf Zehnerpotenzen die des SI:

- Zentimeter (cm)
- Gramm (g)
- Sekunde (s)

Die entsprechende Krafteinheit ist das dyn:

$$1 \text{ dyn} := 1 \text{ g cm/s}^2 \quad (\text{A.1})$$

Das Coulomb-Gesetz für die Kraft \mathbf{F} auf eine Punktladung q_1 am Ort \mathbf{r}_1 aufgrund der elektrostatischen Wechselwirkung mit einer Punktladung q_2 am Ort \mathbf{r}_2 lautet

$$\mathbf{F} = k q_1 q_2 \frac{\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|^3} \quad (\text{A.2})$$

mit $k > 0$. Im cgs-System setzt man

$$k := 1. \quad (\text{A.3})$$

Dadurch ist die Ladung über die Kraft und den Ort als Messgröße festgelegt. Die entsprechende Ladungseinheit bezeichnet man als *esu* (electrostatic unit) und für sie gilt

$$\begin{aligned} 1 \text{ dyn} &= \text{esu}^2 / \text{cm}^2 \\ \Leftrightarrow 1 \text{ esu} &= \text{cm} \sqrt{\text{g cm/s}^2} \\ \Leftrightarrow 1 \text{ esu} &= \text{cm}^{3/2} \text{g}^{1/2} / \text{s}. \end{aligned} \quad (\text{A.4})$$

Ein Vorteil des cgs-Systems ist die Tatsache, dass \mathbf{E} und \mathbf{B} gleiche Einheiten haben und daher addiert werden können.

Das cgs-System wird vorwiegend in der Theoretischen Physik verwendet. Rechnungen sollten im SI-System gemacht werden, da dies das System ist, in dem üblicherweise Messergebnisse angegeben werden.

A.2 Summen und Reihen

Zunächst wird die *Gauß'sche Summenformel* eingesehen. Sie lautet

$$\sum_{i=0}^n i = \frac{n(n+1)}{2}. \quad (\text{A.5})$$

Man beweist dies per vollständiger Induktion. Für $n = 0$ gilt $\sum_{i=0}^{n=0} i = 0 = \frac{1}{2}n(n+1)$. Für $n \in \mathbb{N}$ gelte die Aussage bereits. Dann folgt

$$\sum_{i=0}^{n+1} i = \frac{n(n+1)}{2} + n + 1 = \frac{n^2 + 3n + 2}{2} = \frac{(n+1)(n+2)}{2}. \quad (\text{A.6})$$

Damit ist die Aussage bewiesen.

Der Satz über die geometrische Reihe lautet

$$\sum_{n=0}^{\infty} q^n = \frac{1}{1-q} \quad (\text{A.7})$$

für $q \in \mathbb{C}$ mit $|q| < 1$.

Zunächst gilt für $N \in \mathbb{N}$

$$\sum_{n=0}^{N+1} q^n = \frac{1 - q^{N+2}}{1 - q}. \quad (\text{A.8})$$

Dies zeigt man durch *vollständige Induktion*. Für $N = 0$ ist dies klar, die Aussage gelte für N . Dann gilt

$$\sum_{n=0}^{N+1} q^n = \frac{1 - q^{N+1}}{1 - q} + q^{N+1} = \frac{1 - q^{N+1}}{1 - q} + \frac{q^{N+1} - q^{N+2}}{1 - q} = \frac{1 - q^{N+2}}{1 - q}. \quad (\text{A.9})$$

Mit den Rechenregeln für Folgengrenzwerte und

$$\sum_{n=0}^{\infty} q^n = \lim_{N \rightarrow \infty} \sum_{n=0}^{N+1} q^n \quad (\text{A.10})$$

folgt die Aussage. Weiterhin gilt nach [1]

$$\sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n^4} = \frac{\pi^4}{90}. \quad (\text{A.11})$$

A.3 Kombinatorik

Man definiert den Binomialkoeffizienten

$$\binom{n}{k} := \frac{n!}{k!(n-k)!} \quad (\text{A.12})$$

mit der Fakultät

$$n! := 1 \cdot 2 \cdot \dots \cdot n \quad (\text{A.13})$$

mit $n, k \in \mathbb{N}$ und $n \geq k$. Die Anzahl der Möglichkeiten, $n \in \mathbb{N}$ Elemente anzugeben, ist $n!$. Für das erste Element hat man n Möglichkeiten. Für das zweite nur noch $n-1$, usw., für das letzte Element hat man nur noch genau eine Möglichkeit, es anzugeben. Eine *Permutation* ist eine Bijektion auf der Menge $\{1, 2, \dots, N\}$ mit $1 \leq N \in \mathbb{N}$. Die Menge aller dieser Abbildungen wird mit S_N bezeichnet. Aufgrund der gerade bewiesenen Aussage gilt für die Anzahl $|S_N|$ aller Permutationen

$$|S_N| = N!. \quad (\text{A.14})$$

Man definiert weiter das *Vorzeichen einer Permutation* $\pi \in S_N$ durch $\text{sign}(\pi) := (-1)^M$ mit M als der Anzahl aller paarweisen Vertauschungen, die vorzunehmen sind, um $\text{id} \rightarrow \pi$ zu überführen. Falls M gerade ist, bezeichnet man π als *gerade Permutation*, ansonsten als *ungerade*.

$\binom{n}{k}$ ist die Anzahl der k -elementigen Teilmengen einer n -elementigen Menge. Dies kann man sich leicht überlegen. Seien also eine n -elementige Menge M gegeben sowie ein $k \in \mathbb{N}$ mit $k \leq n$. Für den Fall $k = 0$ ist $\binom{n}{k} = 1$, hier stimmt die Aussage also, weil die einzige in Frage kommende Menge die leere Menge \emptyset ist, und diese ist Teilmenge jeder anderen Menge, auch von sich selbst. Im Fall $n, k > 0$ hat man n Möglichkeiten, das erste Element der Teilmenge auszuwählen. Für das zweite Element bleiben $n-1$ Möglichkeiten und so weiter. Dies führt auf die Zahl $n \cdot (n-1) \cdot \dots \cdot (n-k+1) = \frac{n!}{(n-k)!}$. Hierbei wurden jedoch Mengen doppelt gezählt. Weil die Anzahl der Möglichkeiten, k Elemente anzugeben, $k!$ beträgt, ist die Anzahl der k -elementigen Teilmengen einer n -elementigen Menge gleich $\frac{n!}{k!(n-k)!} = \binom{n}{k}$.

Seien $n, n_1, \dots, n_k \in \mathbb{N}$ mit $\sum_{i=1}^k n_i = n$. Man definiert den *Multinomialkoeffizienten* durch

$$\left(\begin{array}{c} n \\ n_1, \dots, n_k \end{array} \right) := \frac{n!}{n_1! \dots n_k!}. \quad (\text{A.15})$$

Sei eine Menge mit k Elementen gegeben. Aus diesen wählt man n –mal ein zufälliges aus, dabei kann $n \geq k$ oder $n \leq k$ sein. Als Ergebnis hält man die Zahlen n_1, \dots, n_k fest, die angeben, wie oft die Elemente gezogen wurden, das Ergebnis ist also das Tupel (n_1, \dots, n_k) . Der Multinomialkoeffizient $\left(\begin{array}{c} n \\ n_1, \dots, n_k \end{array} \right)$ ist die Anzahl der Ziehungen mit Ergebnis (n_1, \dots, n_k) . $n!$ ist die Anzahl aller Möglichkeiten, die n gezogenen Elemente anzurufen. Für jede solche Anordnung kann man aber die gleichartigen Elemente untereinander vertauschen, ohne das Ergebnis zu verändern. Die Anzahl der Vertauschungen beträgt $n_1! \dots n_k!$.

Der *binomische Lehrsatz*, auch als allgemeine binomische Formel bezeichnet, lautet

$$(a + b)^n = \sum_{k=0}^n \left(\begin{array}{c} n \\ k \end{array} \right) a^k b^{n-k}. \quad (\text{A.16})$$

Für $n = 0$ ist dies klar. Weiter gilt

$$\begin{aligned} (a + b)^{n+1} &= (a + b)^n (a + b) = (a + b) \sum_{k=0}^n \left(\begin{array}{c} n \\ k \end{array} \right) a^k b^{n-k} \\ &= \sum_{k=0}^n \frac{n!}{k! (n - k)!} a^{k+1} b^{n-k} + \sum_{k=0}^n \frac{n!}{k! (n - k)!} a^k b^{n-k+1} \\ &= \sum_{k=1}^{n+1} \frac{n!}{(k - 1)! (n + 1 - k)!} a^k b^{n-k+1} + \sum_{k=0}^n \frac{n!}{k! (n - k)!} a^k b^{n-k+1} \\ &= \sum_{k=1}^{n+1} \frac{(n + 1)!}{k! (n + 1 - k)!} \frac{k}{n + 1} a^k b^{n-k+1} \\ &\quad + \sum_{k=0}^n \frac{(n + 1)!}{k! (n + 1 - k)!} \frac{n + 1 - k}{n + 1} a^k b^{n-k+1} \\ &= \sum_{k=0}^{n+1} \frac{(n + 1)!}{k! (n + 1 - k)!} a^k b^{n-k+1} \left(\frac{k + n + 1 - k}{n + 1} \right) \\ &= \sum_{k=0}^{n+1} \frac{(n + 1)!}{k! (n + 1 - k)!} a^k b^{n+1-k} = \sum_{k=0}^{n+1} \left(\begin{array}{c} n + 1 \\ k \end{array} \right) a^k b^{n+1-k}. \end{aligned} \quad (\text{A.17})$$

Seien (x_1, x_2, x_3) drei kartesische Koordinaten und (e_1, e_2, e_3) die zugehörige Basis. Man definiert das *Levi-Civita-Symbol* $\varepsilon_{i,j,k}$ durch

$$\varepsilon_{i,j,k} := \begin{cases} 1, & (i, j, k) \text{ gerade Permutation von } (1, 2, 3), \\ -1, & (i, j, k) \text{ ungerade Permutation von } (1, 2, 3), \\ 0, & \text{sonst.} \end{cases} \quad (\text{A.18})$$

Dies bedeutet insbesondere

$$\varepsilon_{i,j,k} = \varepsilon_{k,i,j} = \varepsilon_{j,k,i} = -\varepsilon_{j,i,k} = -\varepsilon_{k,j,i} = -\varepsilon_{i,k,j}, \quad (\text{A.19})$$

$$\varepsilon_{i,i,j} = \varepsilon_{i,j,i} = \varepsilon_{j,i,i} = 0. \quad (\text{A.20})$$

Es gilt

$$\begin{aligned} \sum_{n=1}^3 \varepsilon_{l,n,k} \varepsilon_{n,o,j} - \varepsilon_{l,n,j} \varepsilon_{n,o,k} &= \sum_{n=1}^3 \varepsilon_{l,n,k} \varepsilon_{j,n,o} + \varepsilon_{l,n,j} \varepsilon_{k,o,n} = \sum_{n=1}^3 \varepsilon_{j,o,n} \varepsilon_{l,k,n} + \varepsilon_{j,l,n} \varepsilon_{k,o,n} \\ &= \sum_{n=1}^3 \varepsilon_{j,o,n} \varepsilon_{l,k,n} - \varepsilon_{j,l,n} \varepsilon_{o,k,n}. \end{aligned} \quad (\text{A.21})$$

Hier muss man eine Fallunterscheidung machen. Damit der linke Ausdruck ungleich Null ist, muss entweder $j = l$ und $o = k$ oder $j = k$ und $o = l$ gelten. Für den linken Ausdruck kann man also schreiben $\delta_{j,l}\delta_{o,k} - \delta_{j,k}\delta_{o,l}$. Damit der rechte Ausdruck ungleich Null ist, muss entweder $j = o$ und $l = k$ oder $j = k$ und $l = o$ gelten. Für den rechten Ausdruck kann man also schreiben $-\delta_{j,o}\delta_{l,k} + \delta_{j,k}\delta_{o,l}$. Man kann also fortfahren

$$\sum_{n=1}^3 \varepsilon_{j,o,n} \varepsilon_{l,k,n} - \varepsilon_{j,l,n} \varepsilon_{o,k,n} = \delta_{j,l}\delta_{o,k} - \delta_{j,o}\delta_{l,k} = \sum_{n=1}^3 \varepsilon_{j,k,n} \varepsilon_{l,o,n}, \quad (\text{A.22})$$

was man sich leicht klarmacht.

A.4 Determinanten

Sei eine quadratische Matrix $\overleftrightarrow{A} \in \mathbb{C}^{N \times N}$ gegeben mit $1 \leq N \in \mathbb{N}$. Die *Determinante* $\det(A)$ wird definiert durch

$$\det(\overleftrightarrow{A}) := \sum_{\pi \in S_N} \text{sign}(\pi) A_{1,\pi(1)} \cdot \dots \cdot A_{N,\pi(N)}. \quad (\text{A.23})$$

Gelegentlich verwendet man auch die Schreibweise

$$\left| \begin{array}{ccc} A_{1,1} & \dots & A_{1,N} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ A_{N,1} & \dots & A_{N,N} \end{array} \right| := \det(A). \quad (\text{A.24})$$

Zunächst gilt

$$\det(A^T) = \sum_{\pi \in S_N} \text{sign}(\pi) A_{1,\pi(1)}^T \cdot \dots \cdot A_{N,\pi(N)}^T = \sum_{\pi \in S_N} \text{sign}(\pi) A_{\pi(1),1} \cdot \dots \cdot A_{\pi(N),N}. \quad (\text{A.25})$$

Indem man jeden einzelnen Summanden nach aufsteigenden Zeilenindizes sortiert, erhält man

$$\det(A^T) = \sum_{\pi \in S_N} \text{sign}(\pi) A_{\pi(1),1} \cdot \dots \cdot A_{\pi(N),N} = \sum_{\pi \in S_N} \text{sign}(\pi) A_{1,\pi(1)} \cdot \dots \cdot A_{N,\pi(N)} = \det(A). \quad (\text{A.26})$$

Alle nachfolgenden Aussagen werden daher nur für Zeilen bewiesen, die Aussage für Spalten folgt dann analog. Sind zwei Zeilen $1 \leq i, j \leq N$ von A gleich, so ist bereits

$$\det(A) = 0. \quad (\text{A.27})$$

Hierzu sortiere die Elemente $\pi \in S_N$ so zu $N!/2$ Paaren (π, π') , dass π' aus π durch Vertauschung von $\pi(i)$ und $\pi(j)$ hervorgeht. In diesem Fall gilt $\text{sign}(\pi) = -\text{sign}(\pi')$, was die Aussage zeigt. Geht die j -te Zeile aus der i -ten Zeile durch Multiplikation mit einer komplexen Konstante $C \in \mathbb{C}$ hervor, gilt also $A_{j,k} = CA_{i,k}$ für alle $1 \leq k \leq N$, so folgt ebenfalls

$$\det(A) = 0, \quad (\text{A.28})$$

indem man C einfach vor die die Determinante definierende Summme zieht. Ist die j -te Zeile eine Linearkombination der anderen $N-1$ Zeilen, existieren also Konstanten $C_l \in \mathbb{C}$ für $1 \leq l \leq N$ mit $l \neq j$ mit $A_{j,k} = \sum_{l=1, l \neq j}^N C_l A_{l,k}$ für alle $1 \leq k \leq N$, so gilt auch in diesem Fall

$$\det(A) = 0. \quad (\text{A.29})$$

Hierzu muss man einfach $N-1$ -mal die zuvor bewiesene Aussage anwenden.

A.5 Grundfunktionen

Der Begriff der Funktion wird vorausgesetzt. Seien $K \in \{\mathbb{R}, \mathbb{C}\}$ und $a_n \in K$ für alle $n \in \mathbb{N}$. Eine Potenzreihe p zum Entwicklungspunkt $x_0 \in K$ ist eine Reihe der Form

$$p(x) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n (x - x_0)^n. \quad (\text{A.30})$$

Für ihre Ableitungen gilt (man erinnere sich an die Summenregel)

$$p'(x) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n n (x - x_0)^{n-1} = \sum_{n=1}^{\infty} a_n n (x - x_0)^{n-1} \sum_{n=0}^{\infty} a_{n+1} (n+1) (x - x_0)^n, \quad (\text{A.31})$$

$$\frac{d^2}{dx^2} \sum_{n=0}^N a_n x^n = \sum_{n=0}^{\infty} (n+2)(n+1) a_{n+2} (x - x_0)^n, \quad (\text{A.32})$$

$$\frac{d^m}{dx^m} \sum_{n=0}^N a_n x^n = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(n+m)!}{n!} a_{n+m} (x - x_0)^n \quad (\text{A.33})$$

Diese Formeln sind auch auf abbrechende Potenzreihen, sogenannte *Polynome*, anwendbar.

Seien $K \in \{\mathbb{R}, \mathbb{C}\}$ und $f: K \rightarrow K$ eine Funktion. Die Funktion f heißt lokal analytisch in einem Punkt $x_0 \in K$, falls es eine Umgebung M von x_0 und eine Potenzreihe p zum Entwicklungspunkt x_0 gibt so, dass für alle $x \in M$ gilt

$$f(x) = p(x). \quad (\text{A.34})$$

Eine Funktion heißt analytisch, falls sie in jedem Punkt lokal analytisch ist. Es existieren einige Standard-Potenzreihen, die man die *Grundfunktionen* nennt:

- *Polynome*.
- *Rationale Funktionen* (Brüche von Polynomen).
- Die *Exponentialfunktion*

$$\exp(x) := \sum_{n=0}^{\infty} \frac{x^n}{n!}. \quad (\text{A.35})$$

- Die *natürliche Logarithmusfunktion*

$$\ln := \exp^{-1}. \quad (\text{A.36})$$

- Die *Hyperbelfunktionen*

$$\sinh(x) := \frac{\exp(x) - \exp(-x)}{2}, \quad (\text{A.37})$$

$$\cosh(x) := \frac{\exp(x) + \exp(-x)}{2}, \quad (\text{A.38})$$

$$\tanh := \frac{\sinh}{\cosh}. \quad (\text{A.39})$$

- Die entsprechend eingeschränkten Umkehrfunktionen der Hyperbelfunktionen, die sogenannten *Areafunktionen*

$$\operatorname{arsinh} := \sinh^{-1}, \quad (\text{A.40})$$

$$\operatorname{arcosh} := \cosh^{-1}, \quad (\text{A.41})$$

$$\operatorname{artanh} := \tanh^{-1}. \quad (\text{A.42})$$

- Die trigonometrischen Funktionen

$$\sin(x) := -i \sinh(ix), \quad (\text{A.43})$$

$$\cos(x) := \cosh(ix), \quad (\text{A.44})$$

$$\tan := \frac{\sin}{\cos}. \quad (\text{A.45})$$

- Die entsprechend eingeschränkten Umkehrfunktionen der trigonometrischen Funktionen, die sogenannten Arcusfunktionen

$$\arcsin := \sin^{-1}, \quad (\text{A.46})$$

$$\arccos := \cos^{-1}, \quad (\text{A.47})$$

$$\arctan := \tan^{-1} \quad (\text{A.48})$$

Die Exponentialfunktion erfüllt die Rechenregel

$$\begin{aligned} \exp(x+y) &\stackrel{\text{Glg. (A.16)}}{=} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{k!} \sum_{l=0}^k \binom{k}{l} x^l y^{k-l} = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{k!} \sum_{l=0}^k \frac{k!}{l!(k-l)!} x^l y^{k-l} = \sum_{k=0}^{\infty} \sum_{l=0}^k \frac{1}{l!(k-l)!} x^l y^{k-l} \\ &= \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{k=l}^{\infty} \frac{1}{l!(k-l)!} x^l y^{k-l} = \sum_{l=0}^{\infty} \frac{x^l}{l!} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{y^k}{k!} = \exp(x) \exp(y). \end{aligned} \quad (\text{A.49})$$

Hieraus folgt weiter

$$\begin{aligned} 1 &= \exp(x-x) = \exp(x) \exp(-x) \\ \Rightarrow \exp(-x) &= \frac{1}{\exp(x)}. \end{aligned} \quad (\text{A.50})$$

Es ist

$$\exp(x) > 0 \quad (\text{A.51})$$

für alle $x \in \mathbb{R}$. Für $x \geq 0$ ist dies klar. Für $x < 0$ gilt

$$\exp(x) = \frac{1}{\exp(-x)} > 0. \quad (\text{A.52})$$

Somit gelten

$$\cosh^2(x) = \frac{1}{4} (e^{2x} + e^{-2x} + 2) = \frac{1}{4} (e^{2x} + e^{-2x} - 2) + 1 = \sinh^2(x) + 1, \quad (\text{A.53})$$

$$\sin^2(x) + \cos^2(x) = -\sinh^2(ix) + \cosh^2(ix) = 1, \quad (\text{A.54})$$

$$\tanh' = \frac{\cosh^2 - \sinh^2}{\cosh^2} = 1 - \tanh^2 = \frac{1}{\cosh^2}, \quad (\text{A.55})$$

$$\tan' = \frac{\cos^2 + \sin^2}{\cos^2} = 1 + \tan^2 = \frac{1}{\cos^2}. \quad (\text{A.56})$$

Die Grundfunktionen erfüllen folgende Symmetrieeigenschaften:

$$\sinh(-x) = \frac{e^{-x} - e^x}{2} = -\frac{e^x - e^{-x}}{2} = -\sinh(x) \quad (\text{A.57})$$

$$\cosh(-x) = \frac{e^{-x} + e^x}{2} = \frac{e^x + e^{-x}}{2} = \cosh(x) \quad (\text{A.58})$$

$$\Rightarrow \tanh(-x) = -\tanh(x) \quad (\text{A.59})$$

$$\sin(-x) = -i \sinh(-ix) = i \sinh(ix) = -(-i \sinh(ix)) = -\sin(x) \quad (\text{A.60})$$

$$\cos(-x) = \cosh(-ix) = \cosh(ix) = \cos(x) \quad (\text{A.61})$$

$$\Rightarrow \tan(-x) = -\tan(x) \quad (\text{A.62})$$

Es gelten die sogenannten *Additionstheoreme*

$$\begin{aligned}\sinh(x+y) &= \frac{e^x e^y - e^{-x} e^{-y}}{2} = \frac{1}{4} (2e^x e^y - 2e^{-x} e^{-y}) = \frac{1}{4} ((e^x - e^{-x})(e^y + e^{-y}) + (e^y - e^{-y})(e^x + e^{-x})) \\ &= \sinh(x)\cosh(y) + \cosh(x)\sinh(y),\end{aligned}\quad (\text{A.63})$$

$$\begin{aligned}\cosh(x+y) &= \frac{e^x e^y + e^{-x} e^{-y}}{2} = \frac{1}{4} (2e^x e^y + 2e^{-x} e^{-y}) = \frac{1}{4} ((e^x + e^{-x})(e^y + e^{-y}) + (e^y - e^{-y})(e^x - e^{-x})) \\ &= \cosh(x)\cosh(y) + \sinh(x)\sinh(y),\end{aligned}\quad (\text{A.64})$$

$$\begin{aligned}\tanh(x+y) &= \frac{\sinh(x+y)}{\cosh(x+y)} = \frac{\sinh(x)\cosh(y) + \cosh(x)\sinh(y)}{\cosh(x)\cosh(y) + \sinh(x)\sinh(y)} = \frac{\tanh(x)\cosh(y) + \sinh(y)}{\cosh(y) + \tanh(x)\sinh(y)} \\ &= \frac{\tanh(x) + \tanh(y)}{1 + \tanh(x)\tanh(y)}.\end{aligned}\quad (\text{A.65})$$

Wendet man dies auf die trigonometrischen Funktionen an, erhält man

$$\begin{aligned}\sin(x+y) &= -i\sinh(ix+iy) = -i\sinh(ix)\cosh(iy) - i\cosh(ix)\sinh(iy) \\ &= \sin(x)\cos(y) + \cos(x)\sin(y),\end{aligned}\quad (\text{A.66})$$

$$\begin{aligned}\cos(x+y) &= \cosh(ix+iy) = \cosh(ix)\cosh(iy) + \sinh(ix)\sinh(iy) \\ &= \cos(x)\cos(y) - \sin(x)\sin(y).\end{aligned}\quad (\text{A.67})$$

Hieraus folgt

$$\cos(a) = \cos^2\left(\frac{a}{2}\right) - \sin^2\left(\frac{a}{2}\right) = 1 - 2\sin^2\left(\frac{a}{2}\right) = 2\cos^2\left(\frac{a}{2}\right) - 1. \quad (\text{A.68})$$

Weiter gilt die sogenannte *Euler-Identität*

$$\exp(ix) = \frac{\exp(ix) + \exp(-ix) + \exp(ix) - \exp(-ix)}{2} = \cosh(ix) + \sinh(ix) = \cos(x) + i\sin(x). \quad (\text{A.69})$$

Für die Ableitungen der Grundfunktionen gilt

$$\exp'(x) \stackrel{\text{Glg. (A.31)}}{=} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{n+1}{(n+1)!} x^n = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{x^n}{n!} = \exp(x), \quad (\text{A.70})$$

$$\sinh'(x) = \cosh(x), \quad (\text{A.71})$$

$$\cosh'(x) = \sinh(x), \quad (\text{A.72})$$

$$\sin'(x) = \cosh(ix) = \cos(x), \quad (\text{A.73})$$

$$\cos'(x) = -\sin(x). \quad (\text{A.74})$$

Wegen Glg. (A.51) ist \exp auf \mathbb{R} streng monoton steigend. Wegen $\cosh(x) > 0$ für alle reellen x ist \sinh streng monoton steigend, außerdem gelten

$$\lim_{x \rightarrow \infty} \sinh(x) = \infty, \quad (\text{A.75})$$

$$\lim_{x \rightarrow -\infty} \sinh(x) = -\infty. \quad (\text{A.76})$$

Also ist

$$\operatorname{arsinh} : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R} \quad (\text{A.77})$$

definiert, weiterhin gilt

$$\operatorname{arsinh}'(x) = \frac{1}{\cosh(\operatorname{arsinh}'(x))} = \frac{1}{\sqrt{1+x^2}}. \quad (\text{A.78})$$

Es gelten weiterhin

$$\lim_{x \rightarrow \infty} \cosh(x) = \infty, \quad (\text{A.79})$$

$$\lim_{x \rightarrow -\infty} \cosh(x) = \infty, \quad (\text{A.80})$$

das Minimum befindet sich bei $x = 0$, dort ist $\cosh(0) = 1$, also definiert man

$$\operatorname{arcosh}[1, \infty) \rightarrow [0, \infty). \quad (\text{A.81})$$

Für die Ableitung gilt

$$\operatorname{arcosh}'(x) = \frac{1}{\sinh(\operatorname{arcosh}(x))} = \frac{1}{\sqrt{x^2 - 1}}. \quad (\text{A.82})$$

Die Arcusfunktionen haben die Definitions- und Bildmengen

$$\operatorname{arcsin} : [-1, 1] \rightarrow \left[-\frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{2}\right], \quad (\text{A.83})$$

$$\operatorname{arccos} : [-1, 1] \rightarrow [0, \pi], \quad (\text{A.84})$$

$$\operatorname{arctan} : (-\infty, \infty) \rightarrow \left(-\frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{2}\right). \quad (\text{A.85})$$

Ihre Ableitungen berechnen sich zu

$$\operatorname{arcsin}'(x) = \frac{1}{\cos(\operatorname{arcsin}(x))} = \frac{1}{\sqrt{1-x^2}}, \quad (\text{A.86})$$

$$\operatorname{arccos}'(x) = -\frac{1}{\sin(\operatorname{arccos}(x))} = \frac{1}{\sqrt{1-x^2}}, \quad (\text{A.87})$$

$$\operatorname{arctan}'(x) = \frac{1}{\tan'(\operatorname{arctan}(x))} = \frac{1}{1+x^2}. \quad (\text{A.88})$$

Für die Taylor-Entwicklungen erster Ordnung der Grundfunktionen zum Entwicklungspunkt Null folgt

$$\exp(x) \approx 1 + x, \quad (\text{A.89})$$

$$\sinh(x) \approx x, \quad (\text{A.90})$$

$$\cosh(x) \approx 1, \quad (\text{A.91})$$

$$\tanh(x) \approx x, \quad (\text{A.92})$$

$$\sin(x) \approx x, \quad (\text{A.93})$$

$$\cos(x) \approx 1, \quad (\text{A.94})$$

$$\tan(x) \approx x. \quad (\text{A.95})$$

Sei $p(x) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n x^n$ eine Potenzreihe $\mathbb{C} \rightarrow \mathbb{C}$ mit $p(x) = 0$ für alle $x \in \mathbb{C}$, dann gilt bereits $a_n = 0$ für alle $n \in \mathbb{N}$. Dies soll zunächst per Widerspruchsbeweis für ein Polynom, also für eine abbrechende Potenzreihe, eingesehen werden. Nehme also an, dass $a_n = 0$ für alle $N < n \in \mathbb{N}$ ist und nehme weiter an, dass $a_N \neq 0$ ist. Für $|x| \rightarrow \infty$ divergiert jedes Polynom, da Polynome stetig sind existiert insbesondere ein $b \in \mathbb{R}$ mit $b > 0$ und $|p(x)| > 0$ für alle $x \in \mathbb{C}$ mit $|x| > b$ im Widerspruch zur Voraussetzung. Somit ist die Aussage für Polynome gezeigt.

An dieser Stelle sei noch eine Anmerkung über komplexe Zahlen gemacht. Die anschauliche Hürde bei komplexen Zahlen ist, die Existenz der imaginären Einheit $i = \sqrt{-1}$ anzuerkennen. Man kann sich keine Zahl i vorstellen, die diese Gleichung erfüllt. Trotzdem lässt sich damit rechnen, es handelt sich also um ein Hilfsmittel der Theorie. Vor dem Vergleich mit Messungen muss man das Ergebnis jedoch auf die reelle Achse projizieren. Schon bei reellen Zahlen kann man sich fragen, was man anschaulich mit einer Zahl anfangen soll, die niemals abbricht, also einer irrationalen Zahl wie e . Die anschaulichen Grenzen sind im Grunde schon hier überschritten.

A.6 Deltadistribution

Die *Deltadistribution* $\delta(x)$ ist dadurch definiert, dass für jede stetige Funktion $f = f(x)$

$$\int_{a < \circ}^{b > \circ} \delta(x) f(x) dx = f(\circ) \quad (\text{A.96})$$

gilt. Es ist nach [9]

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \frac{4 \sin^2\left(\frac{\Omega t}{2}\right)}{\Omega^2 t} = 2\pi \delta(\Omega). \quad (\text{A.97})$$

Nach [7] gilt

$$\delta(x - x_0) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \exp(ik(x - x_0)) dk. \quad (\text{A.98})$$

A.7 Integralformeln

Seien $f, g : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ Riemann-integrierbar. Dann gilt mit der Produktregel

$$(fg)' = f'g + fg' \Leftrightarrow fg = \int f'g dx + \int fg' dx \Leftrightarrow \int f'g dx = fg - \int fg' dx. \quad (\text{A.99})$$

Dies bezeichnet man als *partielle Integration*.

Seien $a, b \in \mathbb{R}$ mit $a < b$, $f : [a, b] \rightarrow \mathbb{R}$ Riemann-integrierbar, $I \subseteq \mathbb{R}$ ein Intervall, $\varphi : I \rightarrow [a, b]$ stetig-differenzierbar und bijektiv und F eine Stammfunktion von f . Dann gilt

$$\int_a^b f(x) dx = [F(x)]_a^b = [F(\varphi(x))]_{\varphi^{-1}(a)}^{\varphi^{-1}(b)} = \int_{\varphi^{-1}(a)}^{\varphi^{-1}(b)} \frac{d}{dx} (F(\varphi(x))) dx = \int_{\varphi^{-1}(a)}^{\varphi^{-1}(b)} f(\varphi(x)) \varphi'(x) dx. \quad (\text{A.100})$$

Dies bezeichnet man als *Substitutionsregel*.

Es wird das Verfahren der *Trennung der Variablen* hergeleitet. Seien $a, b \in \mathbb{R}$ mit $a < b$ gegeben, seien $h : [a, b] \rightarrow \mathbb{R}$ Riemann-integrierbar, $f : [a, b] \rightarrow \mathbb{R}$ stetig-differenzierbar und bijektiv und $g : f([a, b]) \rightarrow \mathbb{R}$ Riemann-integrierbar mit $g(y) \neq \circ$ für alle $y \in f([a, b])$. Man will die Differenzialgleichung

$$\frac{df}{dx} = g(f) h(x) \quad (\text{A.101})$$

auf $[a, b]$ lösen. Man rechnet

$$\frac{1}{g(f)} \frac{df}{dx} = h(x). \quad (\text{A.102})$$

Dies integriert man nun von a bis zu einem gewünschten $x \in [a, b]$:

$$\int_a^x \frac{1}{g(f(x'))} \frac{df}{dx'} dx' = \int_a^x h(x') dx' \Leftrightarrow \int_{f(a)}^{f(x)} \frac{1}{g(f)} df = \int_a^x h(x') dx' \quad (\text{A.103})$$

Hierbei wurde die Substitutionsregel verwendet. Sind diese beiden Integrale lösbar, erhält man einen algebraischen Ausdruck für $f(x)$. Nun soll

$$\int_{\circ}^{\infty} x^n e^{-\beta x} dx = \frac{n!}{\beta^{n+1}} \quad (\text{A.104})$$

mit $\beta \in \mathbb{R}$, $\beta > \circ$, $n \in \mathbb{N}$ eingesehen werden. Dies tut man am besten per vollständiger Induktion. Für $n = \circ$ gilt

$$\int_{\circ}^{\infty} e^{-\beta x} dx = \frac{1}{\beta}, \quad (\text{A.105})$$

also stimmt die Aussage für $n = 0$. Nun gelte die Aussage für n bereits. Dann folgt per partieller Integration

$$\int_0^\infty x^{n+1} e^{-\beta x} = \left[-\frac{1}{\beta} x^{n+1} e^{-\beta x} \right]_0^\infty + \frac{n+1}{\beta} \int_0^\infty x^n e^{-\beta x} dx = \frac{n+1}{\beta} \frac{n!}{\beta^{n+1}} = \frac{(n+1)!}{\beta^{n+2}}. \quad (\text{A.106})$$

Somit gilt die Aussage für alle $n \in \mathbb{N}$. Weiterhin gilt

$$\int_0^\infty \frac{x^3}{e^x - 1} dx = \frac{\pi^4}{15}. \quad (\text{A.107})$$

Hierfür rechnet man zunächst mit Glg. (A.7)

$$\frac{1}{e^x - 1} = \frac{e^{-x}}{1 - e^{-x}} = \frac{e^{-x} + 1 - 1}{1 - e^{-x}} = \frac{1}{1 - e^{-x}} - 1 = \sum_{n=0}^{\infty} e^{-nx} - 1 = \sum_{n=1}^{\infty} e^{-nx}. \quad (\text{A.108})$$

Damit folgt mit den Glg.en (A.104) und (A.111)

$$\int_0^\infty \frac{x^3}{e^x - 1} dx = \sum_{n=1}^{\infty} \int_0^\infty x^3 e^{-nx} dx = 6 \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n^4} = \frac{\pi^4}{15}. \quad (\text{A.109})$$

Die *Fehlerfunktion* erf ist definiert durch

$$\operatorname{erf}(x) := \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^x e^{-t^2} dt. \quad (\text{A.110})$$

Es gilt nach [1]

$$\lim_{x \rightarrow \infty} \operatorname{erf}(x) = 1. \quad (\text{A.111})$$

Für $C > 0$ folgt

$$\lim_{x \rightarrow \infty} \int_0^\infty e^{-Cx^2} dx = \frac{1}{\sqrt{C}} \lim_{x \rightarrow \infty} \int_0^\infty e^{-x^2} dx = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\pi}{C}}. \quad (\text{A.112})$$

Es folgen

$$\int_0^\infty e^{-Cx^2} x^2 dx = \left[x \left(-\frac{1}{2C} e^{-Cx^2} \right) \right]_0^\infty + \frac{1}{2C} \int_0^\infty e^{-Cx^2} dx = \frac{1}{4} \sqrt{\frac{\pi}{C^3}}, \quad (\text{A.113})$$

$$\begin{aligned} \int_0^\infty e^{-Cx^2} x^3 dx &= \left[x^2 \cdot \left(-\frac{1}{2C} e^{-Cx^2} \right) \right]_0^\infty + \int_0^\infty \frac{x}{C} e^{-Cx^2} dx \\ &= \int_0^\infty \frac{x}{C} e^{-Cx^2} dx = -\frac{1}{2C^2} \left[e^{-Cx^2} \right]_0^\infty = \frac{1}{2C^2}. \end{aligned} \quad (\text{A.114})$$

Man definiert die *Gammafunktion* für $x > 0$ durch

$$\Gamma(x) := \int_0^\infty t^{x-1} e^{-t} dt. \quad (\text{A.115})$$

Für $n \in \mathbb{N}$ gilt wegen Glg. (A.104)

$$\Gamma(n+1) = \int_0^\infty t^n e^{-t} dt = n!. \quad (\text{A.116})$$

Damit folgt insbesondere

$$\Gamma(n+1) = n! = n(n-1)! = n\Gamma(n). \quad (\text{A.117})$$

Man kann dies zur Herleitung der *Stirling-Formel* nutzen, die eine Näherung von $n!$ für hohe n darstellt, was sehr

nützlich ist, wenn es zum Beispiel um die Frage geht, wie viel $(10^{23})!$ ist. Hierzu rechnet man zunächst

$$n! = \Gamma(n+1) = \int_0^\infty t^n e^{-t} dt = \int_0^\infty e^{-t+n\ln(t)} dt = \int_0^\infty e^{-n\varphi(t)} dt \quad (\text{A.118})$$

mit

$$\varphi(t) = \frac{n}{t} \ln(t). \quad (\text{A.119})$$

Es gelten

$$\lim_{t \rightarrow 0} \varphi(t) = \infty, \quad (\text{A.120})$$

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \varphi(t) = \infty. \quad (\text{A.121})$$

Für die ersten beiden Ableitungen gilt

$$\varphi'(t) = \frac{1}{n} - \frac{1}{t}, \quad (\text{A.122})$$

$$\varphi''(t) = \frac{1}{t^2}. \quad (\text{A.123})$$

Das eindeutige Minimum liegt also bei $t = n$. Die Taylor-Entwicklung bis zur zweiten Ordnung zum Punkt $x = n$ lautet also

$$\varphi(t) = 1 - \ln(n) + \frac{1}{2} \frac{(t-n)^2}{n^2} + \mathcal{O}((t-n)^3). \quad (\text{A.124})$$

Der Ausdruck $e^{-n\varphi}$ ist nur für negative und kleine φ relevant, daher ist die Taylor-Entwicklung zum Minimum eine gute Approximation im Integral der Gammafunktion:

$$n! \approx \int_0^\infty e^{-n+n\ln(n)-\frac{1}{2}\frac{(t-n)^2}{n}} dt = n^n e^{-n} \int_0^\infty e^{-\frac{t^2}{2n}} dt = n^n e^{-n} \sqrt{2\pi n}. \quad (\text{A.125})$$

Im letzten Schritt wurde Glg. (A.111) verwendet. Glg. (A.125) ist die Stirling-Formel.

A.7.1 Residuensatz

A.8 Vektorräume

Sei $K \in \{\mathbb{R}, \mathbb{C}\}$, dann definiert man einen Vektorraum V über K in der folgenden Weise: Es gibt eine Abbildung

$$+ : V \times V \rightarrow V; (\mathbf{x}, \mathbf{y}) \mapsto \mathbf{x} + \mathbf{y} \quad (\text{A.126})$$

sowie eine andere Abbildung

$$\cdot : K \times V \rightarrow V; (\lambda, \mathbf{x}) \mapsto \lambda \mathbf{x}. \quad (\text{A.127})$$

Diese beiden Funktionen haben die folgenden Eigenschaften:

$$(\mathbf{x} + \mathbf{y}) + \mathbf{z} = \mathbf{x} + (\mathbf{y} + \mathbf{z}), \quad (\text{A.128})$$

$$\mathbf{x} + \mathbf{y} = \mathbf{y} + \mathbf{x}, \quad (\text{A.129})$$

$$\mathbf{o} + \mathbf{x} = \mathbf{x}. \quad (\text{A.130})$$

Für jedes $\mathbf{x} \in V$ existiert ein $(-\mathbf{x}) \in V$ mit

$$(-\mathbf{x}) + \mathbf{x} = \mathbf{o}. \quad (\text{A.131})$$

Weiterhin sollen gelten

$$\lambda_1 \cdot (\lambda_2 \mathbf{x}) = (\lambda_1 \lambda_2) \cdot \mathbf{x}, \quad (\text{A.132})$$

$$1 \cdot \mathbf{x} = \mathbf{x}, \quad (\text{A.133})$$

$$\lambda(\mathbf{x} + \mathbf{y}) = \lambda\mathbf{x} + \lambda\mathbf{y}, \quad (\text{A.134})$$

$$(\lambda_1 + \lambda_2) \mathbf{x} = \lambda_1 \mathbf{x} + \lambda_2 \mathbf{x}. \quad (\text{A.135})$$

Vektoren, die man als Pfeile im Raum verstehen kann, werden in diesem Buch *fettkursiv* notiert.

Eine Matrix \overleftrightarrow{A} über $K \in \{\mathbb{R}, \mathbb{C}\}$ ist eine rechteckige Anordnung von Elementen aus K mit $m \geq 1$ Zeilen und $n \geq 1$ Spalten. Man schreibt $A_{i,j}$ für das Element in der j -ten Spalte der i -ten Zeile. Man definiert die Transponierte A^T von \overleftrightarrow{A} durch $A_{j,i} = A_{i,j}$ für alle $1 \leq i \leq m$, $1 \leq j \leq n$. Die Multiplikation einer solchen Matrix mit einem Vektor $\mathbf{b} = (b_1, \dots, b_n)^T$ definiert man durch,

$$\overleftrightarrow{A} \mathbf{b} = \sum_{i=1}^m \sum_{j=1}^n A_{i,j} b_j \mathbf{e}_i, \quad (\text{A.136})$$

es entsteht also ein m -dimensionaler Spaltenvektor. Sei allgemeiner eine Matrix \overleftrightarrow{B} über K mit n Zeilen und $l \geq 1$ Spalten gegeben, dann definiert man das Matrizenprodukt $\overleftrightarrow{A} \cdot \overleftrightarrow{B}$ durch

$$(A \cdot B)_{i,j} := \sum_{a=1}^n A_{i,a} B_{a,j}. \quad (\text{A.137})$$

Es gilt

$$(A \cdot B)_{i,j}^T = (A \cdot B)_{j,i} = \sum_{a=1}^n A_{j,a} B_{a,i} = \sum_{a=1}^n B_{a,i} A_{j,a} = \sum_{a=1}^n B_{i,a}^T A_{a,j}^T = (B^T \cdot A^T)_{i,j} \quad (\text{A.138})$$

und somit ist in diesem Fall

$$(\overleftrightarrow{A} \cdot \overleftrightarrow{B})^T = \overleftrightarrow{B}^T \cdot \overleftrightarrow{A}^T. \quad (\text{A.139})$$

Man definiert weiter das Skalarprodukt zweier Vektoren $\mathbf{a}, \mathbf{b} \in \mathbb{R}^n$ durch

$$\mathbf{a} \cdot \mathbf{b} = \langle \mathbf{a} | \mathbf{b} \rangle := \mathbf{a}^T \mathbf{b}. \quad (\text{A.140})$$

Ist \overleftrightarrow{A} eine reelle Matrix, so folgt

$$\langle \mathbf{a} | \overleftrightarrow{A} \mathbf{b} \rangle = \mathbf{a}^T \overleftrightarrow{A} \mathbf{b} = (\overleftrightarrow{A}^T \mathbf{a})^T \mathbf{b} = \langle \overleftrightarrow{A}^T \mathbf{a} | \mathbf{b} \rangle. \quad (\text{A.141})$$

Matrizen mit genauso vielen Zeilen wie Spalten bezeichnet man als *quadratisch*.

Operatoren sind Funktionen zwischen Funktionen. In der Meteorologie sind nur zwei Funktionenräume relevant:

$$F_1 = \{A \times \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}, \text{ unendlich oft stetig-differenzierbar}\} \quad (\text{A.142})$$

$$F_2 = \{A \times \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}^3, \text{ unendlich oft stetig-differenzierbar}\} \quad (\text{A.143})$$

Hierbei ist A die Atmosphäre. Operatoren werden mit einem Dachsymbol gekennzeichnet. Man definiert

$$\begin{aligned} & \hat{A} \text{ linearer Operator :} \\ \Leftrightarrow & \hat{A}(\lambda \psi) = \lambda \hat{A}(\psi) \wedge \hat{A}(\psi_1 + \psi_2) = \hat{A}(\psi_1) + \hat{A}(\psi_2) \end{aligned} \quad (\text{A.144})$$

für jedes $\lambda \in \mathbb{C}$. Seien \hat{A} und \hat{B} Operatoren, dann definiere

$$\hat{A}\hat{B} := \hat{A} \circ \hat{B} \quad (\text{A.145})$$

Sind \hat{A} und \hat{B} linear, gilt

$$\hat{A}(\hat{B}(\lambda\psi)) = \hat{A}(\lambda\hat{B}(\psi)) = \lambda\hat{A}(\hat{B}(\psi)) \Leftrightarrow \hat{A}\hat{B}(\lambda\psi) = \lambda\hat{A}\hat{B}(\psi) \quad (\text{A.146})$$

Weiterhin gilt

$$\hat{A}\hat{B}(\psi_1 + \psi_2) = \hat{A}(\hat{B}(\psi_1) + \hat{B}(\psi_2)) = \hat{A}\hat{B}(\psi_1) + \hat{A}\hat{B}(\psi_2). \quad (\text{A.147})$$

Hintereinanderausführungen linearer Operatoren sind also linear. Weiterhin lässt man die Klammern um das Argument bei Operatoren häufig weg:

$$\hat{A}\psi := \hat{A}(\psi) \quad (\text{A.148})$$

Außerdem gilt

$$\begin{aligned} (\lambda_1\hat{A} + \lambda_2\hat{B})\lambda\psi &= \lambda_1\hat{A}\lambda\psi + \lambda_2\hat{B}\lambda\psi = \lambda_1\lambda\hat{A}\psi + \lambda_2\lambda\hat{B}\psi = \lambda(\lambda_1\hat{A}\psi + \lambda_2\hat{B}\psi) \\ &= \lambda(\lambda_1\hat{A} + \lambda_2\hat{B})\psi \end{aligned} \quad (\text{A.149})$$

sowie

$$\begin{aligned} (\lambda_1\hat{A} + \lambda_2\hat{B})(\psi_1 + \psi_2) &= \lambda_1\hat{A}(\psi_1 + \psi_2) + \lambda_2\hat{B}(\psi_1 + \psi_2) \\ &= \lambda_1\hat{A}\psi_1 + \lambda_1\hat{A}\psi_2 + \lambda_2\hat{B}\psi_1 + \lambda_2\hat{B}\psi_2 \\ &= (\lambda_1\hat{A} + \lambda_2\hat{B})\psi_1 + (\lambda_1\hat{A} + \lambda_2\hat{B})\psi_2. \end{aligned} \quad (\text{A.150})$$

Linearkombinationen linearer Operatoren sind also linear. Da für partielle Ableitungen die normalen Ableitungsregeln gelten, erhält man

$$\frac{\partial}{\partial x_i}\lambda\psi = \lambda\frac{\partial}{\partial x_i}\psi \quad (\text{A.151})$$

$$\frac{\partial}{\partial x_i}(\psi_1 + \psi_2) = \frac{\partial}{\partial x_i}\psi_1 + \frac{\partial}{\partial x_i}\psi_2, \quad (\text{A.152})$$

wobei die Zeit durch eine der x_i abgedeckt sei. Partielle Ableitungen sowie Linearkombinationen partieller Ableitungen (auch mit Basisvektoren) sind also linear.

A.8.1 Vektorprodukt

Seien (x_1, x_2, x_3) drei kartesische Koordinaten und $(\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2, \mathbf{e}_3)$ die zugehörige Basis. Man definiert das Vektorprodukt $\mathbf{A} \times \mathbf{B}$ zweier Vektoren $\mathbf{A} = (A_1, A_2, A_3)^T, \mathbf{B} = (B_1, B_2, B_3)^T$ durch

$$\mathbf{A} \times \mathbf{B} := \sum_{i,j,k=1}^3 \varepsilon_{i,j,k} A_i B_j \mathbf{e}_k. \quad (\text{A.153})$$

Dieses ist linear, denn für $\lambda \in \mathbb{R}$ und $\mathbf{C} \in \mathbb{R}^3$ gelten

$$\begin{aligned} \mathbf{A} \times (\mathbf{B} + \mathbf{C}) &= \sum_{i,j,k=1}^3 \varepsilon_{i,j,k} A_i (B_j + C_j) \mathbf{e}_k = \sum_{i,j,k=1}^3 \varepsilon_{i,j,k} A_i B_j \mathbf{e}_k + \sum_{i,j,k=1}^3 \varepsilon_{i,j,k} A_i C_j \mathbf{e}_k \\ &= \mathbf{A} \times \mathbf{B} + \mathbf{A} \times \mathbf{C}, \end{aligned} \quad (\text{A.154})$$

$$\mathbf{A} \times (\lambda \mathbf{B}) = \sum_{i,j,k=1}^3 \varepsilon_{i,j,k} A_i \lambda B_j \mathbf{e}_k = \lambda \mathbf{A} \times \mathbf{B}. \quad (\text{A.155})$$

Weiterhin ist es antikommutativ,

$$\mathbf{A} \times \mathbf{B} = \sum_{i,j,k=1}^3 \varepsilon_{i,j,k} A_i B_j \mathbf{e}_k = \sum_{i,j,k=1}^3 -\varepsilon_{j,i,k} B_j A_i \mathbf{e}_k = -\mathbf{B} \times \mathbf{A}. \quad (\text{A.156})$$

Für die l -te Komponente, $1 \leq l \leq 3$, des Vektorproduktes findet man

$$(\mathbf{A} \times \mathbf{B})_l = \left(\sum_{i,j,k=1}^3 \varepsilon_{i,j,k} A_i B_j \mathbf{e}_k \right) \cdot \mathbf{e}_l = \sum_{i,j,k=1}^3 \varepsilon_{i,j,k} A_i B_j \delta_{k,l} = \sum_{i,j=1}^3 \varepsilon_{i,j,l} A_i B_j. \quad (\text{A.157})$$

Das Vektorprodukt hat die Orthogonalitätseigenschaften

$$\begin{aligned} \mathbf{A} \cdot (\mathbf{A} \times \mathbf{B}) &= \sum_{i=1}^3 A_i (\mathbf{A} \times \mathbf{B})_i = \sum_{i=1}^3 A_i \sum_{j,k=1}^3 \varepsilon_{j,k,i} A_j B_k = \sum_{k=1}^3 B_k \sum_{i,j=1}^3 \varepsilon_{k,i,j} A_i A_j \\ &= \sum_{k=1}^3 B_k \sum_{i,j=1}^3 A_i A_j - A_j A_i = 0 \end{aligned} \quad (\text{A.158})$$

sowie

$$\mathbf{B} \cdot (\mathbf{A} \times \mathbf{B}) \stackrel{\text{Glg. (A.156)}}{=} -\mathbf{B} \cdot (\mathbf{B} \times \mathbf{A}) = -0 = 0. \quad (\text{A.159})$$

Ferner gilt die sogenannte *Graßmann-Identität*:

$$\begin{aligned} \mathbf{A} \times (\mathbf{B} \times \mathbf{C}) &= \sum_{i,j,k=1}^3 \varepsilon_{i,j,k} A_i (\mathbf{B} \times \mathbf{C})_j \mathbf{e}_k = \sum_{i,j,k=1}^3 \varepsilon_{i,j,k} A_i \left(\sum_{l,m,n=1}^3 \varepsilon_{l,m,n} B_l C_m \mathbf{e}_n \right)_j \mathbf{e}_k \\ &= \sum_{i,j,k=1}^3 \varepsilon_{i,j,k} A_i \sum_{l,m=1}^3 \varepsilon_{l,m,j} B_l C_m \mathbf{e}_k = \sum_{k=1}^3 \mathbf{e}_k \sum_{i=1}^3 A_i \sum_{j,l,m=1}^3 \varepsilon_{j,k,i} \varepsilon_{j,l,m} B_l C_m \\ &= \sum_{k=1}^3 \mathbf{e}_k \sum_{i=1}^3 A_i (B_k C_i - B_i C_k) = \mathbf{B}(\mathbf{A} \cdot \mathbf{C}) - \mathbf{C}(\mathbf{A} \cdot \mathbf{B}) \end{aligned} \quad (\text{A.160})$$

Dies bezeichnet man einprägsamerweise auch als *BAC-CAB-Regel*. Man kann weiterhin schreiben

$$\mathbf{B} \equiv \mathbf{B}_{\parallel} + \mathbf{B}_{\perp}, \quad (\text{A.161})$$

wobei \mathbf{B}_{\parallel} den zu \mathbf{A} parallelen Anteil von \mathbf{B} bezeichnen soll und

$$\mathbf{B}_{\perp} := \mathbf{B} - \mathbf{B}_{\parallel} \quad (\text{A.162})$$

den verbleibenden Anteil von \mathbf{B} , der senkrecht auf \mathbf{A} steht, wie noch gezeigt werden wird. Es gilt

$$\mathbf{B}_{\parallel} = \left(\frac{\mathbf{I}}{|\mathbf{A}|^2} \mathbf{A} \cdot \mathbf{B} \right) \mathbf{A}. \quad (\text{A.163})$$

Hieraus folgt

$$\mathbf{A} \cdot \mathbf{B}_{\perp} = \mathbf{A} \cdot (\mathbf{B} - \mathbf{B}_{\parallel}) = \mathbf{A} \cdot \mathbf{B} - \mathbf{A} \cdot \left(\frac{\mathbf{I}}{|\mathbf{A}|^2} \mathbf{A} \cdot \mathbf{B} \right) \mathbf{A} = 0, \quad (\text{A.164})$$

also steht \mathbf{B}_{\perp} in der Tat senkrecht auf \mathbf{A} . Mit Glg. (A.160) kann man ferner notieren

$$\begin{aligned} \mathbf{A} \times (\mathbf{B} \times \mathbf{A}) &= \mathbf{B} \mathbf{A}^2 - \mathbf{A} (\mathbf{A} \cdot \mathbf{B}) = \mathbf{A}^2 \mathbf{B} - \mathbf{A}^2 \mathbf{B}_{\parallel} = \mathbf{A}^2 \mathbf{B}_{\perp} \\ \Rightarrow \mathbf{B}_{\perp} &= \frac{\mathbf{I}}{\mathbf{A}^2} \mathbf{A} \times (\mathbf{B} \times \mathbf{A}). \end{aligned} \quad (\text{A.165})$$

A.9 Konvention über Koordinatensysteme

A.9.1 Ruhende Koordinaten

Hier wählt man eine Basis $\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2, \mathbf{e}_3$, die am Erdmittelpunkt steht und nicht mit der Erde mitrotiert. \mathbf{e}_1 und \mathbf{e}_2 liegen dabei in der Äquatorebene, \mathbf{e}_3 zeigt in Richtung Nordpol. Das Windfeld \mathbf{U} wird als

$$\mathbf{U} = u_1 \mathbf{e}_1 + u_2 \mathbf{e}_2 + u_3 \mathbf{e}_3 \quad (\text{A.166})$$

geschrieben. Das Windfeld ist dabei nicht gleich der in diesem System gemessenen Teilchenbewegung, da noch die Rotation der Erde überlagert ist.

$$\text{Teilchenbewegung in ruhenden Koordinaten} = \text{Windfeld} + \text{Erdrotation}$$

A.9.2 Globale Koordinaten

Hier wählt man eine Basis $\mathbf{e}_x, \mathbf{e}_y, \mathbf{e}_z$, die genau wie die Basis der ruhenden Koordinaten am Erdmittelpunkt steht, jedoch mitrotiert. \mathbf{e}_x zeigt in Richtung des Schnittpunkts zwischen Nullmeridian und Äquator, \mathbf{e}_y zeigt in Richtung des Schnittpunkts zwischen neunzigstem Längengrad und Äquator und \mathbf{e}_z zeigt in Richtung Nordpol. Das Windfeld schreibt man als

$$\mathbf{U} = u_x \mathbf{e}_x + u_y \mathbf{e}_y + u_z \mathbf{e}_z. \quad (\text{A.167})$$

A.9.3 Geographische Koordinaten

Alternativ kann man auch *geographische Koordinaten* (r, φ, λ) verwenden, hierbei ist $r \geq 0$ der Abstand vom Mittelpunkt der Erde, $-\pi/2 \leq \varphi \leq \pi/2$ der Winkel, den ein Punkt mit der Äquatorebene einschließt (die geographische Breite unter Annahme einer kugelförmigen Erde) und $0 \leq \lambda < 2\pi$ der Winkel, den ein Punkt mit der xz-Ebene einschließt (die geographische Länge). Dies lässt sich in gewöhnliche Kugelkoordinaten (r, θ, φ) transformieren, es gilt mit $\theta + \varphi = \pi/2$

$$\sin(\varphi) = \sin(\pi/2 - \theta) = \cos(\theta), \quad (\text{A.168})$$

$$\cos(\varphi) = \cos(\pi/2 - \theta) = \sin(\theta), \quad (\text{A.169})$$

$$\tan(\theta) = \frac{\sin(\theta)}{\cos(\theta)} = \frac{\cos(\varphi)}{\sin(\varphi)} = \frac{1}{\tan(\varphi)}, \quad (\text{A.170})$$

$$v_\theta = -v_y, \quad (\text{A.171})$$

$$\frac{\partial}{\partial \theta} = -\frac{\partial}{\partial \varphi}. \quad (\text{A.172})$$

Lokal ist die Verwendung des Kugelkoordinatensystems sehr unanschaulich, wenn man Vektoren notieren will. Deshalb verwendet man lokal ein kartesisches, rechtshändiges Koordinatensystem, welches auf der Kugel steht und dessen x-Achse nach Osten, y-Achse nach Norden und z-Achse nach oben zeigt. Die jeweiligen Basisvektoren nennt man $\mathbf{i}, \mathbf{j}, \mathbf{k}$. Das Windfeld \mathbf{U} schreibt man als

$$\mathbf{U} = u\mathbf{i} + v\mathbf{j} + w\mathbf{k}. \quad (\text{A.173})$$

A.10 Mehrdimensionale Ableitungen

Richtungsableitungen sind Ableitungen einer Funktion von mehreren Variablen entlang einer bestimmten Richtung, wobei sich die partiellen Ableitungen als Spezialfälle dieser ergeben, bei denen in Richtung einer der Koordinatenachsen abgeleitet wird.

Seien $n, m \in \mathbb{N}$ mit $n, m \geq 1$ und $f: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m$ differenzierbar. Dann ist die Ableitung eine Funktion $f': \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^{m \times n}$ und es gilt

$$(f')_{i,j} = \left(\frac{\partial f_i}{\partial x_j} \right). \quad (\text{A.174})$$

Die Matrix $\overset{\leftrightarrow}{f'}$ heißt die *Jacobi-Matrix* von f . Insbesondere ergibt sich die Definition des Gradienten einer dif-

differenzierbaren skalaren Funktion $g : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ als Transponierte der Ableitung:

$$\text{grad}(g) := (g')^T = \left(\frac{\partial g}{\partial x_i} \right) \quad (\text{A.175})$$

Definiere den Nablaoperator ∇ durch

$$\nabla := \sum_{i=1}^3 e_i \frac{\partial}{\partial x_i}. \quad (\text{A.176})$$

Seien $n, m \in \mathbb{N}$ mit $n, m \geq 1$ und eine differenzierbare Funktion $T : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m$ gegeben und sei eine differenzierbare Kurve $r : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}^n$ gegeben. Man definiert eine Funktion $\tau : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}^m$ durch $\tau(t) := T(r(t))$. Für die Ableitung $\frac{d\tau}{dt} = \frac{d}{dt} T(r(t))$ gilt

$$\frac{d\tau}{dt} = T \frac{dr}{dt}. \quad (\text{A.177})$$

Dies entspricht wieder dem Spruch *äußere Ableitung mal innere Ableitung*. Nimmt man z. B. an, dass $T = T(x, y, z, t)$ das Temperaturfeld und $\mathbf{r}(t) = (x(t), y(t), z(t), t)^T$ eine 4-Teilchentrajektorie ist, so ist $T(t) = T(\mathbf{r}(t)) = T(x(t), y(t), z(t), t)$ die Temperatur am Ort des Teilchens zur Zeit t . Mit der mehrdimensionalen Kettenregel gilt

$$\frac{dT}{dt} = \frac{\partial T}{\partial t} + \frac{dx}{dt} \frac{\partial T}{\partial x} + \frac{dy}{dt} \frac{\partial T}{\partial y} + \frac{dz}{dt} \frac{\partial T}{\partial z}. \quad (\text{A.178})$$

Dies bezeichnet man als die *materielle Ableitung* oder *totale Ableitung*, weil hier die Eigenschaft eines festen Teilchens betrachtet wird. Man definiert einen Differenzialoperator

$$\frac{D}{Dt} := \frac{\partial}{\partial t} + u \frac{\partial}{\partial x} + v \frac{\partial}{\partial y} + w \frac{\partial}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial t} + \mathbf{U} \cdot \nabla \quad (\text{A.179})$$

mit den Komponenten (u, v, w) des Windfeldes. Hat man allgemeiner drei generalisierte Koordinaten x_1, x_2, x_3 (zum Beispiel Kugelkoordinaten oder Druck-Koordinaten) gegeben, so lässt sich dies schreiben als

$$\frac{D}{Dt} = \frac{\partial}{\partial t} + \sum_{i=1}^3 u_i \frac{\partial}{\partial x_i} \quad (\text{A.180})$$

mit den generalisierten Geschwindigkeiten u_i . Die *Divergenz* div eines Vektorfeldes $\mathbf{W} = (w_1, w_2, w_3)^T$ definiert man durch

$$\text{div}(\mathbf{W}) := \nabla \cdot \mathbf{W} = \sum_{i=1}^3 \frac{\partial w_i}{\partial x_i}. \quad (\text{A.181})$$

Der *Laplace-Operator* Δ eines Skalarfeldes ψ ist die Divergenz des Gradienten, also

$$\Delta \psi := \text{div}(\text{grad}(\psi)) = \nabla^2 \psi = \sum_{i=1}^3 \frac{\partial^2 \psi}{\partial x_i^2}. \quad (\text{A.182})$$

Der auf ein Vektorfeld angewandte Laplace-Operator wird definiert durch

$$\Delta \mathbf{W} := \sum_{i=1}^3 e_i \Delta w_i. \quad (\text{A.183})$$

Die Rotation rot eines Vektorfeldes wird durch

$$\text{rot}(\mathbf{W}) := \nabla \times \mathbf{W} = \sum_{i,j,k=1}^3 \varepsilon_{i,j,k} e_k \frac{\partial}{\partial x_i} w_j \quad (\text{A.184})$$

definiert. Man definiert weiterhin den Operator der horizontalen materiellen Ableitung durch

$$\frac{D_H}{Dt} := \frac{\partial}{\partial t} + u \frac{\partial}{\partial x} + v \frac{\partial}{\partial y} = \frac{\partial}{\partial t} + \mathbf{V} \cdot \nabla \quad (\text{A.185})$$

Analog definiert man den *horizontalen ∇ -Operator* durch

$$\nabla_H := \nabla - \mathbf{k} \cdot \nabla. \quad (\text{A.186})$$

Der horizontale Laplace-Operator Δ_H ist definiert durch

$$\Delta_H := \frac{\mathbf{I}}{r^2} \Delta_{\theta, \varphi} = (\nabla_H)^2 \quad (\text{A.187})$$

mit dem Winkelanteil des Laplace-Operators, s. Glg. (A.272), und r als Kugelradius. Da die i -Komponente der Rotation die Rotation des betrachteten Vektorfeldes in der $x_{j,k}$ -Ebene ist, kann man

$$\mathbf{k} \cdot \mathbf{W} \quad (\text{A.188})$$

als Horizontalkomponente der Rotation des Vektorfeldes \mathbf{W} auffassen. Der Operator

$$-\mathbf{U} \cdot \nabla \quad (\text{A.189})$$

ist der *Advektionsoperator*, der auf Skalar- und Vektorfelder anwendbar ist. Der horizontale Anteil hiervon ist

$$-\mathbf{V} \cdot \nabla. \quad (\text{A.190})$$

Hat man nämlich eine differenzielle Bilanzgleichung der Größe in der Form

$$\frac{D\psi}{Dt} = \sum_i F_i \quad (\text{A.191})$$

gegeben mit physikalischen Forcings F_i , so folgt hieraus für die lokalzeitliche Änderung von ψ die Gleichung

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = -\mathbf{U} \cdot \nabla T + \sum_i F_i = -\mathbf{V} \cdot \nabla - w \frac{\partial L}{\partial z} + \sum_i F_i, \quad (\text{A.192})$$

die *Advektion* ist also der Anteil der lokalzeitlichen Änderung, der durch Herantransport bewirkt wird.

A.10.1 Krümmungsradius

Man stelle sich eine Trajektorie

$$\mathbf{r} : I \subseteq \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}^2; a \mapsto (x, y)^T \quad (\text{A.193})$$

vor, wobei I ein Intervall sei. Man betrachte hier nur ein kleines Teilstück

$$\mathbf{r} : I' \subseteq I \rightarrow \mathbb{R}^2; \tau \mapsto (x, y)^T, \quad (\text{A.194})$$

I' sei ebenfalls ein Intervall, und definiere

$$\tau_1 := \sup(I'), \quad (\text{A.195})$$

$$\tau_2 := \sup(I'), \quad (\text{A.196})$$

$$\mathbf{r}_1 = (x_1, y_1)^T := f(\tau_1), \quad (\text{A.197})$$

$$\mathbf{r}_2 = (x_2, y_2)^T := f(\tau_2). \quad (\text{A.198})$$

$$(\text{A.199})$$

O. B. d. A. kann man den Ursprung des KS in \mathbf{r}_1 legen. Man sucht nun einen Punkt $\mathbf{r}_o := (x_o, y_o)^T$, von dem gefordert wird, dass er zu \mathbf{r}_1 und \mathbf{r}_2 möglichst den gleichen Abstand $|r|$ habe, also

$$\sqrt{(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_o)^2} = \sqrt{(\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_o)^2}, \quad (\text{A.200})$$

$$\Rightarrow r_1^2 + r_o^2 - 2\mathbf{r}_1 \cdot \mathbf{r}_o = r_2^2 + r_o^2 - 2\mathbf{r}_2 \cdot \mathbf{r}_o, \quad (\text{A.201})$$

$$\Rightarrow 0 = r_2^2 - 2\mathbf{r}_2 \cdot \mathbf{r}_o. \quad (\text{A.202})$$

Nun entwickelt man \mathbf{r}_2 bis zur zweiten Ordnung,

$$\mathbf{r}_2 = \mathbf{r}_1 + \frac{d\mathbf{r}}{d\tau} \Delta\tau + \frac{1}{2} \frac{d^2\mathbf{r}}{d\tau^2} \Delta\tau^2 + \mathcal{O}(\Delta\tau^3) \quad (\text{A.203})$$

mit

$$\Delta\tau := \tau_2 - \tau_1, \quad (\text{A.204})$$

wobei die Terme höherer Ordnung nun nicht mehr mitnotiert werden:

$$x_2 = x' \Delta\tau + \frac{1}{2} x'' \Delta\tau^2 \quad (\text{A.205})$$

$$y_2 = y' \Delta\tau + \frac{1}{2} y'' \Delta\tau^2 \quad (\text{A.206})$$

Die Ableitungen sind an der Stelle $\tau = \tau_1$ zu berechnen. Die zweite Ordnung ist hier zu berücksichtigen, da es bei der Krümmung ja um die Änderung der Ableitung einer Trajektorie geht. Setzt man dies in Glg. (A.202) ein, folgt

$$\begin{aligned} 0 &= x'^2 \Delta\tau^2 + \frac{1}{4} x''^2 \Delta\tau^4 + x' x'' \Delta\tau^3 + y'^2 \Delta\tau^2 + \frac{1}{4} y''^2 \Delta\tau^4 + y' y'' \Delta\tau^3 \\ &\quad - 2x' \Delta\tau x_o - x'' \Delta\tau^2 x_o - 2y' \Delta\tau y_o - y'' \Delta\tau^2 y_o. \end{aligned} \quad (\text{A.207})$$

Die erste Ordnung von $\Delta\tau$ impliziert:

$$2x' x_o + 2y' y_o = 0 \quad (\text{A.208})$$

Die zweite Ordnung von $\Delta\tau$ impliziert:

$$x'' x_o + y'' y_o = x'^2 + y'^2 \quad (\text{A.209})$$

Aus Glg. (A.208) folgt

$$x_o = -\frac{y' y_o}{x'}. \quad (\text{A.210})$$

In Glg. (A.209) eingestzt ergibt dies

$$\begin{aligned} -x'' y' \frac{y_o}{x'} + y'' y_o &= x'^2 + y'^2 \\ \Rightarrow y_o &= \frac{x'^2 + y'^2}{y'' - x'' \frac{y'}{x'}}. \end{aligned} \quad (\text{A.211})$$

Mit Glg. (A.210) folgt

$$x_o = -\frac{y'}{x'} \frac{x'^2 + y'^2}{y'' - x'' \frac{y'}{x'}}. \quad (\text{A.212})$$

Somit folgt für den Betrag des Krümmungsradius

$$|r| = \sqrt{1 + \frac{y'^2}{x'^2}} \frac{x'^2 + y'^2}{|y'' - x'' \frac{y'}{x'}|}. \quad (\text{A.213})$$

O. B. d. A. kann man $\tau = x$ setzen, daraus folgen

$$x' = 1, \quad (\text{A.214})$$

$$x'' = 0. \quad (\text{A.215})$$

Somit gilt

$$\begin{aligned} |r| &= \sqrt{1 + y'^2} \frac{1 + y'^2}{|y''|} \\ \Rightarrow |r| &= \frac{(1 + y'^2)^{3/2}}{|y''|}. \end{aligned} \quad (\text{A.216})$$

Bezüglich des Vorzeichens von r legt man fest, dass dieses positiv seins soll, falls sich die Trajektorie nach links krümmt, also

$$r = \frac{(1 + y'^2)^{3/2}}{y''}. \quad (\text{A.217})$$

Benötigt man einen linearen Ausdruck für $1/r$, verwendet man meist

$$\frac{1}{r} \approx y''. \quad (\text{A.218})$$

A.10.2 Rechenregeln für Differenzialoperatoren

Seien $\mathbf{U}, \mathbf{V}, \mathbf{W} : \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R}^3$ mit $\mathbf{U} = (u_1, u_2, u_3)^T$, $\mathbf{V} = (v_1, v_2, v_3)^T$ und $\mathbf{W} = (w_1, w_2, w_3)^T$ drei Vektorfelder, $\psi, \chi : \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R}$ zwei Skalarfelder und $\lambda \in \mathbb{C}$ ein Skalar. Es wird definiert

$$\Delta \mathbf{V} := \sum_{i=1}^3 \Delta v_i \mathbf{e}_i. \quad (\text{A.219})$$

Es gelten

$$\nabla(\psi + \chi) = \nabla\psi + \nabla\chi, \quad (\text{A.220})$$

$$\nabla \times (\mathbf{V} + \mathbf{W}) = \nabla \times \mathbf{V} + \nabla \times \mathbf{W}, \quad (\text{A.221})$$

$$\nabla(\lambda\psi) = \lambda\nabla\psi, \quad (\text{A.222})$$

$$\nabla \times (\lambda\mathbf{V}) = \lambda\nabla \times \mathbf{V} \quad (\text{A.223})$$

nach den Feststellungen in Absch. A.8. Weiterhin gelten

$$\nabla \times \nabla \psi = \sum_{i,j,k=1}^3 \varepsilon_{i,j,k} \frac{\partial}{\partial x_i} \frac{\partial \psi}{\partial x_j} \mathbf{e}_k = \sum_{i,j,k=1}^3 \varepsilon_{i,j,k} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x_i \partial x_j} \mathbf{e}_k = \mathbf{o}, \quad (\text{A.224})$$

$$\nabla \cdot \nabla \times V = \left(\sum_{l=1}^3 \mathbf{e}_l \frac{\partial}{\partial x_l} \right) \cdot \left(\sum_{i,j,k=1}^3 \varepsilon_{i,j,k} \frac{\partial}{\partial x_i} v_j \mathbf{e}_k \right) = \sum_{i,j,k=1}^3 \varepsilon_{i,j,k} \frac{\partial^2 v_j}{\partial x_k \partial x_i} = \mathbf{o}, \quad (\text{A.225})$$

$$\nabla \cdot (\psi V) = \sum_{i=1}^3 \frac{\partial}{\partial x_i} (\psi v_i) = \sum_{i=1}^3 v_i \frac{\partial \psi}{\partial x_i} + \psi \frac{\partial v_i}{\partial x_i} = V \cdot \nabla \psi + \psi \nabla \cdot V, \quad (\text{A.226})$$

$$\frac{\partial}{\partial x_i} \nabla \times V = \frac{\partial}{\partial x_i} \sum_{j,k,l=1}^3 \varepsilon_{j,k,l} \frac{\partial}{\partial x_j} v_k \mathbf{e}_l = \sum_{j,k,l=1}^3 \varepsilon_{j,k,l} \frac{\partial}{\partial x_j} \frac{\partial v_k}{\partial x_i} \mathbf{e}_l = \nabla \times \frac{\partial}{\partial x_i} V, \quad (\text{A.227})$$

$$\begin{aligned} \nabla \times \psi V &= \sum_{i,j,k=1}^3 \varepsilon_{i,j,k} \frac{\partial}{\partial x_i} (\psi v_j) \mathbf{e}_k = \sum_{i,j,k=1}^3 \varepsilon_{i,j,k} \left(v_j \frac{\partial \psi}{\partial x_i} + \psi \frac{\partial v_j}{\partial x_i} \right) \mathbf{e}_k \\ &= \sum_{i,j,k=1}^3 \varepsilon_{i,j,k} \frac{\partial \psi}{\partial x_i} v_j \mathbf{e}_k + \sum_{i,j,k=1}^3 \psi \frac{\partial}{\partial x_i} v_j \mathbf{e}_k = (\nabla \psi) \times V + \psi \nabla \times V \\ &= -V \times \nabla \psi + \psi \nabla \times V, \end{aligned} \quad (\text{A.228})$$

$$\begin{aligned} \nabla (V \cdot W) &= \nabla \sum_{i=1}^3 v_i w_i = \sum_{i=1}^3 \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\sum_{j=1}^3 v_j w_j \right) \mathbf{e}_i = \sum_{i=1}^3 \sum_{j=1}^3 \left(\frac{\partial v_j}{\partial x_i} w_j + v_j \frac{\partial w_j}{\partial x_i} \right) \mathbf{e}_i \\ &= \sum_{i=1}^3 \sum_{j=1}^3 \left(\frac{\partial v_j}{\partial x_i} w_j + w_j \frac{\partial v_i}{\partial x_j} - w_j \frac{\partial v_i}{\partial x_j} + v_j \frac{\partial w_j}{\partial x_i} + v_j \frac{\partial w_i}{\partial x_j} - v_j \frac{\partial w_i}{\partial x_j} \right) \mathbf{e}_i \\ &= \sum_{i=1}^3 \sum_{j=1}^3 \left(w_j \left(\frac{\partial v_j}{\partial x_i} - \frac{\partial v_i}{\partial x_j} \right) + v_j \left(\frac{\partial w_j}{\partial x_i} - \frac{\partial w_i}{\partial x_j} \right) + w_j \frac{\partial v_i}{\partial x_j} + v_j \frac{\partial w_i}{\partial x_j} \right) \mathbf{e}_i \\ &= \sum_{i,j=1}^3 w_j \frac{\partial v_i}{\partial x_j} \mathbf{e}_i + \sum_{i,j=1}^3 v_j \frac{\partial w_i}{\partial x_j} \mathbf{e}_i + \sum_{i,j,k=1}^3 \varepsilon_{i,j,k}^2 \left(w_j \left(\frac{\partial v_j}{\partial x_i} - \frac{\partial v_i}{\partial x_j} \right) + v_j \left(\frac{\partial w_j}{\partial x_i} - \frac{\partial w_i}{\partial x_j} \right) \right) \mathbf{e}_i \\ &= \sum_{j=1}^3 w_j \frac{\partial}{\partial x_j} \sum_{i=1}^3 v_i \mathbf{e}_i + \sum_{j=1}^3 v_j \frac{\partial}{\partial x_j} \sum_{i=1}^3 w_i \mathbf{e}_i + \sum_{i,j,k=1}^3 \varepsilon_{i,j,k}^2 \left(w_j \left(\frac{\partial v_j}{\partial x_k} - \frac{\partial v_k}{\partial x_j} \right) + v_j \left(\frac{\partial w_j}{\partial x_k} - \frac{\partial w_k}{\partial x_j} \right) \right) \mathbf{e}_k \\ &= (W \cdot \nabla) V + (V \cdot \nabla) W + \sum_{i,j,k=1}^3 \varepsilon_{i,j,k}^2 v_j \left(\frac{\partial w_j}{\partial x_k} - \frac{\partial w_k}{\partial x_j} \right) \mathbf{e}_k + \sum_{i,j,k=1}^3 \varepsilon_{i,j,k}^2 w_j \left(\frac{\partial v_j}{\partial x_k} - \frac{\partial v_k}{\partial x_j} \right) \mathbf{e}_k \\ &= (V \cdot \nabla) W + (W \cdot \nabla) V + \sum_{i,j,k=1}^3 \varepsilon_{i,j,k} v_j \varepsilon_{i,j,k} \left(\frac{\partial w_j}{\partial x_k} - \frac{\partial w_k}{\partial x_j} \right) \mathbf{e}_k + \sum_{i,j,k=1}^3 \varepsilon_{i,j,k} w_j \varepsilon_{i,j,k} \left(\frac{\partial v_j}{\partial x_k} - \frac{\partial v_k}{\partial x_j} \right) \mathbf{e}_k \\ &= (V \cdot \nabla) W + (W \cdot \nabla) V + \sum_{i,j,k=1}^3 \varepsilon_{i,j,k} v_i \varepsilon_{i,j,k} \left(\frac{\partial w_i}{\partial x_k} - \frac{\partial w_k}{\partial x_i} \right) \mathbf{e}_k + \sum_{i,j,k=1}^3 \varepsilon_{i,j,k} w_i \varepsilon_{i,j,k} \left(\frac{\partial v_i}{\partial x_k} - \frac{\partial v_k}{\partial x_i} \right) \mathbf{e}_k \\ &= (V \cdot \nabla) W + (W \cdot \nabla) V + \sum_{i,j,k=1}^3 \varepsilon_{i,j,k} v_i (\nabla \times W)_j \mathbf{e}_k + \sum_{i,j,k=1}^3 \varepsilon_{i,j,k} w_i (\nabla \times V)_j \mathbf{e}_k \\ &= (V \cdot \nabla) W + (W \cdot \nabla) V + V \times (\nabla \times W) + W \times (\nabla \times V), \end{aligned} \quad (\text{A.229})$$

$$\begin{aligned}
\nabla \times (\mathbf{V} \times \mathbf{W}) &= \sum_{i,j,k=1}^3 \varepsilon_{i,j,k} \frac{\partial}{\partial x_i} (\mathbf{V} \times \mathbf{W})_j \mathbf{e}_k = \sum_{i,j,k=1}^3 \varepsilon_{i,j,k} \frac{\partial}{\partial x_i} (\varepsilon_{ikj} v_i w_k + \varepsilon_{kij} v_k w_i) \mathbf{e}_k \\
&= \sum_{i,j,k=1}^3 \varepsilon_{i,j,k}^2 \frac{\partial}{\partial x_i} (v_k w_i - v_i w_k) \mathbf{e}_k = \sum_{i,k=1}^3 \frac{\partial}{\partial x_i} (v_k w_i - v_i w_k) \mathbf{e}_k \\
&= \sum_{i,k=1}^3 \left(\frac{\partial v_k}{\partial x_i} w_i + v_k \frac{\partial w_i}{\partial x_i} - v_i \frac{\partial w_k}{\partial x_i} - w_k \frac{\partial v_i}{\partial x_i} \right) \mathbf{e}_k = \sum_{i=1}^3 w_i \frac{\partial}{\partial x_i} \sum_{k=1}^3 v_k \mathbf{e}_k - \sum_{i=1}^3 v_i \frac{\partial}{\partial x_i} \sum_{k=1}^3 w_k \mathbf{e}_k \\
&\quad + \sum_{i=1}^3 \frac{\partial w_i}{\partial x_i} \sum_{k=1}^3 v_k \mathbf{e}_k - \sum_{i=1}^3 \frac{\partial v_i}{\partial x_i} \sum_{k=1}^3 w_k \mathbf{e}_k \\
&= (\mathbf{W} \cdot \nabla) \mathbf{V} - \mathbf{W} (\nabla \cdot \mathbf{V}) + \mathbf{V} (\nabla \cdot \mathbf{W}) - (\mathbf{V} \cdot \nabla) \mathbf{W}, \tag{A.230}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\nabla (\nabla \cdot \mathbf{V}) &= \nabla \sum_{i=1}^3 \frac{\partial v_i}{\partial x_i} = \sum_{i=1}^3 \sum_{j=1}^3 \frac{\partial^2 v_j}{\partial x_i \partial x_j} \mathbf{e}_i = \sum_{i=1}^3 \left(\sum_{j=1}^3 \left(\frac{\partial^2 v_j}{\partial x_i \partial x_j} \right) + \Delta v_i - \Delta v_i \right) \mathbf{e}_i \\
&= \Delta \mathbf{V} + \sum_{i=1}^3 \sum_{j=1}^3 \left(\frac{\partial^2 v_j}{\partial x_i \partial x_j} - \frac{\partial^2 v_i}{\partial x_j^2} \right) \mathbf{e}_i = \Delta \mathbf{V} + \sum_{i=1}^3 \sum_{j=1}^3 \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\partial v_j}{\partial x_i} - \frac{\partial v_i}{\partial x_j} \right) \mathbf{e}_i \\
&= \Delta \mathbf{V} + \sum_{i=1}^3 \sum_{\substack{j=1, \\ j \neq i}}^3 \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\partial v_j}{\partial x_i} - \frac{\partial v_i}{\partial x_j} \right) \mathbf{e}_i = \Delta \mathbf{V} + \sum_{i=1}^3 \sum_{\substack{j=1, \\ j \neq i}}^3 \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\sum_{k=1}^3 \varepsilon_{i,j,k}^2 \left(\frac{\partial v_j}{\partial x_i} - \frac{\partial v_i}{\partial x_j} \right) \right] \mathbf{e}_i \\
&= \Delta \mathbf{V} + \sum_{i=1}^3 \sum_{\substack{j=1, \\ j \neq i}}^3 \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\sum_{k=1}^3 \varepsilon_{i,j,k} (\nabla \times \mathbf{V})_k \right] \mathbf{e}_i = \Delta \mathbf{V} + \sum_{i,j,k=1}^3 \varepsilon_{i,j,k} \frac{\partial}{\partial x_j} (\nabla \times \mathbf{V})_k \mathbf{e}_i \\
&= \Delta \mathbf{V} + \sum_{i,j,k=1}^3 \varepsilon_{i,j,k} \frac{\partial}{\partial x_i} (\nabla \times \mathbf{V})_j \mathbf{e}_k \\
&= \Delta \mathbf{V} + \sum_{i,j,k=1}^3 \left(\nabla \times \varepsilon_{i,j,k} \frac{\partial}{\partial x_i} \mathbf{V} \right)_j \mathbf{e}_k = \Delta \mathbf{V} + \nabla \times \left(\sum_{i,j,k=1}^3 \varepsilon_{i,j,k} \frac{\partial}{\partial x_i} \mathbf{V} \right)_j \mathbf{e}_k \\
&= \Delta \mathbf{V} + \nabla \times \sum_{i,j,k=1}^3 \varepsilon_{i,j,k} \frac{\partial}{\partial x_i} v_j \mathbf{e}_k = \Delta \mathbf{V} + \nabla \times (\nabla \times \mathbf{V}), \tag{A.231}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\nabla \cdot (\mathbf{V} \times \mathbf{W}) &= \sum_{i=1}^3 \frac{\partial}{\partial x_i} (\mathbf{V} \times \mathbf{W})_i = \sum_{i=1}^3 \frac{\partial}{\partial x_i} (\varepsilon_{k,j,i} v_k w_j + \varepsilon_{j,k,i} v_j w_k) \\
&= \sum_{i=1}^3 \left(\varepsilon_{k,j,i} \frac{\partial v_k}{\partial x_i} w_j + \varepsilon_{k,j,i} v_k \frac{\partial w_j}{\partial x_i} + \varepsilon_{j,k,i} \frac{\partial v_j}{\partial x_i} w_k + \varepsilon_{j,k,i} v_j \frac{\partial w_k}{\partial x_i} \right) \\
&= \sum_{i=1}^3 w_i \left(\varepsilon_{k,j,i} \frac{\partial v_j}{\partial x_k} + \varepsilon_{j,k,i} \frac{\partial v_k}{\partial x_j} \right) - v_i \left(\varepsilon_{k,j,i} \frac{\partial w_j}{\partial x_k} + \varepsilon_{j,k,i} \frac{\partial w_k}{\partial x_j} \right) \\
&= \sum_{i=1}^3 w_i (\nabla \times \mathbf{V})_i - v_i (\nabla \times \mathbf{W})_i = \mathbf{W} \cdot (\nabla \times \mathbf{V}) - \mathbf{V} \cdot (\nabla \times \mathbf{W}), \tag{A.232}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\mathbf{U} \cdot [(\mathbf{V} \cdot \nabla) \nabla \psi] &= \sum_{i=1}^3 u_i [(\mathbf{V} \cdot \nabla) \nabla \psi]_i = \sum_{i=1}^3 u_i \left[(\mathbf{V} \cdot \nabla) \frac{\partial \psi}{\partial x_i} \right] = \sum_{i=1}^3 u_i \sum_{j=1}^3 v_j \frac{\partial^2 \psi}{\partial x_j \partial x_i} \\
&= \sum_{i,j=1}^3 u_i v_j \frac{\partial^2 \psi}{\partial x_j \partial x_i} = \sum_{i,j=1}^3 v_i u_j \frac{\partial^2 \psi}{\partial x_j \partial x_i} = \sum_{i=1}^3 v_i \sum_{j=1}^3 u_j \frac{\partial}{\partial x_j} (\nabla \psi)_i \\
&= \sum_{i=1}^3 v_i [(\mathbf{U} \cdot \nabla) \nabla \psi]_i = \mathbf{V} \cdot [(\mathbf{U} \cdot \nabla) \nabla \psi]. \tag{A.233}
\end{aligned}$$

Außerdem gilt

$$(V \cdot \nabla) V \stackrel{\text{Glg. (A.229)}}{=} \frac{1}{2} \nabla (V \cdot V) - V \times (\nabla \times V). \quad (\text{A.234})$$

Dies bezeichnet man als *Weber-Transformation*. Weiterhin gilt für die Advektion eines Skalarproduktes

$$\begin{aligned} (U \cdot \nabla) (V \cdot W) &= \left(\sum_{i=1}^3 u_i \frac{\partial}{\partial x_i} \right) \left(\sum_{j=1}^3 v_j w_j \right) = \sum_{i,j=1}^3 u_i \left[\frac{\partial v_j}{\partial x_i} w_j + \frac{\partial w_j}{\partial x_i} v_j \right] \\ &= \sum_{j=1}^3 w_j \sum_{i=1}^3 u_i \frac{\partial v_j}{\partial x_i} + \sum_{j=1}^3 v_j \sum_{i=1}^3 u_i \frac{\partial w_j}{\partial x_i} = W \cdot [(U \cdot \nabla) V] + V \cdot [(U \cdot \nabla) W]. \end{aligned} \quad (\text{A.235})$$

Seien $\mathbf{k} = (k_1, k_2, k_3)^T \in \mathbb{C}^3$ und $\varphi : \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{C}; \varphi(\mathbf{r}) = \exp(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r})$. Dann gelten

$$\begin{aligned} \nabla \varphi(\mathbf{r}) &= \sum_{i=1}^3 \frac{\partial}{\partial x_i} \varphi(\mathbf{r}) \mathbf{e}_i = \sum_{i=1}^3 \frac{\partial}{\partial x_i} \exp(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}) \mathbf{e}_i = \sum_{i=1}^3 \frac{\partial}{\partial x_i} \exp \left(\sum_{j=1}^3 k_j x_j \right) \mathbf{e}_i \\ &= \sum_{i=1}^3 k_i \exp(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}) \mathbf{e}_i = \varphi(\mathbf{r}) \mathbf{k}, \end{aligned} \quad (\text{A.236})$$

$$\Delta \varphi(\mathbf{r}) = \nabla \cdot \nabla \varphi(\mathbf{r}) = \nabla \cdot (\varphi(\mathbf{r}) \mathbf{k}) = \mathbf{k} \cdot \nabla \varphi = \mathbf{k}^\circ \varphi(\mathbf{r}). \quad (\text{A.237})$$

A.11 Differenzialoperatoren unter Koordinatentransformationen

Allgemein bezeichnet man Punkte im \mathbb{R}^3 durch drei reelle Zahlen $x = (x_1, x_2, x_3)$, die in Linearkombination mit der Standardbasis $\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2, \mathbf{e}_3$ einen Vektor \mathbf{r} ergeben:

$$\mathbf{r} = x_1 \mathbf{e}_1 + x_2 \mathbf{e}_2 + x_3 \mathbf{e}_3 \quad (\text{A.238})$$

Einen Vektor kann man sich in diesem Zusammenhang als einen Pfeil vorstellen. Um Dinge mit einer bestimmten Geometrie eleganter lösen zu können, führt man generalisierte Koordinaten q_i ein (s. auch Absch. 2.1.2). Skalarfelder f kann man dann schreiben als $f = f(q)$. q steht hier für das Tupel $q = (q_1, q_2, q_3)$. Als Anmerkung sei gesagt, dass die Funktionen $f = f(x)$ und $f = f(q)$ nicht gleich sind, wenn man gleiche Argumente einsetzt bekommt man im Allgemeinen unterschiedliche Werte. Meistens unterscheidet man dies in der Notation jedoch nicht, da beide Funktionen das gleiche ausdrücken.

Möchte man ein Vektorfeld \mathbf{v} in generalisierten Koordinaten notieren, so wäre die einfachste Idee, auch die Werte von \mathbf{v} in generalisierten Koordinaten zu notieren. Ist \mathbf{v} ein Geschwindigkeitsfeld, so könnte man die Werte von \mathbf{v} in den Formen \dot{q} oder $\mathbf{v} \equiv \mathbf{r}(q)$ notieren. Da dies häufig ungewöhnlich ist, führt man in allgemeinen Koordinatensystemen (man sagt auch in *krummlinigen Koordinaten*) eine ortsabhängige Basis ein, deren Elemente definiert sind durch

$$\mathbf{e}_i := \frac{\mathbf{r}}{|\frac{\partial \mathbf{r}}{\partial q_i}|} \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial q_i}. \quad (\text{A.239})$$

Diese Elemente sind normiert. Lässt sich

$$\mathbf{e}_1 \times \mathbf{e}_2 = \mathbf{e}_3 \quad (\text{A.240})$$

durch Vertauschen der \mathbf{e}_i erreichen, bezeichnet man die q als *orthogonal*; Koordinaten, die dies verletzen werden in diesem Buch nicht behandelt. Man schreibt dann für Vektorfelder

$$\mathbf{v} = \sum_{i=1}^3 v_i \mathbf{e}_i, \quad (\text{A.241})$$

wobei sowohl die v_i als auch die \mathbf{e}_i vom Ort abhängen. Man definiert partielle Ableitungen bezüglich der lokalen Basis durch Richtungsableitungen entlang der lokalen Koordinatenachsen:

$$\frac{\partial}{\partial x_i} := \mathbf{e}_i \cdot \nabla = \frac{\mathbf{r}}{|\frac{\partial \mathbf{r}}{\partial q_i}|} \left(\frac{\partial x}{\partial q_i} \frac{\partial}{\partial x} + \frac{\partial y}{\partial q_i} \frac{\partial}{\partial y} + \frac{\partial z}{\partial q_i} \frac{\partial}{\partial z} \right) = \frac{\mathbf{r}}{|\frac{\partial \mathbf{r}}{\partial q_i}|} \frac{\partial}{\partial q_i}. \quad (\text{A.242})$$

Sei f ein Skalarfeld, dann gilt für den Gradienten von f in generalisierten Koordinaten

$$\nabla f = \sum_{i=1}^3 \frac{\partial f}{\partial x_i} \mathbf{e}_i = \sum_{i=1}^3 \frac{\mathbf{I}}{|\frac{\partial \mathbf{r}}{\partial q_i}|} \frac{\partial f}{\partial q_i} \mathbf{e}_i. \quad (\text{A.243})$$

Für die Divergenz eines Vektorfeldes \mathbf{v} gilt mit Glg. (A.226)

$$\begin{aligned} \nabla \cdot \mathbf{v} &= \nabla \cdot \sum_{i=1}^3 v_i \mathbf{e}_i = \sum_{i=1}^3 \nabla \cdot (v_i \mathbf{e}_i) = \sum_{i=1}^3 v_i \nabla \cdot \mathbf{e}_i + \mathbf{e}_i \cdot \nabla v_i = \sum_{i=1}^3 \left[v_i \nabla \cdot \mathbf{e}_i + \mathbf{e}_i \cdot \sum_{j=1}^3 \frac{\mathbf{I}}{|\frac{\partial \mathbf{r}}{\partial q_j}|} \frac{\partial v_i}{\partial q_j} \mathbf{e}_j \right] \\ &= \sum_{i=1}^3 v_i \nabla \cdot \mathbf{e}_i + \sum_{i=1}^3 \frac{\mathbf{I}}{|\frac{\partial \mathbf{r}}{\partial q_i}|} \frac{\partial v_i}{\partial q_i}. \end{aligned} \quad (\text{A.244})$$

Für die Rotation eines Vektorfeldes gilt mit Glg. (A.228)

$$\begin{aligned} \nabla \times \mathbf{v} &= \nabla \times \sum_{i=1}^3 v_i \mathbf{e}_i = \sum_{i=1}^3 \nabla \times (v_i \mathbf{e}_i) = \sum_{i=1}^3 [v_i \nabla \times \mathbf{e}_i - \mathbf{e}_i \times \nabla v_i] = \sum_{i=1}^3 \left[v_i \nabla \times \mathbf{e}_i - \mathbf{e}_i \times \sum_{j=1}^3 \frac{\mathbf{I}}{|\frac{\partial \mathbf{r}}{\partial q_j}|} \frac{\partial v_i}{\partial q_j} \mathbf{e}_j \right] \\ &= \sum_{i=1}^3 v_i \nabla \times \mathbf{e}_i - \sum_{i,j=1}^3 (\mathbf{e}_i \times \mathbf{e}_j) \frac{\mathbf{I}}{|\frac{\partial \mathbf{r}}{\partial q_j}|} \frac{\partial v_i}{\partial q_j} = \sum_{i=1}^3 v_i \nabla \times \mathbf{e}_i - \sum_{i,j,k=1}^3 \varepsilon_{i,j,k} \mathbf{e}_k \frac{\mathbf{I}}{|\frac{\partial \mathbf{r}}{\partial q_j}|} \frac{\partial v_i}{\partial q_j} \\ &= \sum_{i=1}^3 v_i \nabla \times \mathbf{e}_i + \sum_{i,j,k=1}^3 \varepsilon_{k,j,i} \mathbf{e}_k \frac{\mathbf{I}}{|\frac{\partial \mathbf{r}}{\partial q_j}|} \frac{\partial v_i}{\partial q_j} = \sum_{i=1}^3 v_i \nabla \times \mathbf{e}_i + \sum_{i,j,k=1}^3 \varepsilon_{i,j,k} \mathbf{e}_i \frac{\mathbf{I}}{|\frac{\partial \mathbf{r}}{\partial q_j}|} \frac{\partial v_k}{\partial q_j}. \end{aligned} \quad (\text{A.245})$$

Für den Laplace-Operator gilt

$$\begin{aligned} \Delta f &= \nabla \cdot \nabla f = \nabla \cdot \sum_{i=1}^3 \frac{\mathbf{I}}{|\frac{\partial \mathbf{r}}{\partial q_i}|} \frac{\partial f}{\partial q_i} \mathbf{e}_i = \sum_{i=1}^3 \nabla \cdot \left[\frac{\mathbf{I}}{|\frac{\partial \mathbf{r}}{\partial q_i}|} \frac{\partial f}{\partial q_i} \mathbf{e}_i \right] \\ &= \sum_{i=1}^3 \left[\frac{\mathbf{I}}{|\frac{\partial \mathbf{r}}{\partial q_i}|} \frac{\partial f}{\partial q_i} \nabla \cdot \mathbf{e}_i + \frac{\mathbf{I}}{|\frac{\partial \mathbf{r}}{\partial q_i}|^2} \frac{\partial^2 f}{\partial q_i^2} \right]. \end{aligned} \quad (\text{A.246})$$

Dabei wurde Glg. (A.244) für die Divergenz eingesetzt.

Für die Berechnung des vektoriellen Laplace-Operator definiert man zunächst noch eine ortsunabhängige Basis ($\tilde{\mathbf{e}}_i$). Man kann dann schreiben

$$\mathbf{v} = \sum_{i=1}^3 v_i \mathbf{e}_i = \sum_{i=1}^3 \tilde{v}_i \tilde{\mathbf{e}}_i \quad (\text{A.247})$$

sowie

$$e_j^{(i)} := \tilde{\mathbf{e}}_i \cdot \mathbf{e}_j \quad (\text{A.248})$$

definieren. Damit ergeben sich

$$\tilde{v}_i = \tilde{\mathbf{e}}_i \cdot \mathbf{v} = \sum_{j=1}^3 v_j \tilde{\mathbf{e}}_i \cdot \mathbf{e}_j = \sum_{j=1}^3 v_j e_j^{(i)}, \quad (\text{A.249})$$

$$\mathbf{e}_j = \sum_{i=1}^3 \tilde{\mathbf{e}}_i e_j^{(i)}. \quad (\text{A.250})$$

Es folgt

$$\begin{aligned}\Delta \boldsymbol{v} &= \sum_{i=1}^3 (\Delta \tilde{v}_i) \tilde{\boldsymbol{e}}_i = \sum_{i=1}^3 \left[\sum_{j=1}^3 \Delta (v_j e_j^{(i)}) \right] \tilde{\boldsymbol{e}}_i \\ &= \sum_{i=1}^3 \left[\sum_{j=1}^3 \sum_{k=1}^3 \underbrace{\frac{\partial^2 v_j}{\partial x_k^2} e_j^{(i)}}_{(a)} + \underbrace{2 \frac{\partial v_j}{\partial x_k} \frac{\partial e_j^{(i)}}{\partial x_k}}_{(b)} + \underbrace{v_j \frac{\partial^2 e_j^{(i)}}{\partial x_k^2}}_{(c)} \right] \tilde{\boldsymbol{e}}_i.\end{aligned}\quad (\text{A.251})$$

Die bezeichneten Summen werden separat untersucht:

$$(a) = \sum_{i=1}^3 \left[\sum_{j=1}^3 e_j^{(i)} \Delta v_j \right] \tilde{\boldsymbol{e}}_i = \sum_{j=1}^3 \Delta v_j \sum_{i=1}^3 e_j^{(i)} \tilde{\boldsymbol{e}}_i = \sum_{j=1}^3 \Delta v_j \boldsymbol{e}_j \quad (\text{A.252})$$

$$(b) = 2 \sum_{i=1}^3 \left[\sum_{j=1}^3 \sum_{k=1}^3 \frac{\partial v_j}{\partial x_k} \frac{\partial e_j^{(i)}}{\partial x_k} \right] \tilde{\boldsymbol{e}}_i = 2 \sum_{j=1}^3 \sum_{k=1}^3 \frac{\partial v_j}{\partial x_k} \frac{\partial}{\partial x_k} \left(\sum_{i=1}^3 e_j^{(i)} \tilde{\boldsymbol{e}}_i \right) = 2 \sum_{j=1}^3 \sum_{k=1}^3 \frac{\partial v_j}{\partial x_k} \frac{\partial \boldsymbol{e}_j}{\partial x_k} \quad (\text{A.253})$$

$$(c) = \sum_{i=1}^3 \left[\sum_{j=1}^3 \sum_{k=1}^3 v_j \frac{\partial^2 e_j^{(i)}}{\partial x_k^2} \right] \tilde{\boldsymbol{e}}_i = \sum_{j=1}^3 \sum_{k=1}^3 v_j \frac{\partial^2}{\partial x_k^2} \sum_{i=1}^3 e_j^{(i)} \tilde{\boldsymbol{e}}_i = \sum_{j=1}^3 v_j \sum_{k=1}^3 \frac{\partial^2}{\partial x_k^2} \boldsymbol{e}_j = \sum_j v_j \Delta \boldsymbol{e}_j \quad (\text{A.254})$$

Somit gilt

$$\Delta \boldsymbol{v} = \sum_{j=1}^3 \left[\Delta v_j \boldsymbol{e}_j + v_j \Delta \boldsymbol{e}_j + 2 \sum_{k=1}^3 \frac{1}{|\frac{\partial \boldsymbol{r}}{\partial q_k}|^2} \frac{\partial v_j}{\partial q_k} \frac{\partial \boldsymbol{e}_j}{\partial q_k} \right]. \quad (\text{A.255})$$

Zuletzt wird die Wirkung der materiellen Zeitableitung auf eine vektorielle Größe betrachtet:

$$\begin{aligned}\frac{D \boldsymbol{v}}{Dt} &= \frac{D}{Dt} \sum_{i=1}^3 v_i \boldsymbol{e}_i = \frac{D}{Dt} \sum_{i=1}^3 v_i \left(\sum_{j=1}^3 e_i^{(j)} \tilde{\boldsymbol{e}}_j \right) = \sum_{i,j=1}^3 \left[\frac{D v_i}{Dt} e_i^{(j)} + v_i \frac{D e_i^{(j)}}{Dt} \right] \tilde{\boldsymbol{e}}_j \\ &= \sum_{i,j=1}^3 \left[\left(\frac{\partial v_i}{\partial t} + \sum_{k=1}^3 \frac{D x_k}{Dt} \frac{\partial v_i}{\partial x_k} \right) e_i^{(j)} + v_i \sum_{k=1}^3 \frac{D x_k}{Dt} \frac{\partial e_i^{(j)}}{\partial x_k} \right] \tilde{\boldsymbol{e}}_j \\ &= \sum_{i=1}^3 \left(\frac{\partial v_i}{\partial t} + \sum_{k=1}^3 \frac{D x_k}{Dt} \frac{\partial v_i}{\partial x_k} \right) \boldsymbol{e}_i + \sum_{i=1}^3 v_i \sum_{k=1}^3 \frac{D x_k}{Dt} \frac{\partial \boldsymbol{e}_i}{\partial x_k}\end{aligned}\quad (\text{A.256})$$

A.11.1 Kugelkoordinaten

In diesem Abschnitt sind \boldsymbol{v} ein Vektorfeld und f ein Skalarfeld, beide sollen alle notwendigen Eigenschaften haben. In Kugelkoordinaten gilt

$$\boldsymbol{r} = r \begin{pmatrix} \sin(\theta) \cos(\varphi) \\ \sin(\theta) \sin(\varphi) \\ \cos(\theta) \end{pmatrix}. \quad (\text{A.257})$$

Sei $\boldsymbol{r} = \boldsymbol{r}(r, \theta, \varphi)$ die Transformation von Kugel- in kartesische Koordinaten, dann gilt für deren Ableitung J die Gleichung

$$J = \begin{pmatrix} \frac{\partial x}{\partial r} & \frac{\partial x}{\partial \theta} & \frac{\partial x}{\partial \varphi} \\ \frac{\partial y}{\partial r} & \frac{\partial y}{\partial \theta} & \frac{\partial y}{\partial \varphi} \\ \frac{\partial z}{\partial r} & \frac{\partial z}{\partial \theta} & \frac{\partial z}{\partial \varphi} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sin(\theta) \cos(\varphi) & r \cos(\theta) \cos(\varphi) & -r \sin(\theta) \sin(\varphi) \\ \sin(\theta) \sin(\varphi) & r \cos(\theta) \sin(\varphi) & r \sin(\theta) \cos(\varphi) \\ \cos(\theta) & -r \sin(\theta) & 0 \end{pmatrix}. \quad (\text{A.258})$$

Die Spalten dieser Matrix sind die unnormierten, ortsabhängigen Basisvektoren

$$\mathbf{i}_r = \begin{pmatrix} \sin(\theta) \cos(\varphi) \\ \sin(\theta) \sin(\varphi) \\ \cos(\theta) \end{pmatrix}, \quad (\text{A.259})$$

$$\mathbf{i}_\theta = r \begin{pmatrix} \cos(\theta) \cos(\varphi) \\ \cos(\theta) \sin(\varphi) \\ -\sin(\theta) \end{pmatrix}, \quad (\text{A.260})$$

$$\mathbf{i}_\varphi = r \sin(\theta) \begin{pmatrix} -\sin(\varphi) \\ \cos(\varphi) \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (\text{A.261})$$

Hieraus ergibt sich für die Determinante g des metrischen Tensors

$$g = \begin{vmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & r^2 & 0 \\ 0 & 0 & r^2 \sin^2(\theta) \end{vmatrix} = r^4 \sin^2(\theta). \quad (\text{A.262})$$

Die normierten Spalten von J sind die ortsabhängigen Basisvektoren:

$$\mathbf{e}_r = \begin{pmatrix} \sin(\theta) \cos(\varphi) \\ \sin(\theta) \sin(\varphi) \\ \cos(\theta) \end{pmatrix} \quad (\text{A.263})$$

$$\mathbf{e}_\theta = \begin{pmatrix} \cos(\theta) \cos(\varphi) \\ \cos(\theta) \sin(\varphi) \\ -\sin(\theta) \end{pmatrix} \quad (\text{A.264})$$

$$\mathbf{e}_\varphi = \begin{pmatrix} -\sin(\varphi) \\ \cos(\varphi) \\ 0 \end{pmatrix} \quad (\text{A.265})$$

Man kann die Glg.en (A.244) - (A.256) anwenden. Um dies tun zu können, benötigt man die Wirkungen der Differenzialoperatoren auf die ortsabhängige Basis, diese sind in Termen von Ableitungen der Komponenten von $\mathbf{e}_r, \mathbf{e}_\theta, \mathbf{e}_\varphi$ nach x, y, z gegeben. Sei e eine solche Komponente und sei x_i eine kartesische Koordinate. Dann gilt nach Glg. (A.177)

$$\frac{\partial e}{\partial x_i} = \frac{d}{dx_i} e((r, \theta, \varphi) (x_1, x_2, x_3)) = \begin{pmatrix} \frac{\partial e}{\partial r} \\ \frac{\partial e}{\partial \theta} \\ \frac{\partial e}{\partial \varphi} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \frac{\partial r}{\partial x_i} \\ \frac{\partial \theta}{\partial x_i} \\ \frac{\partial \varphi}{\partial x_i} \end{pmatrix}. \quad (\text{A.266})$$

Damit gilt nach Glg. (A.246)

$$\begin{aligned} \Delta f &= \frac{2}{r} \frac{\partial f}{\partial r} + \frac{1}{r \tan(\theta)} \frac{1}{r} \frac{\partial f}{\partial \theta} + \frac{\partial^2 f}{\partial r^2} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 f}{\partial \theta^2} + \frac{1}{r^2 \sin^2(\theta)} \frac{\partial^2 f}{\partial \varphi^2} \\ &= \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial f}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin(\theta)} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin(\theta) \frac{\partial f}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2(\theta)} \frac{\partial^2 f}{\partial \varphi^2}. \end{aligned} \quad (\text{A.267})$$

Dies kann man noch etwas umformen. Man verwendet hierfür den Diffeomorphismus

$$\theta \leftrightarrow \mu := \cos(\theta), \quad (\text{A.268})$$

dann gilt

$$\frac{d}{d\theta} = \frac{d\mu}{d\theta} \frac{d}{d\mu} = -\sin(\theta) \frac{d}{d\mu}. \quad (\text{A.269})$$

Damit wird der Laplace-Operator zu

$$\begin{aligned}
\Delta &= \frac{\mathbf{i}}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{\mathbf{i}}{r^2 \sin(\theta)} \left(-\sin(\theta) \frac{\partial}{\partial \mu} \right) \left(\sin(\theta) \left(-\sin(\theta) \frac{d}{d\mu} \right) \right) + \frac{\mathbf{i}}{r^2 \sin^2(\theta)} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \\
&= \frac{\mathbf{i}}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{\mathbf{i}}{r^2} \frac{\partial}{\partial \mu} (\mathbf{i} - \mu^2) \frac{\partial}{\partial \mu} + \frac{\mathbf{i}}{r^2 (\mathbf{i} - \mu^2)} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \\
&= \frac{\mathbf{i}}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{\mathbf{i}}{r^2} \Delta_{\mu, \varphi}
\end{aligned} \tag{A.270}$$

mit

$$\Delta_{\mu, \varphi} = \frac{\partial}{\partial \mu} (\mathbf{i} - \mu^2) \frac{\partial}{\partial \mu} + \frac{\mathbf{i}}{\mathbf{i} - \mu^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \tag{A.271}$$

als Winkelanteil des Laplace-Operators. Dieser Winkelanteil wird in Kugelkoordinaten durch Vergleich mit Glg. (A.267) zu

$$\Delta_{\theta, \varphi} = \frac{\mathbf{i}}{\sin(\theta)} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin(\theta) \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{\mathbf{i}}{\sin^2(\theta)} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2}. \tag{A.272}$$

Für Vektorfelder schreibt man dann

$$\mathbf{v} = v_r \mathbf{e}_r + v_\theta \mathbf{e}_\theta + v_\varphi \mathbf{e}_\varphi. \tag{A.273}$$

Mit Glg. (A.244) folgt für die Divergenz eines Vektorfeldes

$$\nabla \cdot \mathbf{v} = \frac{\partial v_r}{\partial r} + \frac{\mathbf{i}}{r} \frac{\partial v_\theta}{\partial \theta} + \frac{\mathbf{i}}{r \sin(\theta)} \frac{\partial v_\varphi}{\partial \varphi} + \frac{2v_r}{r} + \frac{v_\theta}{r \tan(\theta)}. \tag{A.274}$$

Es gilt

$$\begin{aligned}
\nabla \times \mathbf{v} &= \frac{v_\theta}{r} \mathbf{e}_\varphi + \frac{v_\varphi}{r \tan(\theta)} \mathbf{e}_r - \frac{v_\varphi}{r} \mathbf{e}_\theta + \mathbf{e}_r \left(\frac{\mathbf{i}}{r} \frac{\partial v_\varphi}{\partial \theta} - \frac{\mathbf{i}}{r \sin(\theta)} \frac{\partial v_\theta}{\partial \varphi} \right) \\
&\quad + \mathbf{e}_\theta \left(\frac{\mathbf{i}}{r \sin(\theta)} \frac{\partial v_r}{\partial \varphi} - \frac{\partial v_\varphi}{\partial r} \right) + \mathbf{e}_\varphi \left(\frac{\partial v_\theta}{\partial r} - \frac{\mathbf{i}}{r} \frac{\partial v_r}{\partial \theta} \right).
\end{aligned} \tag{A.275}$$

Nun ist noch die materielle Ableitung (s. Glg. (A.256)) zu bearbeiten:

$$\begin{aligned}
\frac{D\mathbf{v}}{Dt} &= \frac{Dv_r}{Dt} \mathbf{e}_r + \frac{Dv_\theta}{Dt} \mathbf{e}_\theta + \frac{Dv_\varphi}{Dt} \mathbf{e}_\varphi + v_r \frac{De_r}{Dt} + v_\theta \frac{De_\theta}{Dt} + v_\varphi \frac{De_\varphi}{Dt} \\
&= \frac{Dv_r}{Dt} \mathbf{e}_r + \frac{Dv_\theta}{Dt} \mathbf{e}_\theta + \frac{Dv_\varphi}{Dt} \mathbf{e}_\varphi + v_r \left(\frac{Dx_r}{Dt} \frac{\partial \mathbf{e}_r}{\partial x_r} + \frac{Dx_\theta}{Dt} \frac{\partial \mathbf{e}_r}{\partial x_\theta} + \frac{Dx_\varphi}{Dt} \frac{\partial \mathbf{e}_r}{\partial x_\varphi} \right) + v_\theta \left(\frac{Dx_r}{Dt} \frac{\partial \mathbf{e}_\theta}{\partial x_r} + \frac{Dx_\theta}{Dt} \frac{\partial \mathbf{e}_\theta}{\partial x_\theta} + \frac{Dx_\varphi}{Dt} \frac{\partial \mathbf{e}_\theta}{\partial x_\varphi} \right) \\
&\quad + v_\varphi \left(\frac{Dx_r}{Dt} \frac{\partial \mathbf{e}_\varphi}{\partial x_r} + \frac{Dx_\theta}{Dt} \frac{\partial \mathbf{e}_\varphi}{\partial x_\theta} + \frac{Dx_\varphi}{Dt} \frac{\partial \mathbf{e}_\varphi}{\partial x_\varphi} \right) \\
&= \frac{Dv_r}{Dt} \mathbf{e}_r + \frac{Dv_\theta}{Dt} \mathbf{e}_\theta + \frac{Dv_\varphi}{Dt} \mathbf{e}_\varphi + v_r \left(\frac{Dx_\theta}{Dt} \frac{\mathbf{i}}{r} \mathbf{e}_\theta + \frac{Dx_\varphi}{Dt} \frac{\mathbf{i}}{r} \mathbf{e}_\varphi \right) + v_\theta \left(-\frac{Dx_\theta}{Dt} \frac{\mathbf{i}}{r} \mathbf{e}_r + \frac{Dx_\varphi}{Dt} \frac{\mathbf{i}}{r \tan(\theta)} \mathbf{e}_\varphi \right) \\
&\quad - v_\varphi \frac{Dx_\theta}{Dt} \frac{\mathbf{i}}{r} \mathbf{e}_r - v_\varphi \frac{Dx_\varphi}{Dt} \frac{\mathbf{i}}{r \tan(\theta)} \mathbf{e}_\theta \\
&= \mathbf{e}_r \left(\frac{Dv_r}{Dt} - \frac{\mathbf{i}}{r} v_\theta \frac{Dx_\theta}{Dt} - \frac{\mathbf{i}}{r} v_\varphi \frac{Dx_\varphi}{Dt} \right) + \mathbf{e}_\theta \left(\frac{Dv_\theta}{Dt} + \frac{\mathbf{i}}{r} v_r \frac{Dx_\theta}{Dt} - \frac{\mathbf{i}}{r \tan(\theta)} v_\varphi \frac{Dx_\varphi}{Dt} \right) \\
&\quad + \mathbf{e}_\varphi \left(\frac{Dv_\varphi}{Dt} + \frac{\mathbf{i}}{r} v_r \frac{Dx_\varphi}{Dt} + \frac{\mathbf{i}}{r \tan(\theta)} v_\theta \frac{Dx_\varphi}{Dt} \right)
\end{aligned} \tag{A.276}$$

A.11.1.1 Transformation auf geographische Koordinaten

Um auf geographische Koordinaten zu transformieren, beachtet man die Definition dieses KS in Absch. A.9.3 sowie Glg. (A.242):

$$\frac{\partial}{\partial x} = \frac{1}{r \cos(\varphi)} \frac{\partial}{\partial \lambda} = \frac{1}{r \sin(\theta)} \frac{\partial}{\partial \varphi} \quad (\text{A.277})$$

$$\frac{\partial}{\partial y} = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \varphi} = -\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} \quad (\text{A.278})$$

$$\frac{\partial}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial r} \quad (\text{A.279})$$

Die letzte Identität transformiert in die gewöhnlichen Kugelkoordinaten. Analog gilt dies für zweite Ableitungen. Für die Darstellung des Laplace-Operators Glg. (A.267) folgt

$$\begin{aligned} \Delta &= \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \cos^2(\varphi)} \frac{\partial^2}{\partial \lambda^2} + \frac{1}{r^2 \cos(\varphi)} \frac{\partial}{\partial \varphi} \left(\cos(\varphi) \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \\ &= \frac{\partial^2}{\partial z^2} + \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial z} - \frac{\tan(\varphi)}{r} \frac{\partial}{\partial y}. \end{aligned} \quad (\text{A.280})$$

Glg. (A.274) wird zu

$$\begin{aligned} \nabla \cdot \mathbf{v} &= \frac{\partial v_z}{\partial r} + \frac{1}{r} \frac{\partial v_y}{\partial \varphi} + \frac{1}{r \cos(\varphi)} \frac{\partial v_x}{\partial \lambda} + \frac{2v_z}{r} - \frac{v_y \tan(\varphi)}{r} = \nabla \cdot \mathbf{v} \\ &= \frac{\partial v_z}{\partial r} + \frac{\partial v_y}{\partial y} + \frac{\partial v_x}{\partial x} + \frac{2v_z}{r} - \frac{v_y \tan(\varphi)}{r}. \end{aligned} \quad (\text{A.281})$$

Für $\mathbf{v} = \mathbf{U}$ folgt

$$\nabla \cdot \mathbf{U} = \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} + \frac{\partial w}{\partial z} - \frac{v \tan(\varphi)}{r} + \frac{2w}{r}. \quad (\text{A.282})$$

Glg. (A.275) wird zu

$$\begin{aligned} \nabla \times \mathbf{v} &= -\frac{v_y}{r} \mathbf{i} + \frac{v_x \tan(\varphi)}{r} \mathbf{k} + \frac{v_x}{r} \mathbf{j} + \mathbf{k} \left(-\frac{1}{r} \frac{\partial v_x}{\partial \varphi} + \frac{1}{r \cos(\varphi)} \frac{\partial v_y}{\partial \lambda} \right) \\ &\quad - \mathbf{j} \left(\frac{1}{r \cos(\varphi)} \frac{\partial v_z}{\partial \lambda} - \frac{\partial v_x}{\partial r} \right) + \mathbf{i} \left(-\frac{\partial v_y}{\partial r} + \frac{1}{r} \frac{\partial v_z}{\partial \varphi} \right) \\ &= -\frac{v_y}{r} \mathbf{i} + \frac{v_x \tan(\varphi)}{r} \mathbf{k} + \frac{v_x}{r} \mathbf{j} + \mathbf{k} \left(-\frac{\partial v_x}{\partial y} + \frac{\partial v_y}{\partial x} \right) \\ &\quad - \mathbf{j} \left(\frac{\partial v_z}{\partial x} - \frac{\partial v_x}{\partial r} \right) + \mathbf{i} \left(-\frac{\partial v_y}{\partial r} + \frac{\partial v_z}{\partial y} \right). \end{aligned} \quad (\text{A.283})$$

Für $\mathbf{v} = \mathbf{U}$ folgt

$$\nabla \times \mathbf{U} = \left(\frac{\partial w}{\partial y} - \frac{\partial v}{\partial z} \right) \mathbf{i} + \left(\frac{\partial u}{\partial z} - \frac{\partial w}{\partial x} \right) \mathbf{j} + \left(\frac{\partial v}{\partial x} - \frac{\partial u}{\partial y} \right) \mathbf{k} + \frac{u \tan(\varphi)}{r} \mathbf{k} + \frac{u}{r} \mathbf{j} - \frac{v}{r} \mathbf{i}. \quad (\text{A.284})$$

Weiterhin gilt

$$\zeta := \mathbf{k} \cdot (\nabla \times \mathbf{U}) = \frac{\partial v}{\partial x} - \frac{\partial u}{\partial y} + \frac{u \tan(\varphi)}{r}. \quad (\text{A.285})$$

Zu beachten ist, dass gilt

$$\nabla_H \times \mathbf{V} = \left(\frac{\partial v}{\partial x} - \frac{\partial u}{\partial y} \right) \mathbf{k} + \frac{u \tan(\varphi)}{r} \mathbf{k} + \frac{u}{r} \mathbf{j} - \frac{v}{r} \mathbf{i} \neq \zeta \mathbf{k}. \quad (\text{A.286})$$

Für die *materielle Ableitung* folgt mit Glg. (A.276)

$$\begin{aligned}\frac{D\boldsymbol{v}}{Dt} &= \boldsymbol{k} \left(\frac{Dv_r}{Dt} - \frac{\mathbf{i}}{r} v_\varphi v - \frac{\mathbf{i}}{r} v_\lambda u \right) + \mathbf{j} \left(\frac{Dv_\varphi}{Dt} + \frac{\mathbf{i}}{r} v_r v + \frac{\tan(\varphi)}{r} v_\lambda u \right) \\ &\quad + \mathbf{i} \left(\frac{Dv_\lambda}{Dt} + \frac{\mathbf{i}}{r} v_r u - \frac{\tan(\varphi)}{r} v_\varphi u \right).\end{aligned}\quad (\text{A.287})$$

Für $\boldsymbol{v} = \boldsymbol{U}$ folgt

$$\begin{aligned}\frac{DU}{Dt} &= \mathbf{i} \left(\frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial x} + v \frac{\partial u}{\partial y} + w \frac{\partial u}{\partial z} - \frac{uv \tan(\varphi)}{a+z} + \frac{uw}{a+z} \right) \\ &\quad + \mathbf{j} \left(\frac{\partial v}{\partial t} + u \frac{\partial v}{\partial x} + v \frac{\partial v}{\partial y} + w \frac{\partial v}{\partial z} + \frac{u^2 \tan(\varphi)}{a+z} + \frac{vw}{a+z} \right) \\ &\quad + \boldsymbol{k} \left(\frac{\partial w}{\partial t} + u \frac{\partial w}{\partial x} + v \frac{\partial w}{\partial y} + w \frac{\partial w}{\partial z} - \frac{u^2 + v^2}{a+z} \right).\end{aligned}\quad (\text{A.288})$$

Eine weitere Form des advektiven Anteils hiervon ist

$$\begin{aligned}(\boldsymbol{U} \cdot \nabla) \boldsymbol{U} &= [(V + w\boldsymbol{k}) \cdot \nabla] (V + w\boldsymbol{k}) = (V \cdot \nabla) V + w \frac{\partial V}{\partial z} + (\boldsymbol{U} \cdot \nabla) (w\boldsymbol{k}) \\ &\stackrel{\text{Glg. (A.234)}}{=} (\nabla \times \boldsymbol{V}) \times \boldsymbol{V} + \nabla \frac{\boldsymbol{V}^2}{2} + w \frac{\partial \boldsymbol{V}}{\partial z} + (\boldsymbol{U} \cdot \nabla) (w\boldsymbol{k}) \\ &= (\nabla_H \times \boldsymbol{V}) \times \boldsymbol{V} + \nabla_H \frac{\boldsymbol{V}^2}{2} + w \frac{\partial \boldsymbol{V}}{\partial z} + (\boldsymbol{U} \cdot \nabla) (w\boldsymbol{k}).\end{aligned}\quad (\text{A.289})$$

Im letzten Schritt wurde

$$\left(\boldsymbol{k} \frac{\partial}{\partial z} \times \boldsymbol{V} \right) \times \boldsymbol{V} = \begin{pmatrix} -\frac{\partial v}{\partial z} \\ \frac{\partial u}{\partial z} \\ 0 \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} u \\ v \\ 0 \end{pmatrix} = - \left(u \frac{\partial u}{\partial z} + v \frac{\partial v}{\partial z} \right) \boldsymbol{k} = -\frac{\mathbf{i}}{2} \boldsymbol{k} \frac{\partial \boldsymbol{V}^2}{\partial z}\quad (\text{A.290})$$

verwendet. Glg. (A.289) bezeichnet man als *2D-vektorinvariante Form der Geschwindigkeitsadvektion*.

A.12 Mehrdimensionale Integralrechnung

Seien $M, N \subseteq \mathbb{R}^3$, $f: M \rightarrow \mathbb{R}$ stetig, $T: N \rightarrow M$ ein Diffeomorphismus, dann gilt

$$\int_M f d^3 r = \int_N f \circ T |\det(T')| d^3 r,\quad (\text{A.291})$$

dies entspricht der mehrdimensionalen Substitutionsformel. Die Determinante $\det(T')$ heißt *Funktionaldeterminante*. Als Beispiel nehme $M = \mathbb{R}$, $N = [0, \infty) \times [0, \pi] \times [0, 2\pi]$ und

$$T = r \begin{pmatrix} \sin(\vartheta) \cos(\varphi) \\ \sin(\vartheta) \sin(\varphi) \\ \cos(\vartheta) \end{pmatrix},\quad (\text{A.292})$$

dann gilt

$$T' = \begin{pmatrix} \sin(\vartheta) \cos(\varphi) & r \cos(\vartheta) \cos(\varphi) & -r \sin(\vartheta) \sin(\varphi) \\ \sin(\vartheta) \sin(\varphi) & r \cos(\vartheta) \sin(\varphi) & r \sin(\vartheta) \cos(\varphi) \\ \cos(\vartheta) & -r \sin(\vartheta) & 0 \end{pmatrix}.\quad (\text{A.293})$$

Für die Determinante gilt

$$\begin{aligned}\det(T') &= -r \sin(\vartheta) \cos(\varphi) (-r \sin^2 \vartheta \cos(\varphi) - r \cos^2 \vartheta \cos(\varphi)) \\ &\quad - r \sin(\vartheta) \sin(\varphi) (-r \sin^2 \vartheta \sin(\varphi) - r \cos^2 \vartheta \sin(\varphi)) \\ &= r^2 \sin(\vartheta) \cos^2(\varphi) + r^2 \sin(\vartheta) \sin^2(\vartheta) = r^2 \sin(\vartheta),\end{aligned}\quad (\text{A.294})$$

im Falle geographischer Koordinaten ist die Funktionaldeterminante $r^2 \cos(\varphi)$.

Der Satz von Stokes Glg. (5.28) wurde bereits eingeführt. Seien $A \subseteq \mathbb{R}^3$ zusammenhängend und $\boldsymbol{v}: A \rightarrow \mathbb{R}^3$

stetig-differenzierbar. Dann gilt

$$\int_A \nabla \cdot \mathbf{v} d^3r = \int_{\partial A} \mathbf{v} \cdot d\mathbf{A}. \quad (\text{A.295})$$

Dies ist der *Gauß'sche Satz*.

Eine Kugel $K_N(R)$ im \mathbb{R}^N mit Radius $R \geq 0$ kann man definieren durch

$$K_N(R) := \left\{ \mathbf{x} = (x_1, \dots, x_N)^T \in \mathbb{R}^N \middle| \sum_{i=1}^N x_i^2 \leq R^2 \right\}. \quad (\text{A.296})$$

Ihr Volumen ist

$$V_N(R) = \int_{K_N} dx_1 \dots dx_N. \quad (\text{A.297})$$

Es gilt

$$\int_{\mathbb{R}^N} \exp\left(-\sum_{i=1}^N x_i^2\right) dx_1 \dots dx_N = \int_0^\infty e^{-R^2} \frac{dV_N}{dR} dR, \quad (\text{A.298})$$

dies entspricht einer Transformation auf Kugelkoordinaten. Man kann auch das Integral $V_N(R)$ auf Kugelkoordinaten transformieren, indem man schreibt

$$V_N(R) = \int_{K_N} dV_N = \int_0^R f_N(R) dR, \quad (\text{A.299})$$

hierbei ist $f_N(R)$ die über die Oberfläche integrierte Funktionaldeterminante. Die N -dimensionalen Kugelkoordinaten bestehen aus $N - 1$ Winkeln und einem Abstand. Daher ist $f_N(R)$ die Determinante einer reellen $N \times N$ -Matrix, in der in $N - 1$ Spalten der Faktor R auftritt. $f_N(R)$ ist somit vom Grad $N - 1$, man kann schreiben

$$f_N(R) = NC_N R^{N-1}. \quad (\text{A.300})$$

Durch Differenzieren von Glg. (A.299) nach R und mit Glg. (A.298) folgt

$$\begin{aligned} \frac{dV_N}{dR} &= NC_N R^{N-1} \\ \Rightarrow NC_N \int_0^\infty e^{-R^2} R^{N-1} dR &= \left(\int_{-\infty}^\infty e^{-x^2} dx \right)^N = \pi^{N/2}. \end{aligned} \quad (\text{A.301})$$

Der letzte Schritt folgt mit Glg. (A.111). Es gilt mit der Substitutionsregel

$$\begin{aligned} \int_0^\infty e^{-R^2} R^{N-1} dR &= \int_0^\infty e^{-R} R^{\frac{N-1}{2}} \frac{1}{2} R^{-\frac{1}{2}} dR = \frac{1}{2} \int_0^\infty e^{-R} R^{N/2-1} dR \\ &= \frac{1}{2} \Gamma\left(\frac{N}{2}\right). \end{aligned} \quad (\text{A.302})$$

Es folgt mit Glg. (A.117)

$$V_N = C_N R^N = \frac{\pi^{N/2}}{\frac{N}{2} \Gamma\left(\frac{N}{2}\right)} R^N = \frac{\pi^{N/2}}{\Gamma\left(\frac{N}{2} + 1\right)} R^N. \quad (\text{A.303})$$

A.13 Schwerkraftfeld der Erde

A.13.1 Eigenschaften von Ellipsen und Ellipsoiden

Eine *Ellipse* in der xz-Ebene wird beschrieben durch

$$\frac{x^2}{a^2} + \frac{z^2}{c^2} = 1. \quad (\text{A.304})$$

Dabei ist $a > c$ die *große Halbachse* (maximale Ausdehung der Ellipse in x-Richtung) und $c < a < c$ die *kleine Halbachse* (maximale Ausdeitung der Ellipse in z-Richtung). Die *Exzentrizität* wird zu

$$\varepsilon := \frac{a - c}{a} \quad (\text{A.305})$$

definiert. Damit erhält man

$$c = a(1 - \varepsilon). \quad (\text{A.306})$$

In Polarkoordinaten folgen mit

$$x = r \cos(\varphi), \quad (\text{A.307})$$

$$z = r \sin(\varphi) \quad (\text{A.308})$$

die Gleichungen

$$\begin{aligned} \frac{r^2}{a^2} \cos^2(\varphi) + \frac{r^2}{c^2} \sin^2(\varphi) &= 1 \\ \Rightarrow r(\varphi) &= \left[\frac{\cos^2(\varphi)}{a^2} + \frac{\sin^2(\varphi)}{c^2} \right]^{-1/2} = a \left[\cos^2(\varphi) + \frac{a^2}{c^2} \sin^2(\varphi) \right]^{-1/2} \\ \Rightarrow r(\varphi) &= a \left[1 + \left(\frac{a^2}{c^2} - 1 \right) \sin^2(\varphi) \right]^{-1/2}. \end{aligned} \quad (\text{A.309})$$

Mit

$$\frac{a^2}{c^2} - 1 = \frac{1}{(1 - \varepsilon)^2} - 1 = \frac{1 - (1 - \varepsilon)^2}{(1 - \varepsilon)^2} = \frac{2\varepsilon - \varepsilon^2}{(1 - \varepsilon)^2} \quad (\text{A.310})$$

kann man dies zu

$$r(\varphi) = a \left[1 + \frac{2\varepsilon - \varepsilon^2}{(1 - \varepsilon)^2} \sin^2(\varphi) \right]^{-1/2}. \quad (\text{A.311})$$

umschreiben. Aus Glg (A.310) folgt weiter

$$a^2 - c^2 = c^2 \frac{2\varepsilon - \varepsilon^2}{(1 - \varepsilon)^2} = a^2 \varepsilon (2 - \varepsilon). \quad (\text{A.312})$$

Ein *Rotationsellipsoid* oder auch einfach *Ellipsoid* entsteht, indem man die eben untersuchte Ellipse um die z-Achse rotieren lässt. Sein Volumen V berechnet sich zu

$$\begin{aligned} V &= \int_{-c}^c \int_0^{a\sqrt{1-\frac{z^2}{c^2}}} 2\pi x dx dz = 2\pi \int_{-c}^c \left[\frac{1}{2} x^2 \right]_0^{a\sqrt{1-\frac{z^2}{c^2}}} dz \\ &= 2\pi \int_{-c}^c \frac{1}{2} a^2 \left(1 - \frac{z^2}{c^2} \right) dz = \pi \int_{-c}^c a^2 - \frac{a^2}{c^2} z^2 dz = \pi 2a^2 c - \pi \frac{a^2}{c^2} \frac{2}{3} c^3 \\ &= \pi 2a^2 c - \frac{2}{3} \pi a^2 c = \frac{4}{3} \pi a^2 c \end{aligned} \quad (\text{A.313})$$

A.14 Orthogonale Funktionensysteme

Wenn sie vollständig sind, eignen sich orthogonale Funktionensysteme zur Entwicklung von Funktionen. Eine System aus Polynomen $f_n(x)$ mit $n \in \mathbb{N}$ und $\mathcal{O}(f_n) = n$ heißt orthogonal auf dem Intervall $[a, b]$ bezüglich der Funktion w , wenn für $n, m \in \mathbb{N}$ mit $n \neq m$ gilt

$$\int_a^b w(x) f_n(x) f_m(x) dx = 0. \quad (\text{A.314})$$

Alle orthogonalen Polynomensysteme erfüllen eine *Rodrigues-Formel*

$$f_n(x) = \frac{1}{e_n w(x)} \frac{d^n}{dx^n} [w(x) g(x)^n] \quad (\text{A.315})$$

mit einem Polynom $g(x)$, welches nicht von n abhängt.

A.14.1 Legendre-Polynome

Glg. (??) heißt *Legendre'sche Differenzialgleichung*. Diese lautet:

$$\frac{d}{d\mu} (1 - \mu^2) P'(\mu) = -\lambda P(\mu) \quad (\text{A.316})$$

Man setzt für $P(\mu)$ an

$$P(\mu) = \sum_{i=0}^{\infty} U_i \mu^i, \quad (\text{A.317})$$

damit gilt

$$P'(\mu) = \sum_{i=0}^{\infty} i U_i \mu^{i-1} = \sum_{i=0}^{\infty} (i+1) U_{i+1} \mu^i, \quad (\text{A.318})$$

$$P''(\mu) = \sum_{i=0}^{\infty} i(i-1) U_i \mu^{i-2} = \sum_{i=0}^{\infty} (i+2)(i+1) U_{i+2} \mu^i. \quad (\text{A.319})$$

Setzt man dies in

$$-2\mu P'(\mu) + (1 - \mu^2) P''(\mu) = -\lambda P(\mu) \quad (\text{A.320})$$

ein, erhält man

$$\begin{aligned} -2 \sum_{i=0}^{\infty} i U_i \mu^i + \sum_{i=0}^{\infty} (i+2)(i+1) U_{i+2} \mu^i - \sum_{i=0}^{\infty} i(i-1) U_i \mu^i &= -\lambda \sum_{i=0}^{\infty} U_i \mu^i \\ \Leftrightarrow -2iU_i + (i+2)(i+1)U_{i+2} - i(i-1)U_i &= -\lambda U_i \\ \Leftrightarrow U_{i+2} &= U_i \frac{i(i+1) - \lambda}{(i+2)(i+1)}. \end{aligned} \quad (\text{A.321})$$

Im Allgemeinen geht dies für $i \rightarrow \infty$ nicht gegen Null, sodass P divergieren würde. Es muss also ein $n \in \mathbb{N}$ geben mit $\lambda = n(n+1)$, dies ist eine Bedingung an λ . Zusätzlich muss man $U_{n+1} = 0$ setzen. $P(\mu)$ ist also ein Polynom n -ter Ordnung in μ , wobei n beliebig ist, man schreibt für dieses Legendre-Polynom $P_n(\mu)$. Über Glg. (A.321) und eine Normierung ist $P_n(\mu)$ festgelegt. Alternativ kann man die Legendre-Polynome schreiben als

$$P_n(x) = \frac{1}{2^n n!} \frac{d^n}{dx^n} (x^2 - 1)^n, \quad (\text{A.322})$$

dies ist nun zu zeigen. Definiere

$$\delta_k := \begin{cases} 0, & k \text{ ungerade}, \\ 1, & k \text{ gerade}. \end{cases} \quad (\text{A.323})$$

Nun kann man den binomischen Lehrsatz Glg. (A.16) verwenden, um

$$(x^2 - 1)^n = \sum_{k=0}^n \binom{n}{k} x^{2k} (-1)^{n-k} = \sum_{k=0}^{\frac{n}{2}} \delta_k \binom{n}{\frac{k}{2}} x^k (-1)^{n-k/2} \quad (\text{A.324})$$

zu notieren, damit folgt für die obige Schreibweise der Legendre-Polynome Glg. (A.322) mit Glg. (A.33)

$$\begin{aligned} P_n(x) &= \frac{1}{2^n n!} \sum_{k=0}^n \frac{(k+n)!}{k!} \binom{n}{\frac{k+n}{2}} (-1)^{n-\frac{k+n}{2}} \delta_{k+n} x^k \\ &= \frac{1}{2^n n!} \sum_{k=0}^n \frac{(n+k)!}{k!} \frac{n!}{(\frac{n+k}{2})! (n-\frac{n+k}{2})!} (-1)^{n-\frac{k+n}{2}} \delta_{n+k} x^k \\ &= \frac{1}{2^n} \sum_{k=0}^n \frac{(n+k)!}{k!} \frac{1}{(\frac{n+k}{2})! (\frac{n-k}{2})!} (-1)^{\frac{n-k}{2}} \delta_{n+k} x^k. \end{aligned} \quad (\text{A.325})$$

Für die ersten beiden Ableitungen der Legendre-Polynome folgt

$$\begin{aligned} P'_n(x) &= \frac{1}{2^n} \sum_{k=0}^{n-1} (k+1) \frac{(n+k+1)!}{(k+1)!} \frac{1}{(\frac{n+k+1}{2})! (\frac{n-k-1}{2})!} (-1)^{\frac{n-k-1}{2}} \delta_{n+k+1} x^k \\ &= \frac{1}{2^n} \sum_{k=0}^{n-1} \frac{(n+k+1)!}{k!} \frac{1}{(\frac{n+k+1}{2})! (\frac{n-k-1}{2})!} (-1)^{\frac{n-k-1}{2}} \delta_{n+k+1} x^k, \end{aligned} \quad (\text{A.326})$$

$$\begin{aligned} P''_n(x) &= \frac{1}{2^n} \sum_{k=0}^{n-2} (k+1) \frac{(n+k+2)!}{(k+1)!} \frac{1}{(\frac{n+k+2}{2})! (\frac{n-k-2}{2})!} (-1)^{\frac{n-k-2}{2}} \delta_{n+k+2} x^k \\ &= \frac{1}{2^n} \sum_{k=0}^{n-2} \frac{(n+k+2)!}{k!} \frac{1}{(\frac{n+k+2}{2})! (\frac{n-k-2}{2})!} (-1)^{\frac{n-k-2}{2}} \delta_{n+k} x^k \\ &= \frac{1}{2^n} \sum_{k=0}^{n-2} \frac{(n+k+2)!}{k!} \frac{1}{(\frac{n+k}{2})! (\frac{n+k}{2} + 1)} \frac{(\frac{n-k}{2})}{(\frac{n-k}{2})!} (-1)^{\frac{n-k-2}{2}} \delta_{n+k} x^k \\ &= \frac{1}{2^n} \sum_{k=0}^{n-2} \frac{1}{(\frac{n+k}{2})! (\frac{n-k}{2})!} \frac{(n+k+1)!}{k!} (n-k) (-1)^{\frac{n-k-2}{2}} \delta_{n+k} x^k. \end{aligned} \quad (\text{A.327})$$

Nun wird gezeigt, dass die Legendre-Polynome nach Glg. (A.322) in der Tat die Legendredifferenzialgleichung (??) lösen:

$$\begin{aligned}
& -2xP'_n(x) + (1-x^2)P''_n(x) \stackrel{!}{=} -n(n+1)P_n(x) \\
\Leftrightarrow & -2x \frac{1}{2^n} \sum_{k=0}^{n-1} \frac{(n+k+1)!}{k!} \frac{1}{(\frac{n+k+1}{2})!} \frac{1}{(\frac{n-k-1}{2})!} (-1)^{\frac{n-k-1}{2}} \delta_{n+k+1} x^k \\
& + \frac{1}{2^n} \sum_{k=0}^{n-2} \frac{1}{(\frac{n+k}{2})!} \frac{1}{(\frac{n-k}{2})!} \frac{(n+k+1)!}{k!} (n-k)(-1)^{\frac{n-k-2}{2}} \delta_{n+k} x^k \\
& - \frac{1}{2^n} \sum_{k=0}^{n-2} \frac{(n+k+2)!}{k!} \frac{1}{(\frac{n+k+2}{2})!} \frac{1}{(\frac{n-k-2}{2})!} (-1)^{\frac{n-k-2}{2}} \delta_{n+k} x^{k+2} \\
= & -n(n+1) \frac{1}{2^n} \sum_{k=0}^n \frac{(n+k)!}{k!} \frac{1}{(\frac{n+k}{2})!} \frac{1}{(\frac{n-k}{2})!} (-1)^{\frac{n-k}{2}} \delta_{n+k} x^k \\
\Leftrightarrow & -2 \sum_{k=0}^n k \frac{(n+k)!}{k!} \frac{1}{(\frac{n+k}{2})!} \frac{1}{(\frac{n-k}{2})!} (-1)^{\frac{n-k}{2}} \delta_{n+k} x^k \\
& + \sum_{k=0}^{n-2} \frac{1}{(\frac{n+k}{2})!} \frac{1}{(\frac{n-k}{2})!} \frac{(n+k+1)!}{k!} (n-k)(-1)^{\frac{n-k-2}{2}} \delta_{n+k} x^k \\
& - \sum_{k=0}^n k(k-1) \frac{(n+k)!}{k!} \frac{1}{(\frac{n+k}{2})!} \frac{1}{(\frac{n-k}{2})!} (-1)^{\frac{n-k}{2}} \delta_{n+k} x^k \\
= & -n(n+1) \sum_{k=0}^n \frac{(n+k)!}{k!} \frac{1}{(\frac{n+k}{2})!} \frac{1}{(\frac{n-k}{2})!} (-1)^{\frac{n-k}{2}} \delta_{n+k} x^k \tag{A.328}
\end{aligned}$$

Man zeigt die Gleichheit der Koeffizienten der drei Polynome. Von $k = 0$ bis $k = n-2$ bedeutet dies

$$2k + n^2 - nk + kn - k^2 + n - k + k^2 - k \stackrel{!}{=} n^2 + n, \tag{A.329}$$

was stimmt. Für $k = n-1$ gilt

$$\delta_{n+k} = 0, \tag{A.330}$$

und für $k = n$ gilt

$$-2n - n(n-1) \stackrel{!}{=} -n(n+1), \tag{A.331}$$

was ebenfalls stimmt. Nun wird die Normierung der Legendre-Polynome auf der für dieses Problem relevanten Menge $[-1, 1]$ bestimmt.

$$\begin{aligned} \int_{-1}^1 P_n(x) dx &= \frac{1}{2^{2n} n!^2} \int_{-1}^1 \frac{d^n}{dx^n} (x^2 - 1)^n \frac{d^n}{dx^n} (x^2 - 1)^n dx \\ &\stackrel{n\text{-fache p.I.}}{=} \frac{1}{2^{2n} n!^2} (-1)^n \int_{-1}^1 (x^2 - 1)^n \frac{d^{2n}}{dx^{2n}} (x^2 - 1)^n dx \\ &= \frac{1}{2^{2n} n!^2} (-1)^n (2n)! \int_{-1}^1 (x^2 - 1)^n dx \end{aligned} \quad (\text{A.332})$$

Es gilt weiter

$$\begin{aligned} \int (x^2 - 1)^n dx &= \int (x + 1)^n (x - 1)^n dx \stackrel{n\text{-fache p.I.}}{=} (-1)^n \int \frac{n! (x + 1)^{2n}}{(2n)!} n! dx \\ &= (-1)^n \frac{n!^2}{(2n)!} \int (x + 1)^{2n} dx = (-1)^n \frac{n!^2}{(2n)!} \left[\frac{(x + 1)^{2n+1}}{2n + 1} \right], \end{aligned} \quad (\text{A.333})$$

damit folgt

$$\int_{-1}^1 P_n(x) dx = \frac{1}{2^{2n} n!^2} (-1)^n (2n)! \frac{1}{(2n)!} (-1)^n n!^2 \frac{2^{2n+1}}{2n + 1} = \frac{2}{2n + 1}. \quad (\text{A.334})$$

Nun wird die Orthogonalität der Legendre-Polynome gezeigt, seien $n, m \in \mathbb{N}$ mit $n \neq m$, dann gilt

$$\frac{d}{dx} \left[(1 - x^2) \frac{d}{dx} \right] P_n(x) = -n(n+1) P_n(x) \quad (\text{A.335})$$

und analog für m . Man rechnet

$$\int_{-1}^1 P_m(x) \frac{d}{dx} \left[(1 - x^2) \frac{d}{dx} \right] P_n(x) dx = - \int_{-1}^{(1)} P'_m(x) (1 - x^2) P'_n(x) dx \quad (\text{A.336})$$

sowie

$$\int_{-1}^1 P_n(x) \frac{d}{dx} \left[(1 - x^2) \frac{d}{dx} \right] P_m(x) dx = - \int_{-1}^1 P'_n(x) (1 - x^2) P'_m(x) dx, \quad (\text{A.337})$$

außerdem gelten

$$\int_{-1}^1 P_m(x) \frac{d}{dx} \left[(1 - x^2) \frac{d}{dx} \right] P_n(x) dx = -n(n+1) \int_{-1}^1 P_m(x) P_n(x) dx, \quad (\text{A.338})$$

$$\int_{-1}^{(1)} P_n(x) \frac{d}{dx} \left[(1 - x^2) \frac{d}{dx} \right] P_m(x) dx = -m(m+1) \int_{-1}^1 P_n(x) P_m(x) dx. \quad (\text{A.339})$$

Damit ist

$$-n(n+1) \int_{-1}^1 P_m(x) P_n(x) dx = -m(m+1) \int_{-1}^{(1)} P_n(x) P_m(x) dx \quad (\text{A.340})$$

und wegen $n \neq m$ ist

$$\int_{-1}^1 P_n(x) P_m(x) dx = 0. \quad (\text{A.341})$$

Damit ist zusammengefasst

$$\int_{-1}^1 P_n(x) P_m(x) dx = \frac{2}{2n + 1} \delta_{mn}. \quad (\text{A.342})$$

Nun soll

$$(\mathbf{2}l + \mathbf{1}) x P_l(x) = (l + \mathbf{1}) P_{l+1}(x) + l P_{l-1}(x) \quad (\text{A.343})$$

gezeigt werden. Zunächst macht man sich klar, dass auf der linken wie auf der rechten Seite des Gleichheitszeichens Polynome vom Grad $l + \mathbf{1}$ stehen mit jeweils nur geraden oder ungeraden Potenzen. Man schreibt

$$P_l(x) = \frac{\mathbf{1}}{\mathbf{2}^l} \frac{d^l}{dx^l} \sum_{k=0}^l \frac{\mathbf{1}}{k!(l-k)!} x^{2k} (-\mathbf{1})^{l-k} = \frac{\mathbf{1}}{\mathbf{2}^l} \sum_{k=\left(\frac{l}{2}\right)_+}^l \frac{\mathbf{1}}{k!(l-k)!} \frac{(2k)!}{(2k-l)!} x^{2k-l} (-\mathbf{1})^{l-k}, \quad (\text{A.344})$$

dabei ist $\left(\frac{l}{2}\right)_+$ die kleinste natürliche Zahl $\geq \frac{l}{2}$. Daraus folgen

$$(\mathbf{2}l + \mathbf{1}) x P_l(x) = \frac{\mathbf{2}l + \mathbf{1}}{\mathbf{2}^l} \sum_{k=\left(\frac{l}{2}\right)_+}^l \frac{\mathbf{1}}{k!(l-k)!} \frac{(2k)!}{(2k-l)!} x^{2k-l+1} (-\mathbf{1})^{l-k}, \quad (\text{A.345})$$

$$(l + \mathbf{1}) P_{l+1}(x) = -\frac{\mathbf{1}}{\mathbf{2}^{l+1}} \sum_{k=\left(\frac{l+1}{2}\right)_+}^{l+1} \frac{l + \mathbf{1}}{k!(l+\mathbf{1}-k)!} \frac{(2k)!}{(2k-l-\mathbf{1})!} x^{2k-l-1} (-\mathbf{1})^{l-k} \quad (\text{A.346})$$

$$= \frac{l + \mathbf{1}}{\mathbf{2}^l} \sum_{k=\left(\frac{l-1}{2}\right)_+}^l \frac{(2k+\mathbf{1})}{k!(l-k)!} \frac{(2k)!}{(2k-l+\mathbf{1})!} x^{2k-l+1} (-\mathbf{1})^{l-k} \quad (\text{A.347})$$

$$P_{l-1}(x) = -\frac{\mathbf{2}l}{\mathbf{2}^l} \sum_{k=\left(\frac{l-1}{2}\right)_+}^{l-1} \frac{\mathbf{1}}{k!(l-\mathbf{1}-k)!} \frac{(2k)!}{(2k-l+\mathbf{1})!} x^{2k-l+1} (-\mathbf{1})^{l-k}. \quad (\text{A.348})$$

Zwei Polynome sind genau dann gleich, wenn all ihre Koeffizienten gleich sind.

$$\begin{aligned} 4kl - \mathbf{2}l^2 + l + \mathbf{2}k + \mathbf{1} &= 4kl + l + \mathbf{2}k + \mathbf{1} - \mathbf{2}l^2 \\ \Leftrightarrow (\mathbf{2}l + \mathbf{1})(\mathbf{2}k - l + \mathbf{1}) &= (l + \mathbf{1})(\mathbf{2}k + \mathbf{1}) - (l - k)\mathbf{2}l \end{aligned} \quad (\text{A.349})$$

$$\begin{aligned} \Leftrightarrow \frac{\mathbf{2}l + \mathbf{1}}{l - k} \frac{\mathbf{2}k - l + \mathbf{1}}{\mathbf{2}k - l + \mathbf{1}} &= \frac{l + \mathbf{1}}{l - k} \frac{\mathbf{2}k + \mathbf{1}}{\mathbf{2}k - l + \mathbf{1}} - \frac{l - k}{l - k} \frac{\mathbf{2}l}{\mathbf{2}k - l + \mathbf{1}} \\ \Leftrightarrow \frac{\mathbf{2}l + \mathbf{1}}{l - k} &= \frac{l + \mathbf{1}}{l - k} \frac{\mathbf{2}k + \mathbf{1}}{\mathbf{2}k - l + \mathbf{1}} - \frac{\mathbf{2}l}{\mathbf{2}k - l + \mathbf{1}} \end{aligned} \quad (\text{A.350})$$

Nun müssen noch die unteren und die oberen Grenzen der Summen untersucht werden. Für $k = l$ erhält man

$$\mathbf{2}l + \mathbf{1} = (l + \mathbf{1}) \frac{\mathbf{2}l + \mathbf{1}}{\mathbf{2}l - l + \mathbf{1}}. \quad (\text{A.351})$$

Bei der unteren Grenze muss man eine Fallunterscheidung machen. Ist l gerade, ist alles gezeigt. Für l ungerade rechnet man

$$(l + \mathbf{1}) \frac{l}{l - \frac{l-1}{2}} - \mathbf{2}l = 0. \quad (\text{A.352})$$

Für $l = 0$ gilt die Aussage ebenfalls. Damit ist Glg. (A.343) gezeigt. Aus dieser Glg. folgt weiter

$$\cos(\theta) P_l(\cos(\theta)) = \frac{l + \mathbf{1}}{\mathbf{2}l + \mathbf{1}} P_{l+1}(\cos(\theta)) + \frac{l}{\mathbf{2}l + \mathbf{1}} P_{l-1}(\cos(\theta)). \quad (\text{A.353})$$

Nun soll noch die Lösung von Glg. (??) für $m \neq 0$ besprochen werden. Diese DGL lautete

$$\frac{d}{d\mu} (\mathbf{1} - \mu^2) P'(\mu) = P\left(-\lambda + \frac{m^2}{\mathbf{1} - \mu^2}\right). \quad (\text{A.354})$$

Mit dem Ansatz

$$P(\mu) = (\mathbf{1} - \mu^2)^{m/2} T(\mu) \quad (\text{A.355})$$

erhält man

$$P'(\mu) = -\mu m (1 - \mu^2)^{m/2-1} T(\mu) + (1 - \mu^2)^{m/2} T'(\mu), \quad (\text{A.356})$$

$$(1 - \mu^2) P'(\mu) = -\mu m (1 - \mu^2)^{m/2} T(\mu) + (1 - \mu^2)^{m/2+1} T'(\mu). \quad (\text{A.357})$$

Setzt man dies in Glg. (A.354) ein, erhält man

$$\begin{aligned} -m (1 - \mu^2)^{m/2} T(\mu) + \mu^2 m^2 (1 - \mu^2)^{m/2-1} T(\mu) &= -2\mu(m+1) (1 - \mu^2)^{m/2} T'(\mu) \\ + (1 - \mu^2)^{m/2+1} T''(\mu) &= -\lambda (1 - \mu^2)^{m/2} T(\mu) + m^2 (1 - \mu^2)^{m/2-1} T(\mu) \\ \Leftrightarrow -mT(\mu) + \mu^2 m^2 (1 - \mu^2)^{-1} T(\mu) &= -2\mu(m+1) T'(\mu) + (1 - \mu^2) T''(\mu) \\ &= -\lambda T(\mu) + m^2 (1 - \mu^2)^{-1} T(\mu) \\ \Leftrightarrow (1 - \mu^2) T''(\mu) - 2\mu(m+1) T'(\mu) &= \left(-\lambda + m + m^2 \frac{1 - \mu^2}{1 - \mu^2} \right) T(\mu) \\ \Leftrightarrow (1 - \mu^2) T''(\mu) - 2\mu(m+1) T'(\mu) &= (-\lambda + m(m+1)) T(\mu). \end{aligned} \quad (\text{A.358})$$

Es wird wieder ein Potenzreihenansatz

$$T(\mu) = \sum_{i=0}^{\infty} a_i \mu^i \quad (\text{A.359})$$

gemacht. Man benötigt folgende Schreibweisen für die ersten beiden Ableitungen:

$$T'(\mu) = \sum_{i=1}^{\infty} i a_i \mu^{i-1} \quad (\text{A.360})$$

$$T''(\mu) = \sum_{i=0}^{\infty} (i+2)(i+1) a_{i+2} \mu^i \quad (\text{A.361})$$

$$T'''(\mu) = \sum_{i=2}^{\infty} i(i-1) a_i \mu^{i-2} \quad (\text{A.362})$$

Setzt man dies in Glg. (A.358) ein, erhält man wieder eine Rekursionsformel:

$$\begin{aligned} (i+2)(i+1) a_{i+2} - i(i-1) a_i - 2(m+1) i a_i &= (-\lambda + m(m+1)) a_i \\ \Leftrightarrow a_{i+2} = a_i \frac{-\lambda + (m+2i)(m+1) + i(i-1)}{(i+2)(i+1)} &= a_i \frac{-\lambda + (i+m+1)(i+m)}{(i+2)(i+1)} \end{aligned} \quad (\text{A.363})$$

Da dies für hohe i nicht gegen Null geht, muss dies irgendwo abbrechen. Es muss also ein $I \in \mathbb{N}$ geben mit

$$\lambda = (I+m+1)(I+m). \quad (\text{A.364})$$

λ ist als Produkt zweier ganzer Zahlen ebenfalls eine ganze Zahl, außerdem ist λ nicht negativ, da die beiden Faktoren keine unterschiedlichen Vorzeichen haben können. Es gibt also ein $l \in \mathbb{N}$ mit

$$\lambda = l(l+1). \quad (\text{A.365})$$

Damit ist

$$l = I + m. \quad (\text{A.366})$$

Da gilt $l, I \geq 0$, ist $m \leq l$. Da $m < -l$ auf die gleiche DGL führt wie $-m > l$ und hierfür keine Lösungen existieren, existieren auch keine Lösungen für $m < -l$. Man hat also

$$\lambda = l(l+1), \quad (\text{A.367})$$

$$l = 0, 1, 2, 3, \dots, \quad (\text{A.368})$$

$$m = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots, \pm l. \quad (\text{A.369})$$

Durch Vergleich mit Glg. (A.355) sieht man, dass $m + I = l$ auch der Grad von $P(\mu)$ ist. Die Lösungen $T = T_{l,m}$ sind also festgelegt durch zwei natürliche Zahlen l, m .

Nun soll noch eine geschlossene Form für die $T_{l,m}$ hergeleitet werden. Die $T_{l,m}$ erfüllen die DGL

$$\frac{d}{d\mu} (\mathbf{1} - \mu^2) T'_{l,m}(\mu) = 2\mu m T'_{l,m}(\mu) + (m(m+1) - \lambda) T_{l,m}(\mu). \quad (\text{A.370})$$

Für $m = 0$ sind die Lösungen die bekannten Legendre-Polynome $P_l(\mu)$ Glg. (A.322). Ist die Lösung $T_{l,m}(\mu)$ bekannt und ist $m < l$, so folgt die Lösung $T_{l,m+1}(\mu)$ durch

$$T_{l,m+1}(\mu) = \frac{d}{d\mu} T_{l,m}(\mu). \quad (\text{A.371})$$

Dies ist leicht gezeigt. Leite zunächst Glg. (A.370) ab:

$$\begin{aligned} & -2T'_{l,m}(\mu) - 4\mu T''_{l,m}(\mu) + (\mathbf{1} - \mu^2) T'''_{l,m}(\mu) = 2m T'_{l,m}(\mu) + 2\mu m T''_{l,m}(\mu) + (m(m+1) - \lambda) T'_{l,m}(\mu) \\ \Leftrightarrow & -2\mu T''_{l,m}(\mu) + (\mathbf{1} - \mu^2) T'''_{l,m}(\mu) \\ = & 2(\mathbf{1} + m) T'_{l,m}(\mu) + (m(m+1) - \lambda) T'_{l,m}(\mu) + 2\mu(\mathbf{1} + m) T''_{l,m}(\mu) \end{aligned} \quad (\text{A.372})$$

Setze nun für $T_{l,m+1} = T'_{l,m}$ ein. Es folgt:

$$\begin{aligned} & \frac{d}{d\mu} (\mathbf{1} - \mu^2) T'_{l,m+1}(\mu) = \frac{d}{d\mu} (\mathbf{1} - \mu^2) \frac{d}{d\mu} T'_{l,m}(\mu) \\ = & -2\mu T''_{l,m}(\mu) + (\mathbf{1} - \mu^2) T'''_{l,m}(\mu) = 2(\mathbf{1} + m) T'_{l,m}(\mu) + (m(m+1) - \lambda) T'_{l,m}(\mu) + 2\mu(\mathbf{1} + m) T''_{l,m}(\mu) \\ = & 2\mu(m+1) T'_{l,m+1}(\mu) + ((m+1)(m+2) - \lambda) T_{l,m+1}(\mu) \end{aligned} \quad (\text{A.373})$$

Die Lösung $T_{l,m}(\mu)$ ist also die m -te Ableitung des n -ten Legendre-Polynoms

$$T_{l,m}(\mu) = \frac{d^m}{d\mu^m} P_l(\mu). \quad (\text{A.374})$$

Die vollständigen Lösungen $P_{l,m}$ von Glg. (A.354) werden als *assoziierte Legendre-Funktion* bezeichnet:

$$P_{l,m}(x) = (-\mathbf{1})^m (\mathbf{1} - x^2)^{m/2} \frac{d^m}{dx^m} P_l(x) = \frac{(-)^m}{2^l l!} (\mathbf{1} - x^2)^{m/2} \frac{d^{l+m}}{dx^{l+m}} (x^2 - \mathbf{1})^l. \quad (\text{A.375})$$

Diese sind für ungerade m keine Polynome mehr und reduzieren sich für $m = 0$ auf die Legendre-Polynome Glg. (A.322). Es gilt

$$\begin{aligned} \frac{d}{dx} P_{l,m}(x) &= -mx(-\mathbf{1})^m (\mathbf{1} - x^2)^{\frac{m-2}{2}} \frac{d^m}{dx^m} P_l(x) + (-\mathbf{1})^m (\mathbf{1} - x^2)^{m/2} \frac{d^{m+1}}{dx^{m+1}} P_l(x) \\ &= -\frac{mx}{\mathbf{1} - x^2} P_{l,m}(x) - \frac{\mathbf{1}}{\sqrt{\mathbf{1} - x^2}} P_{l,m+1}(x). \end{aligned} \quad (\text{A.376})$$

Aus Glg. (A.396) folgt

$$\begin{aligned} \frac{d^n}{dx^n} (xf(x)) &= xf^{(n)} + nf^{(n-1)} \\ \Leftrightarrow xf^{(n)} &= \frac{d^n}{dx^n} (xf(x)) - nf^{(n-1)}. \end{aligned} \quad (\text{A.377})$$

Außerdem gilt mit Glg. (A.353)

$$P_l = \frac{2l+3}{l+1} x P_{l+1} - \frac{l+2}{l+1} P_{l+2}. \quad (\text{A.378})$$

Somit erhält man

$$\begin{aligned}
P_{l,m}(x) &= (-1)^m (1-x^2)^{m/2} \frac{d^m}{dx^m} P_l(x) = \frac{(-1)^m}{l+1} (1-x^2)^{m/2} \frac{d^m}{dx^m} [(2l+3)xP_{l+1}(x) - (l+2)P_{l+2}(x)], \\
&= x \frac{(-1)^m (2l+3)}{l+1} (1-x^2)^{m/2} \frac{d^m}{dx^m} P_{l+1}(x) + m \frac{(-1)^m (2l+3)}{l+1} (1-x^2)^{m/2} \frac{d^{m-1}}{dx^{m-1}} P_{l+1}(x) \\
&\quad - \frac{(-1)^m (l+2)}{l+1} (1-x^2)^{m/2} \frac{d^m}{dx^m} P_{l+2}(x) \\
&= \frac{2l+3}{l+1} xP_{l+1,m} - m \frac{2l+3}{l+1} \sqrt{1-x^2} P_{l+1,m-1} - \frac{l+2}{l+1} P_{l+2,m} \\
\Rightarrow xP_{l+1,m} &= \frac{l+1}{2l+3} P_{l,m} + m \sqrt{1-x^2} P_{l+1,m-1} + \frac{l+2}{2l+3} P_{l+2,m} \\
\Rightarrow xP_{l,m} &= \frac{l}{2l+1} P_{l-1,m} + m \sqrt{1-x^2} P_{l,m-1} + \frac{l+1}{2l+1} P_{l+1,m}.
\end{aligned} \tag{A.379}$$

Es gilt

$$P_{l,m-1}(x) = (-)^{m-1} \frac{1}{2^l l!} (1-x^2)^{\frac{m-1}{2}} \frac{d^{l+m-1}}{dx^{l+m-1}} (x^2 - 1)^l. \tag{A.380}$$

Weiterhin ist

$$\begin{aligned}
\frac{d^{l+m+1}}{dx^{l+m+1}} (x^2 - 1)^{l+1} &= \frac{d^{l+m}}{dx^{l+m}} 2(l+1)x(x^2 - 1)^l \\
&= \frac{d^{l+m-1}}{dx^{l+m-1}} \left[2(l+1)(x^2 - 1)^l + 4x^2 l(l+1)(x^2 - 1)^{l-1} \right] \\
&= \frac{d^{l+m-1}}{dx^{l+m-1}} \left[2(l+1)(x^2 - 1)^l + 4l(l+1)(x^2 - 1)^l + 4l(l+1)(x^2 - 1)^{l-1} \right] \\
&= 2(1+2l)(l+1) \frac{d^{l+m-1}}{dx^{l+m-1}} \left[(x^2 - 1)^l + 4l(l+1)(x^2 - 1)^{l-1} \right].
\end{aligned} \tag{A.381}$$

Es gilt also

$$\frac{d^{l+m-1}}{dx^{l+m-1}} (x^2 - 1)^l = \frac{1}{2(1+2l)(l+1)} \frac{d^{l+m+1}}{dx^{l+m+1}} (x^2 - 1)^{l+1} - \frac{2l}{(2l+1)} \frac{d^{l+m-1}}{dx^{l+m-1}} (x^2 - 1)^{l-1}. \tag{A.382}$$

Damit folgt

$$\begin{aligned}
(-)^{m-1} \frac{1}{2^l l!} (1-x^2)^{\frac{m-1}{2}} \frac{d^{l+m-1}}{dx^{l+m-1}} (x^2 - 1)^l &= (-)^{m-1} \frac{1}{2^{l+1} (l+1)!} (1-x^2)^{\frac{m-1}{2}} \frac{1}{(1+2l)} \frac{d^{l+m+1}}{dx^{l+m+1}} (x^2 - 1)^{l+1} \\
&\quad - \frac{1}{2l+1} (-)^{m-1} \frac{1}{2^{l-1} (l-1)!} (1-x^2)^{\frac{m-1}{2}} \frac{d^{l+m-1}}{dx^{l+m-1}} (x^2 - 1)^{l-1}.
\end{aligned} \tag{A.383}$$

Somit erhält man

$$\sqrt{1-x^2} P_{l,m-1} = -\frac{1}{2l+1} P_{l+1,m} + \frac{1}{2l+1} P_{l-1,m}. \tag{A.384}$$

Es folgt

$$xP_{l,m} = \frac{l+m}{2l+1} P_{l-1,m} + \frac{l+1-m}{2l+1} P_{l+1,m}. \tag{A.385}$$

Hiermit und mit Glg. (A.379) folgt

$$\begin{aligned} \frac{l+m}{2l+1} P_{l-1,m} + \frac{l+1-m}{2l+1} P_{l+1,m} &= \frac{l}{2l+1} P_{l-1,m} + m\sqrt{1-x^2} P_{l,m-1} + \frac{l+1}{2l+1} P_{l+1,m} \\ \Rightarrow \sqrt{1-x^2} P_{l,m-1} &= \frac{1}{2l+1} P_{l-1,m} - \frac{1}{2l+1} P_{l+1,m} \\ \Rightarrow \sqrt{1-x^2} P_{l,m} &= \frac{1}{2l+1} P_{l-1,m+1} - \frac{1}{2l+1} P_{l+1,m+1}. \end{aligned} \quad (\text{A.386})$$

Die Normierung der Legendre-Funktionen ergibt sich zu

$$\begin{aligned} \int_{-1}^1 P_{l,m}(x)^2 dx &= \frac{1}{2^{2l} l!^2} \int_{-1}^1 (1-x^2)^m \frac{d^{l+m}}{dx^{l+m}} (1-x^2)^l \frac{d^{l+m}}{dx^{l+m}} (1-x^2)^l dx \\ &\stackrel{m+l-\text{fache p.I.}}{=} \frac{1}{2^{2l} l!^2} (-1)^{m+l} (-1)^{m+l} (m+l)! \frac{(2l)!}{(l-m)!} \int_{-1}^1 (1-x^2)^l dx \\ &= \frac{1}{2^{2l} l!^2} \frac{(m+l)!}{(l-m)!} (2l)! \int_{-1}^1 (1+x)^l (1-x)^l dx \\ &\stackrel{l-\text{fache p.I.}}{=} \frac{1}{2^{2l} l!^2} \frac{(m+l)!}{(l-m)!} (2l)! \frac{l!}{(2l)!} l! \int_{-1}^1 (1+x)^{2l} dx \\ &= \frac{1}{2^{2l}} \frac{(m+l)!}{(l-m)!} \frac{2^{2l+1}}{2l+1} = \frac{2}{2l+1} \frac{(l+m)!}{(l-m)!}. \end{aligned} \quad (\text{A.387})$$

Des Weiteren gilt für $l \neq l'$ (o. B. d. A. kann man $l < l'$ annehmen):

$$\int_{-1}^1 P_{l,m}(x) P_{l',m}(x) dx \propto \int_{-1}^1 (1-x^2)^m \frac{d^{l+m}}{dx^{l+m}} (1-x^2)^l \frac{d^{l'+m}}{dx^{l'+m}} (1-x^2)^{l'} dx. \quad (\text{A.388})$$

Dies erhält man durch $m+l$ -fache partielle Integration, bei der $(1-x^2)^m \frac{d^{l+m}}{dx^{l+m}}$ abgeleitet und $\frac{d^{l'+m}}{dx^{l'+m}} (1-x^2)^{l'}$ integriert wird

$$\int_{-1}^1 P_{l,m}(x) P_{l',m}(x) dx \propto \int_{-1}^1 \frac{d^{l'-l}}{dx^{l'-l}} (1-x^2)^{l'} dx = 0. \quad (\text{A.389})$$

Dabei entfällt bei jedem Integrationsschritt der Term ohne Integral, da dieser an den Rändern ± 1 ausgewertet wird und dort immer Terme $\propto (1-x^2)$ als Faktoren auftreten. Es gilt also

$$\int_{-1}^1 P_{l,m}(x) P_{l',m}(x) dx = \frac{2}{2l+1} \frac{(l+m)!}{(l-m)!} \delta_{l,l'}. \quad (\text{A.390})$$

A.14.2 Hermite-Polynome

Die *Hermite-Polynome* werden definiert durch ihre Rodrigues-Formel

$$H_n(x) := (-)^n e^{x^2} \frac{d^n}{dx^n} e^{-x^2}. \quad (\text{A.391})$$

Setzt man in Glg. (2.265) $\tilde{E} - 1 = 2n$ ein, erhält man die *Hermite'sche Differenzialgleichung*

$$P_n'' - 2xP' + 2nP = 0. \quad (\text{A.392})$$

Nun soll gezeigt werden, dass die Hermite-Polynome nach Glg. (A.391) diese DGL lösen und somit auch die Rekursionsformel Glg. (2.273) erfüllen. Es gelten ja

$$\frac{dH_n}{dx}(x) = (-)^n e^{x^2} \left[2x \frac{d^n}{dx^n} e^{-x^2} + \frac{d^{n+1}}{dx^{n+1}} e^{-x^2} \right], \quad (\text{A.393})$$

$$\frac{d^2H_n}{dx^2}(x) = (-)^n e^{x^2} \left[4x^2 \frac{d^n}{dx^n} e^{-x^2} + 4x \frac{d^{n+1}}{dx^{n+1}} e^{-x^2} + \frac{d^{n+2}}{dx^{n+2}} e^{-x^2} + 2 \frac{d^n}{dx^n} e^{-x^2} \right]. \quad (\text{A.394})$$

Setzt man all dies in die linke Seite der Hermite'schen DGL ein, erhält man

$$\begin{aligned} \left(\frac{d^n}{dx^n} e^{-x^2} \right) [2 + 2n] + \left(\frac{d^{n+1}}{dx^{n+1}} e^{-x^2} \right) [-2x + 4x] + \left(\frac{d^{n+2}}{dx^{n+2}} e^{-x^2} \right) &= 0 \\ \Leftrightarrow \left[2(1+n) \frac{d^n}{dx^n} + 2x \frac{d^{n+1}}{dx^{n+1}} + \frac{d^{n+2}}{dx^{n+2}} \right] \exp(-x^2) &= 0. \end{aligned} \quad (\text{A.395})$$

Dies ist für $n = 0$ wahr. Durch Differenzieren der Gleichung nach x erhält man die gleiche Aussage für $n + 1$. Die Hermite-Polynome lösen somit die Hermite'sche Differenzialgleichung, man kann $P_n(x) = H_n(x)$ setzen. Weiterhin macht man sich klar, dass gilt

$$\begin{aligned} \frac{d^n}{dx^n} (f(x)g(x)) &= \frac{d^{n-1}}{dx^{n-1}} [f'g + fg'] = \frac{d^{n-2}}{dx^{n-2}} [f''g + 2f'g' + fg''] \\ &= \sum_{k=0}^n \binom{n}{k} f^{(k)} g^{(n-k)} \end{aligned} \quad (\text{A.396})$$

für $n \in \mathbb{N}$ und $f, g : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$, n -fach differenzierbar. Formal kann man dies über eine vollständige Induktion zeigen. Für $n = 0$ ist die Aussage richtig. Die Aussage gelte für ein $n \in \mathbb{N}$. Dann gilt

$$\begin{aligned} \frac{d^{n+1}}{dx^{n+1}} (fg) &= \frac{d}{dx} \left(\frac{d^n}{dx^n} (fg) \right) = \frac{d}{dx} \sum_{k=0}^n \binom{n}{k} f^{(k)} g^{(n-k)} \\ &= \sum_{k=0}^n \binom{n}{k} \left[f^{(k+1)} g^{(n-k)} + f^{(k)} g^{(n+1-k)} \right], \end{aligned} \quad (\text{A.397})$$

der Rest folgt analog zum Beweis des binomischen Lehrsatzes Glg. (A.16). Dies kann man verwenden, um

$$\begin{aligned} H'_n(x) &= 2x(-)^n e^{x^2} \frac{d^n}{dx^n} e^{-x^2} + (-)^n e^{x^2} \frac{d^{n+1}}{dx^{n+1}} e^{-x^2} \\ &= 2x(-)^n e^{x^2} \frac{d^n}{dx^n} e^{-x^2} + (-)^n e^{x^2} \frac{d^n}{dx^n} \left(-2xe^{-x^2} \right) \end{aligned} \quad (\text{A.398})$$

zu vereinfachen. Im zweiten Summanden setze in Termen von Glg. (A.396) $f = -2x$ und $g = e^{-x^2}$, dann spielen in der Summe nur die Terme mit $k = 0$ und $k = 1$ eine Rolle, also

$$\frac{d^n}{dx^n} \left(-2xe^{-x^2} \right) = -2x \frac{d^n}{dx^n} e^{-x^2} - 2n \frac{d^{n-1}}{dx^{n-1}} e^{-x^2}. \quad (\text{A.399})$$

Es gilt somit

$$H'_n(x) = 2nH_{n-1}(x). \quad (\text{A.400})$$

Damit ist unmittelbar klar, dass gilt

$$H'_n = 2xH_n - H_{n+1} \Leftrightarrow nH_{n-1} + \frac{H_{n+1}}{2} = xH_n. \quad (\text{A.401})$$

Der Koeffizient C_n vor der höchsten Potenz ist $C_n = 2^n$, wie man leicht einsehen kann. Für die Normierung der Hermite-Polynome gilt

$$\int_{-\infty}^{\infty} H_n^2(x) e^{-x^2} dx = \sqrt{\pi} 2^n n!. \quad (\text{A.402})$$

Um dies zu zeigen, mache man sich zunächst klar, dass gilt

$$\int_{-\infty}^{\infty} H_n(x) H_m(x) e^{-x^2} dx = 0, \quad (\text{A.403})$$

für $n \neq m$, da in diesem Fall $H_n(x) \exp\left(-\frac{x^2}{2}\right)$ und $H_m(x) \exp\left(-\frac{x^2}{2}\right)$ zwei Eigenfunktionen eines Hermite'schen Operators zu unterschiedlichen Eigenwerten sind, und daher orthogonal.

Nun kann man die Aussage über vollständige Induktion zeigen. Für $n = 0$ ist $H_n = 1$, also gilt

$$\int_{-\infty}^{\infty} H_0^2(x) e^{-x^2} dx = \sqrt{\pi}. \quad (\text{A.404})$$

Für $n = 1$ ist $H_1(x) = -2x$, also gilt

$$\int_{-\infty}^{\infty} H_1^2 e^{-x^2} dx = 4 \int_{-\infty}^{\infty} x^2 e^{-x^2} dx = 2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2} dx = 2\sqrt{\pi}. \quad (\text{A.405})$$

Für $n = 0$ und $n = 1$ stimmt die Aussage also. Nun gelte die Aussage für ein n bereits und auch für $n - 1$. Dann folgt mit den Glg.en (A.400) und (A.401) auch

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} H_{n+1}^2 e^{-x^2} dx &= 4 \int_{-\infty}^{\infty} [x^2 H_n^2 + n^2 H_{n-1}^2 - 2xnH_{n-1}H_n] e^{-x^2} dx \\ &= 4n^2 \sqrt{\pi} 2^{n-1} (n-1)! + 4 \int_{-\infty}^{\infty} x^2 H_n^2 e^{-x^2} dx - 4n \int_{-\infty}^{\infty} [H'_{n-1}H_n + H_{n-1}H'_n] e^{-x^2} dx \\ &= 2n\sqrt{\pi} 2^n n! + 2 \int_{-\infty}^{\infty} [2xH'_nH_n + H_n^2] e^{-x^2} dx - 8n^2 \sqrt{\pi} 2^{n-1} (n-1)! \\ &= (2n - 4n) \sqrt{\pi} 2^n n! + 2 \int_{-\infty}^{\infty} H_n^2 e^{-x^2} dx + 2\sqrt{\pi} 2^n n! \\ &= \sqrt{\pi} 2^n n! (2n) + 2\sqrt{\pi} 2^n n! = \sqrt{\pi} 2^{n+1} (n+1)!. \end{aligned} \quad (\text{A.406})$$

Also gilt die Aussage auch für $n + 1$ und somit für alle $n \in \mathbb{N}$.

A.14.3 Laguerre-Polynome

Die Laguerre'sche Differenzialgleichung lautet

$$xP'' + (k+1-x)P' + nP = 0 \quad (\text{A.407})$$

für $k \in \mathbb{N}$. Es wird für $P(x)$ ein Potenzreihenansatz gemacht,

$$P(x) = \sum_{i=0}^{\infty} a_i x^i. \quad (\text{A.408})$$

Damit folgen

$$P'(x) = \sum_{i=0}^{\infty} i a_i x^{i-1} = \sum_{i=0}^{\infty} (i+1) a_{i+1} x^i, \quad (\text{A.409})$$

$$P''(x) = \sum_{i=0}^{\infty} i(i+1) a_{i+1} x^{i-1}. \quad (\text{A.410})$$

Setzt man dies ein, erhält man

$$i(i+1)a_{i+1} + (k+1)(i+1)a_{i+1} - ia_i + na_i = 0 \Leftrightarrow a_{i+1} = a_i \frac{i-n}{(i+1)(i+k+1)}. \quad (\text{A.411})$$

Der Faktor $\frac{i-n}{(i+1)(i+k+1)}$ geht für hohe i wie $1/i$ gegen Null, die Rekursion muss folglich abbrechen. Also muss $n \in \mathbb{N}$ sein. n ist der Grad des Polynoms P . Die Polynome

$$L_{n,k}(x) := \sum_{i=0}^n \binom{n+k}{n-i} \frac{(-)^{(i)}}{i!} x^{(i)}. \quad (\text{A.412})$$

lösen Glg. (A.407) ebenfalls, um dies zu zeigen, überprüft man ihre Rekursionsbeziehung. Zunächst sind sie Polynome vom Grad n . Der Koeffizient vor der höchsten Potenz von x ist $\frac{(-)^n}{n!}$, dies impliziert eine Normierung.

Es gilt

$$\begin{aligned} a_i &= \frac{(n+k)!}{(n-i)!(k+i)!i!} (-)^{(i)} \\ \Leftrightarrow \frac{a_{i+1}}{a_i} &= -\frac{(n-i)!(k+i)!i!}{(n-i-1)!(k+i+1)!(i+1)!} = \frac{i-n}{(k+1+i)(i+1)}. \end{aligned} \quad (\text{A.413})$$

Daher kann man Glg. (A.412) als Definition der Laguerre-Polynome ansehen. All dies kann man mit

$$n \rightarrow n_r, \quad (\text{A.414})$$

$$k \rightarrow 2l+1 \quad (\text{A.415})$$

umschreiben zu

$$L_{n_r, 2l+1}(x) := \sum_{i=0}^{n_r} \binom{n_r + 2l + 1}{n_r - i} \frac{(-)^{(i)}}{i!} x^{(i)} \quad (\text{A.416})$$

und

$$xL''_{n_r, 2l+1} + (2l+2-x)L'_{n_r, 2l+1} + n_r L_{n_r, 2l+1} = 0. \quad (\text{A.417})$$

Dies ist die in Absch. 2.3.8 verwandte Formulierung. Die Rodrigues-Formel der Laguerre-Polynome lautet

$$P_{n,k}(x) = \frac{e^x}{n!x^n} \frac{d^n}{dx^n} [e^{-x} x^{n+k}]. \quad (\text{A.418})$$

Dass dies Polynome vom Grad n sind, sieht man sofort. Der Koeffizient vor x^n ist $\frac{(-)^n}{n!}$. Für $l \in \mathbb{N}$ mit $l \leq n$ gilt

$$\frac{d^l}{dx^l} x^{n+k} = \frac{(n+k)!}{(n+k-l)!} x^{n+k-l} \quad (\text{A.419})$$

Daraus folgt

$$\frac{d^n}{dx^n} [e^{-x} x^{n+k}] = \sum_{i=0}^n (-)^i e^{-x} \binom{n}{i} \frac{(n+k)!}{(k+i)!} x^{k+i} = \sum_{i=0}^n (-)^i e^{-x} \frac{n!}{i!(n-i)!} \frac{(n+k)!}{(k+i)!} x^{k+i}. \quad (\text{A.420})$$

Damit erhält man

$$P_{n,k}(x) = \sum_{i=0}^n (-)^i \frac{1}{i!(n-i)!} \frac{(n+k)!}{(k+i)!} x^i = \sum_{i=0}^n \binom{n+k}{n-i} \frac{(-)^{(i)}}{i!} x^{(i)}. \quad (\text{A.421})$$

Die Rodrigues-Formel entspricht also der expliziten Darstellung Glg. (A.412). Die Laguerre-Polynome erfüllen die Integraleigenschaft

$$\int_0^\infty x^{k+1} e^{-x} L_{n,k}(x)^2 dx = \frac{(n+k)!}{n!} (2n+k+1). \quad (\text{A.422})$$

Hierzu rechnet man

$$\begin{aligned} \int_0^\infty x^{k+1} e^{-x} L_{n,k}(x)^2 dx &= \int_0^\infty x^{k+1} e^{-x} L_{n,k}(x) \frac{e^x}{n!x^n} \frac{d^n}{dx^n} [e^{-x} x^{n+k}] dx \\ &= \frac{1}{n!} \int_0^\infty x L_{n,k}(x) \frac{d^n}{dx^n} [e^{-x} x^{n+k}] dx = \frac{1}{n!} (-1)^n \int_0^\infty e^{-x} x^{n+k} \frac{d^n}{dx^n} x L_{n,k}(x) dx. \end{aligned} \quad (\text{A.423})$$

Nach der expliziten Darstellung Glg. (A.412) gilt

$$\begin{aligned} \frac{d^n}{dx^n} x L_{n,k}(x) &= (-)^n (n+1)x + n! \frac{(-)^{n-1}}{(n-1)!} \frac{(n+k)!}{(n+k-1)!} \\ &= (-)^n (n+1)x + n(-)^{n-1} (n+k). \end{aligned} \quad (\text{A.424})$$

Mit Glg. (A.104) folgt

$$\begin{aligned}\int_0^\infty \dots dx &= \frac{(-)^n}{n!} [(-)^n (n+1)(n+k+1)! - n (-)^n (n+k)(n+k)!] \\ &= \frac{(n+k)!}{n!} [(n+1)(n+k+1) - n(n+k)] = \frac{(n+k)!}{n!} (2n+k+1).\end{aligned}\quad (\text{A.425})$$

Weiter gilt für $k \geq 2$

$$\int_0^\infty x^{k-2} [L_{n,k}(x)]^2 \exp(-x) dx = \frac{(n+k)!}{n!} \frac{2n+k+1}{(k-1)k(k+1)}. \quad (\text{A.426})$$

Hierzu rechnet man mit

$$\begin{aligned}\int_0^\infty x^{k-2} e^{-x} L_{n,k}(x)^2 dx &= \int_0^\infty x^{k-2} e^{-x} L_{n,k}(x) \frac{e^x}{n!x^k} \frac{d^n}{dx^n} [e^{-x} x^{n+k}] dx \\ &= \frac{1}{n!} \int_0^\infty \frac{1}{x^2} L_{n,k}(x) \frac{d^n}{dx^n} [e^{-x} x^{n+k}] dx = \frac{1}{n!} (-1)^n \int_0^\infty e^{-x} x^{n+k} \frac{d^n}{dx^n} \left[\frac{1}{x^2} L_{n,k}(x) \right] dx.\end{aligned}\quad (\text{A.427})$$

$L_{n,k}$ ist ein Polynom vom Grad n , also ist $L_{n,k}/x^2$ vom Grad $n-2$. Schreibe

$$L_{n,k} = a + bx + \mathcal{O}(x^2), \quad (\text{A.428})$$

dementsprechend gilt

$$\frac{d}{dx^n} \frac{L_{n,k}}{x^2} = \frac{d}{dx^n} \left(\frac{a}{x^2} + \frac{b}{x} \right) = (-)^n (a(n+1)!x^{-2-n} + n!bx^{-n-1}). \quad (\text{A.429})$$

Nach der expliziten Darstellung Glg. (A.412) gelten

$$a = \frac{(n+k)!}{n!k!}, \quad (\text{A.430})$$

$$b = -\frac{(n+k)!}{(n-1)!(k+1)!}. \quad (\text{A.431})$$

Somit folgt

$$\begin{aligned}\frac{d}{dx^n} \frac{L_{n,k}}{x^2} &= (-)^n \left(\frac{(n+k)!}{n!k!} (n+1)!x^{-2-n} - \frac{(n+k)!}{(n-1)!(k+1)!} n!x^{-n-1} \right) \\ &= (-)^n (n+k)! \left[\frac{(n+1)}{k!} x^{-2-n} - \frac{n}{(k+1)!} x^{-n-1} \right].\end{aligned}\quad (\text{A.432})$$

Hiermit erhält man

$$e^{-x} x^{n+k} \frac{d}{dx^n} \frac{L_{n,k}}{x^2} = e^{-x} (-)^n (n+k)! \left[\frac{(n+1)}{k!} x^{k-2} - \frac{n}{(k+1)!} x^{k-1} \right]. \quad (\text{A.433})$$

Mit Glg. (A.104) folgt

$$\begin{aligned}\int_0^\infty \dots dx &= \frac{(n+k)!}{n!} \left[\frac{(n+1)}{k(k-1)} - \frac{n}{k(k+1)} \right] \\ &= \frac{(n+k)!}{n!} \left[\frac{(n+1)(k+1)}{k(k-1)(k+1)} - \frac{n(k-1)}{k(k+1)(k-1)} \right] \\ &= \frac{(n+k)!}{n!} \frac{2n+k+1}{k(k+1)(k-1)}.\end{aligned}\quad (\text{A.434})$$

A.14.4 Kugelflächenfunktionen

Die Abhängigkeiten der Lösung Glg. (??) von $\cos(\theta)$ und φ fasst man zu $P_{l,m}(\cos(\theta)) \exp(im\varphi)$ zusammen. Die *Kugelflächenfunktionen* (engl. *spherical harmonics*) werden definiert durch

$$Y_{l,m}(\theta, \varphi) = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi} \frac{(l-m)!}{(l+m)!}} P_{l,m}(\cos(\theta)) \exp(im\varphi). \quad (\text{A.435})$$

mit den assoziierten Legendre-Funktionen $P_{l,m}(x)$, Glg. (A.375). Die Vorfaktoren ergeben sich aus der Normierung

$$\int_{\theta=0}^{\pi} \int_{\varphi=0}^{2\pi} |Y_{l,m}(\theta, \varphi)|^2 \sin(\theta) d\varphi d\theta \stackrel{!}{=} 1, \quad (\text{A.436})$$

die nun verifiziert wird:

$$\begin{aligned} & \frac{2l+1}{4\pi} \frac{(l-m)!}{(l+m)!} \int_{\theta=0}^{\pi} \int_{\varphi=0}^{2\pi} (P_{l,m}(\cos(\theta)))^2 \sin(\theta) d\varphi d\theta \\ &= \frac{2l+1}{2} \frac{(l-m)!}{(l+m)!} \int_{-1}^1 P_{l,m}(z)^2 dz = 1 \end{aligned} \quad (\text{A.437})$$

Weiterhin sind die Kugelflächenfunktionen orthogonal. Für $m \neq m'$ gilt nämlich

$$\begin{aligned} & \int_{\theta=0}^{\pi} \int_{\varphi=0}^{2\pi} Y_{l,m}(\theta, \varphi)^* Y_{l',m'}(\theta, \varphi) \sin(\theta) d\varphi d\theta \\ & \propto \int_{\theta=0}^{\pi} \int_{\varphi=0}^{2\pi} \exp(i(m-m')\varphi) d\varphi P_{l,m}^*(\cos(\theta)) P_{l',m'}(\cos(\theta)) \sin(\theta) d\theta = 0. \end{aligned} \quad (\text{A.438})$$

Für $l \neq l'$ erhält man

$$\int_{\theta=0}^{\pi} \int_{\varphi=0}^{2\pi} Y_{l,m}(\theta, \varphi)^* Y_{l',m}(\theta, \varphi) \sin(\theta) d\varphi d\theta = 2\pi \int_{-1}^1 P_{l,m}(z) P_{l',m}(z) dz \stackrel{(\text{A.389})}{=} 0. \quad (\text{A.439})$$

Zusammenfassend erhält man

$$\int_{\theta=0}^{\pi} \int_{\varphi=0}^{2\pi} Y_{l,m}(\theta, \varphi)^* Y_{l',m'}(\theta, \varphi) \sin(\theta) d\varphi d\theta = \delta_{l,l'} \delta_{m,m'}. \quad (\text{A.440})$$

Weiterhin gilt

$$\Delta_{\theta,\varphi} Y_{l,m}(\theta, \varphi) = -l(l+1) Y_{l,m}(\theta, \varphi) \quad (\text{A.441})$$

mit

$$\Delta_{\theta,\varphi} = \Delta_{\mu,\varphi} = \frac{\partial}{\partial \mu} (1 - \mu^2) \frac{\partial}{\partial \mu} + \frac{1}{1 - \mu^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2}, \quad (\text{A.442})$$

als Winkelanteil des Laplace-Operators und $\mu = \cos(\theta)$. Es gilt

$$\frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} Y_{l,m} = -m^2 Y_{l,m}(\theta, \varphi), \quad (\text{A.443})$$

somit ist hier

$$\Delta_{\mu,\varphi} = \frac{\partial}{\partial \mu} (1 - \mu^2) \frac{\partial}{\partial \mu} - \frac{m^2}{1 - \mu^2}. \quad (\text{A.444})$$

Für die assoziierten Legendre-Polynome $P_{l,m}(\mu)$ gilt die DGL (A.354)

$$\frac{d}{d\mu} (1 - \mu^2) P'_{l,m}(\mu) - \frac{m^2}{1 - \mu^2} P_{l,m}(\mu) = -l(l+1) P_{l,m}(\mu). \quad (\text{A.445})$$

Somit folgt

$$\Delta_{\theta,\varphi} Y_{l,m}(\theta, \varphi) = -l(l+1) Y_{l,m}(\theta, \varphi). \quad (\text{A.446})$$

Aus Glg. (A.376) folgt

$$\frac{\partial}{\partial \theta} Y_{l,m}(\theta, \varphi) = m \cot(\theta) Y_{l,m}(\cos(\theta)) + \sqrt{l^2 - m^2 + l - m} Y_{l,m+1}(\cos(\theta)) \exp(-i\varphi). \quad (\text{A.447})$$

Weiterhin gilt

$$\frac{\partial}{\partial \varphi} Y_{l,m}(\theta, \varphi) = i m Y_{l,m}(\theta, \varphi). \quad (\text{A.448})$$

Damit folgt

$$\begin{aligned} & \exp(\pm i\varphi) \left(i \cot(\theta) \frac{\partial}{\partial \varphi} \pm \frac{\partial}{\partial \theta} \right) Y_{l,m}(\theta, \varphi) = -m \cot(\theta) \exp(\pm i\varphi) Y_{l,m}(\theta, \varphi) \\ & \pm \exp(\pm i\varphi) m \cot(\theta) Y_{l,m}(\cos(\theta)) \pm \sqrt{l^2 - m^2 + l - m} \exp(\pm i\varphi) Y_{l,m+1}(\theta, \varphi) \exp(-i\varphi) \end{aligned}$$

Es gilt also

$$\hat{L}_+ Y_{l,m}(\theta, \varphi) = \sqrt{l^2 - m^2 + l - m} Y_{l,m+1}(\theta, \varphi). \quad (\text{A.449})$$

Somit folgt für die Eigenzustände $|n, l, m\rangle$ im Wasserstoffatom

$$\hat{L}_+ |n, l, m\rangle = \sqrt{l^2 - m^2 + l - m} |n, l, m\rangle. \quad (\text{A.450})$$

Aus Glg. (A.385) folgt

$$\begin{aligned} \cos(\theta) Y_{l,m} &= \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi} \frac{(l-m)!}{(l+m)!}} \cos(\theta) P_{l,m}(\cos(\theta)) \exp(im\varphi) \\ &= \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi} \frac{(l-m)!}{(l+m)!}} \left[\frac{l+m}{2l+1} P_{l-1,m} + \frac{l-m+1}{2l+1} P_{l+1,m} \right] \exp(im\varphi) \\ &= \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi} \frac{(l-m)!}{(l+m)!}} \frac{l+m}{2l+1} P_{l-1,m} \exp(im\varphi) + \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi} \frac{(l-m)!}{(l+m)!}} \frac{l-m+1}{2l+1} P_{l+1,m} \exp(im\varphi) \\ &= \frac{l+m}{2l+1} \sqrt{\frac{2l+1}{2l-1} \frac{l-m}{l+m}} \sqrt{\frac{2l-1}{4\pi} \frac{(l-1-m)!}{(l-1+m)!}} P_{l-1,m} \exp(im\varphi) \\ &\quad + \frac{l-m+1}{2l+1} \sqrt{\frac{2l+1}{2l+3} \frac{l+1+m}{l+1-m}} \sqrt{\frac{2l+3}{4\pi} \frac{(l+1-m)!}{(l+1+m)!}} P_{l+1,m} \exp(im\varphi) \\ &= \frac{l+m}{2l+1} \sqrt{\frac{2l+1}{2l-1} \frac{l-m}{l+m}} Y_{l-1,m} + \frac{l-m+1}{2l+1} \sqrt{\frac{2l+3}{2l+1} \frac{l+1+m}{l+1-m}} Y_{l+1,m} \\ &= \sqrt{\frac{l^2 - m^2}{4l^2 - 1}} Y_{l-1,m} + \sqrt{\frac{(l+1)^2 - m^2}{4(l+1)^2 - 1}} Y_{l+1,m}. \end{aligned} \quad (\text{A.451})$$

Aus Glg. (A.386) folgt

$$\begin{aligned}
\sin(\theta) Y_{l,m} &= \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi} \frac{(l-m)!}{(l+m)!}} \sin(\theta) P_{l,m}(\cos(\theta)) \exp(im\varphi) \\
&= \frac{1}{2l+1} \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi} \frac{(l-m)!}{(l+m)!}} [P_{l-1,m+1}(\cos(\theta)) - P_{l+1,m+1}(\cos(\theta))] \exp(im\varphi) \\
&= \frac{1}{2l+1} \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi} \frac{(l-m)!}{(l+m)!}} P_{l-1,m+1}(\cos(\theta)) \exp(im\varphi) \\
&\quad - \frac{1}{2l+1} \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi} \frac{(l-m)!}{(l+m)!}} P_{l+1,m+1}(\cos(\theta)) \exp(im\varphi) \\
&= \frac{1}{2l+1} \sqrt{\frac{2l+1}{2l-1} (l-m-1)(l-m)} \sqrt{\frac{2l-1}{4\pi} \frac{(l-m-2)!}{(l+m)!}} P_{l-1,m+1}(\cos(\theta)) \exp(im\varphi) \\
&\quad - \frac{1}{2l+1} \sqrt{\frac{2l+1}{2l+3} (l+m+1)(l+m+2)} \sqrt{\frac{2l+3}{4\pi} \frac{(l-m)!}{(l+m+2)!}} P_{l+1,m+1}(\cos(\theta)) \exp(im\varphi) \\
&= \sqrt{\frac{1}{4l^2-1} (l-m-1)(l-m)} e^{-i\varphi} Y_{l-1,m+1} \\
&\quad - \sqrt{\frac{1}{4l^2+8l+3} (l+m+1)(l+m+2)} e^{-i\varphi} Y_{l+1,m+1}. \tag{A.452}
\end{aligned}$$

A.14.5 Komplexe Exponentialfunktionen

Die Entwicklung einer Funktion nach komplexen Exponentialfunktionen bezeichnet man als *Fourier-Transformation* (FT). Sei $f(x)$ eine komplexe Funktion einer reellen Variablen, dann definiert man die *Fourier-Transformierte* $\tilde{F}_i\{f\} = \tilde{f}(k)$ oder auch das *Spektrum* von f durch

$$\tilde{F}_i\{f\} = \tilde{f}(k) := C_i \int_{-\infty}^{\infty} \exp(-ikx) f(x) dx \tag{A.453}$$

mit einer reellen Konstante $C_i > 0$. \tilde{F}_i bezeichnet den Operator der eindimensionalen Fourier-Transformation. Glg. (A.453) ist bis auf einen eventuellen Faktor die Kovarianz der Funktion f mit der *Fourier-Komponente* e^{ikx} . Die *inverse Fourier-Transformation* wird definiert durch

$$\tilde{F}_i^{-1}\{f\} := \tilde{C}_i \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{f}(k) \exp(ikx) dk \tag{A.454}$$

mit einer zweiten Konstanten $\tilde{C}_i > 0$. Es handelt sich um eine Linearkombination der $\tilde{f}(k)$ mit den entsprechenden Wellen. Dass dies tatsächlich das Inverse von Glg. (A.453) ist, soll nun eingesehen werden:

$$\begin{aligned}
\tilde{C}_i \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{f}(k) \exp(ikx) dk &= \tilde{C}_i C_i \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \exp(-ikx') f(x') dx' \exp(ikx) dk \\
&= \tilde{C}_i C_i \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \exp(ik(x-x')) dk f(x') dx' \\
&\stackrel{\text{Glg. (A.97)}}{=} \tilde{C}_i C_i \int_{-\infty}^{\infty} 2\pi \delta(x-x') f(x') dx' = \tilde{C}_i C_i 2\pi f(x) \tag{A.455}
\end{aligned}$$

$$\Leftrightarrow \tilde{C}_i C_i = 1/2\pi \quad f(x) \tag{A.456}$$

Man muss also auf die Bedingung

$$\tilde{C}_i = \frac{1}{2\pi C_i} \tag{A.457}$$

achten. Hieraus kann man unmittelbar

$$\left[\tilde{F}_i \{ \delta(x - x_0) \} \right] (k) = C_i e^{-ikx_0}, \quad (\text{A.458})$$

$$\left[\tilde{F}_i \{ e^{ik'x} \} \right] (k) = 2\pi C_i \delta(k' - k), \quad (\text{A.459})$$

$$\left[\tilde{F}_i^{-1} \{ \delta(k - k_0) \} \right] (x) = \tilde{C}_i e^{ik_0 x}, \quad (\text{A.460})$$

$$\left[\tilde{F}_i^{-1} \{ e^{ikx'} \} \right] (x) = 2\pi \tilde{C}_i \delta(x' + x) \quad (\text{A.461})$$

ableiten. Die Funktion

$$\arg(\tilde{f}(k)) \quad (\text{A.462})$$

bezeichnet man als das *Phasenspektrum* von f , während man

$$|\tilde{f}(k)| \quad (\text{A.463})$$

als *Amplitudenspektrum* bezeichnet. Das Quadrat von $|\tilde{f}(k)|$ nennt man *Leistungsspektrum* oder *Powerspektrum*. Die FT ist linear, da sie in Termen eines Integrals definiert ist und die Integration linear ist. Für Funktionen f, g und Konstanten a, b gilt also

$$\tilde{F}\{af + bg\} = a\tilde{F}\{f\} + b\tilde{F}\{g\}. \quad (\text{A.464})$$

Sei $N(\mu, \sigma)$ die Normalverteilung mit Erwartungswert μ und Standardabweichung σ . Dann gilt

$$\begin{aligned} \tilde{F}\{N(\mu, \sigma)\} &= \frac{C_i}{\sqrt{2\pi}\sigma} \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left[-ikx - \frac{(x - \mu)^2}{2\sigma^2}\right] dx = \frac{C_i}{\sqrt{2\pi}\sigma} \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left[-\frac{i}{2\sigma^2}(x^2 + \mu^2 - 2x(\mu - ik\sigma^2))\right] dx \\ &= \frac{C_i}{\sqrt{2\pi}\sigma} \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left[-\frac{i}{2\sigma^2}(x - (\mu - ik\sigma^2))^2 - \frac{i}{2\sigma^2}(k^2\sigma^4 + 2\mu i\sigma^2 k)\right] dx \\ &= \exp\left[-\frac{i}{2\sigma^2}(k^2\sigma^4 + 2\mu i\sigma^2 k)\right] \frac{C_i}{\sqrt{2\pi}\sigma} \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left[-\frac{i}{2\sigma^2}x^2\right] dx \\ &= C_i \exp\left(-\frac{k^2}{2/\sigma^2}\right) \exp(-\mu ik). \end{aligned} \quad (\text{A.465})$$

Die FT einer Normalverteilung ist also eine unnormierte (man betrachte den Fall $C_i = 1/\sqrt{2\pi}$) und um einen komplexen Phasenfaktor modifizierte Normalverteilung mit Mittelwert

$$\mu_k = \mu \quad (\text{A.466})$$

und Standardabweichung

$$\sigma_k = \frac{\sigma}{\sigma} \quad (\text{A.467})$$

Die FT macht also aus einer schmalen Normalverteilung eine breite. Im Fall einer komplexwertigen Funktion $f(x, y)$ zweier reeller Variablen betrachtet man zunächst die Hilfsfunktion

$$f_y(x) := f(x, y). \quad (\text{A.468})$$

Die FT hiervon ist

$$\tilde{f}_y(k_x) = C_i \int_{-\infty}^{\infty} e^{-ik_x x} f_y(x) dx. \quad (\text{A.469})$$

Wendet man hierauf die inverse FT an, erhält man wieder $\tilde{f}_y(x) = f(x, y)$. Definiere nun die Fourier-Transformierte $\tilde{f}(k_x, k_y)$ der Funktion $f(x, y)$ durch die in y-Richtung Fourier-Transformierte von $\tilde{f}_y(k_x)$, also

$$\begin{aligned}\tilde{f}(k_x, k_y) &:= C_1 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-ik_y y} \tilde{f}_y(k_x) dy = C_1 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-ik_y y} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-ik_x x} f(x, y) dx dy \\ &= C_1 \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-i(k_x x + k_y y)} f(x, y) dx dy.\end{aligned}\quad (\text{A.470})$$

Zweimaliges Anwenden der inversen FT liefert die Funktion $f(x, y)$. x ist in der Herleitung nicht vor y ausgezeichnet, weshalb die Reihenfolge der Anwendung der FT keine Rolle spielt. Man notiert

$$\tilde{F}_2\{f\} = \tilde{f}(k_x, k_y) := C_2 \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-i(k_x x + k_y y)} f(x, y) dx dy, \quad (\text{A.471})$$

$$\tilde{F}_2^{-1}\{f\} := \tilde{C}_2 \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{f}(k_x, k_y) e^{i(k_x x + k_y y)} dk_x dk_y, \quad (\text{A.472})$$

wobei

$$C_2 \tilde{C}_2 = \left(C_1 \tilde{C}_1 \right)^2 = \frac{1}{(2\pi)^2} \quad (\text{A.473})$$

gelten muss. Führt man dies induktiv fort, erhält man analog die n -dimensionale FT, wobei auf

$$C_n \tilde{C}_n = \left(C_1 \tilde{C}_1 \right)^n = \frac{1}{(2\pi)^n} \quad (\text{A.474})$$

zu achten ist.

Literatur

- [1] M. Abramowitz and I. A. Stegun. *Handbook of Mathematical Functions. With Formulas, Graphs, and Mathematical Tables*. 2014.
- [2] National Aeronautics and Space Administration. *Earth Fact Sheet*. 2016. URL: <https://nssdc.gsfc.nasa.gov/planetary/factsheet/earthfact.html>.
- [3] H. Weller et al. Computational Modes and Grid Imprinting on Five Quasi-Uniform Spherical C Grids. In: *Monthly Weather Review* 140.8 (2012), pp. 2734–2755.
- [4] A. Arakawa and V. R. Lamb. Computational design of the basic dynamical processes of the UCLA general circulation model. In: *Methods of Computational Physics* 17 (1977), pp. 173–265.
- [5] S. Chandrasekhar. *Radiative Transfer*. Dover Publications, 1960.
- [6] B. Cushman-Roisin and J.-M. Beckers. *Introduction to Geophysical Fluid Dynamics. Physical and Numerical Aspects*. 2nd ed. Vol. 101. International Geophysics Series. Academic Press, 2011.
- [7] T. Fließbach. *Elektrodynamik. Lehrbuch zur Theoretischen Physik II*. Heidelberg: Spektrum Akademischer Verlag, 2012.
- [8] T. Fließbach. *Mechanik. Lehrbuch zur Theoretischen Physik I*. Heidelberg: Spektrum Akademischer Verlag, 2009.
- [9] T. Fließbach. *Quantenmechanik. Lehrbuch zur Theoretischen Physik III*. Heidelberg: Spektrum Akademischer Verlag, 2008.
- [10] T. Fließbach. *Statistische Physik. Lehrbuch zur Theoretischen Physik IV*. Heidelberg: Spektrum Akademischer Verlag, 2010.
- [11] *Guide to Instruments and Methods of Observation. Volume V - Quality Assurance and Management of Observing Systems; Part I - Measurement of Meteorological Variables*. World Meteorological Organization. 2018. URL: https://library.wmo.int/index.php?lvl=notice_display&id=19660 (visited on 11/21/2019).
- [12] M. Hantel. *Einführung Theoretische Meteorologie*. Berlin, Heidelberg: Springer Spektrum, 2013.
- [13] J. R. Holton. *An Introduction to Dynamic Meteorology*. New York: Academic Press, Inc., 1979.
- [14] National Imagery and Mapping Agency. *Department of Defense World Geodetic System 1984. Its Definition and Relationships with Local Geodetic Systems*. 2000.
- [15] C. Jablonowski and D. L. Williamson. A baroclinic instability test case for atmospheric model dynamical cores. In: *Q. J. R. Meteorol. Soc.* 132 (2006), pp. 2943–2975.
- [16] J. D. Klett and H. R. Pruppacher. *Mircrophysisc of Clouds and Precipitation*. 2nd ed. Vol. 18. Atmospheric and Oceanographic Sciences Library. Springer Science+Business Media, 2010.
- [17] P. Kurzweil, B. Frenzel, and F. Gebhard. *Physik Formelsammlung*. Wiesbaden: Springer Vieweg, 2014.
- [18] Stanislav R. Massel. *Ocean Surface Waves. Their Physics and Prediction*. 3rd ed. Vol. 45. Advanced Series on Ocean Engineering. World Scientific Publishing, 2018.
- [19] D. D. McCarthy and G. Petit. *IERS Conventions (2003)*. International Earth Rotation and Reference Systems Service. 2003.
- [20] P. J. Mohr, D. B. Newell, and B. N. Taylor. CODATA recommended values of the fundamental physical constants: 2014. In: *Reviews of Modern Physics* 88 (2016).
- [21] International Association for the Properties of Water and Steam. *Guideline on the Use of Fundamental Physical Constants and Basic Constants of Water. LAPWS G5-01(2016)*. 2016.
- [22] Peter S. Ray, ed. *Mesoscale Meteorology and Forecasting*. American Meteorological Society, 1987.
- [23] A. Staniforth and J. Thuburn. Horizontal grids for global weather and climate prediction: a review. In: *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society* (2011).
- [24] *The five different grids by Arakawa*. Wikimedia Commons, user: Rpnl ocn, license: CC BY - SA 4.0.
- [25] W. Zdunkowski and A. Bott. *Dynamics of the Atmosphere. A Course in Theoretical Meteorology*. Cambridge University Press, 2013.
- [26] W. Zdunkowski and A. Bott. *Thermodynamics of the Atmosphere. A Course in Theoretical Meteorology*. Cambridge University Press, 2004.
- [27] W. Zdunkowski, T. Trautmann, and A. Bott. *Radiation in the Atmosphere. A Course in Theoretical Meteorology*. Cambridge University Press, 2007.

Index

- Θ -Funktion, 200
- β -Ebene, 146
- β -Effekt
 - orographischer, 157
- ω -Gleichung, 184, 204
- σ_p -System, 120
- σ_z -System, 119
- θ -System, 118, 134
 - hydrostatische Stabilität, 162
- 3-Spektrum, 213
- 5/3-Spektrum, 213
- 2D-vektorinvariante Form der Geschwindigkeitsadvection, 276
- 4-Vektor, 27
- Ableitung
 - materielle, 260, 275
 - mehrdimensionale, 259
 - totale, 117, 260
- absolute Feuchte, 88
- Absorptionskoeffizient, 130, 221
- Abstand
 - zweier Ereignisse in der Raumzeit, 27
- Absteigeoperator, 59
- Additionstheorem, 251
- Adhäsionsbedingung, 112, 209
- Adiabatenexponent, 167
- adjungierte Matrix, 41
- Advektion, 261
- Advektionsoperator, 261
- Algebra
 - Hauptsatz der, 42
- allgemeine binomische Formel, 247
- Amplitudenspektrum, 294
- Ampère'sches Gesetz, 23
- anormale Dispersion, 165
- Antisymmetrie
 - der Wellenfunktion, 72
- Antizyklogene, 204
- APE, 134
- Arakawa-Gitter, 232
- Arbeit, 17, 77
- Arcusfunktion, 250, 252
- Arefunktion, 249
- Atmosphäre
 - einphasige
 - Integralrelation, 131
 - Gesamtdrehimpuls, 133
 - Gesamtimpuls, 133
 - Zustand, 101
- atmosphärische Optik, 221
- atmosphärischer Zustand, 102
- Aufsteigeoperator, 59
- Auslösetemperatur, 201
- available potential Energy (APE), 134
- Axiom
 - Newton'sches
 - Zusatz, 15
 - Zweites
 - Newton'sches, 133
- BAC-CAB-Regel, 258
- Badsystem, 80
- Balancegleichung, 159
 - lineare, 159
- barokline Instabilität, 189
- barokline Rossby-Wellen, 181
- barokline Welle, 178
- barotrope Instabilität, 187
- barotrope potentielle Vorticity, 156
- barotrope Rossby-Welle, 176
- barotrope Vorticitygleichung, 154, 188
- barotrope Welle, 167
- Barotropie, 142
- Bernoulli-Gleichung, 132
 - zeitabhängige, 157, 191
- Bewegungsgleichung
 - Hamilton-Formalismus, 22
- Bijektion, 246
- Binomialkoeffizient, 246
- binomische Formel
 - allgemeine, 247
- binomischer Lehrsatz, 247
- Bodenreibung, 112, 208
- Bose-Verteilung, 96
- Boson, 60
- Boussinesq-Approximation, 144, 145
- Brazustand, 40
- Breiten
 - hohe, 203
 - mittlere, 203
- Brunt-Väisälä-Frequenz, 179, 195
- Burgers-Gleichung, 208
- C-Gitter, 232
- CAPE, 200
- CCL, 201
- cgs-System, 9, 245
- chemische Reaktion, 73
- chemisches Element, 48
- chemisches Potential, 81
- CIN, 201
- Clausius-Clapeyron-Gleichung, 94
- convective available potential Energy (CAPE), 200
- convective condensation level (CCL), 201
- convective inhibition (CIN), 201
- Coriolis-Parameter, 111
- Coriolis-Vektor, 111
- Coulomb'sches Gesetz, 23
- d'Alembert-Operator, 30
- Delaunay-Triangulation, 236
- Deltadistribution, 253
- Determinante, 248
- Diabatie, 128
- Dichte
 - mikroskopische, 102
 - trockener Luft, 101
- Dichteoperator, 74
- Dicke der Grenzschicht, 211
- Differenz
 - finite, 227
- Differentialgleichung
 - Hermite'sche, 287
 - Laguerre'sche, 53
 - Legendre'sche, 279
- Differentialoperator
 - Rechenregel, 263
 - unter Koordinatentransformation, 266
- differenzielle Temperaturadvektion, 204
- Diffusion, 92, 128

- skalare
 - Parametrisierung, 213
- Diffusionsgleichung, 92
- Diffusionskonstante, 92
- Diracgleichung, 66
- Diracnotation, 40
- diskrete Schichtung
 - Kelvin-Helmholtz-Instabilität, 190
- Diskretisierung, 227
- Dispersion
 - anormale, 165
- Dispersionsrelation, 164, 168
 - Quantenmechanik
 - freies Teilchen, 33
- Dissipation, 128, 129
- Divergenz, 149, 157, 260
 - eines Vektorfeldes, 260
 - im Modell, 239
- Divergenzgleichung, 157
 - p-System, 158
- Drehimpuls, 17
 - der Atmosphäre, 133
 - quantenmechanischer, 55
 - Wasserstoffatom, 57
- Drehimpulserhaltungssatz, 17
- Drehimpulsoperator, 55
- Drehimpulsquantenzahl, 55, 58
- Drehmoment, 17
- Druck, 102
 - Gleichung
 - prognostische, 123
 - prognostische Gleichung, 123
- Druckgradientbeschleunigung
 - Exner-Druck, 124
- Druckgradientkraft, 107
- duales Vektorfeld, 237
- Dynamik, 9, 141
 - tropische, 205
- dynamische Randbedingung, 112, 191
- dynamische Viskosität, 93, 110
- dynamischer Kern, 9, 235
 - Ankopplung eines Strahlungsmodells, 242
 - Zeitschrittverfahren, 242
- Eddy-Austauschkoeffizient, 208
- Eddy-Stress-Term, 208
- Eddy-Viskositäts-Koeffizient, 209
- Eichinvarianz der Maxwell-Gleichungen, 23
- Einstein'sche Summenkonvention, 28
- Ekman-Schicht, 209
- Ekman-Spirale, 147
- Ekman-Transport, 209
- Ekman-Zahl, 212
- elektrisches Feld, 102
- Elektrodynamik, 22
- elektromagnetische Welle, 24
- elektromagnetisches Feld
 - Energie, 25
- Element
 - chemisches, 48
- Ellipse, 277
 - Halbachse
 - große, 277
 - kleine, 277
- Ellipsoid, 277, 278
- Emissivität, 98
- Energie, 17
- des elektromagnetischen Feldes, 25
- freie, 81
- innere, 132–134
- kinetische, 18, 111, 134
 - spezifische, 131
- potentielle, 134
 - konvektiv verfügbare, 200
 - totale, 134
 - verfügbare, 134
- Energiedichte, 27, 132
 - kinetische, 131
- Energiekaskade, 213
- Ensemble, 74
 - großkanonisches, 80
 - kanonisches, 80
 - mikrokanonisches, 76
- Entartung, 55
- Enthalpie, 81, 133, 134
 - freie, 81
 - spezifische, 125
- Entropiedichte, 133
- Erde
 - Schwerefeld, 277
- Ereignis, 27
- Erster Hauptsatz
 - der Thermodynamik, 231
- Erster Hauptsatz der Thermodynamik, 231
 - in der Atmosphäre, 120
- Erster Hauptsatz der Thermodynamik, 77
- Ertel'scher Wirbelsatz, 159, 160
- Erwartungswert, 295
- Erzeugungsoperator, 44, 46
- Euler-Gleichung, 108
- Euler-Identität, 251
- Euler-Verfahren
 - explizites, 229
 - implizites, 229
- Euler-Wind, 147
- evanescente Welle, 163
- Exner-Druck, 124, 241
 - Druckgradientbeschleunigung, 124
- explizites Euler-Verfahren, 229
- Exponentialfunktion, 249
 - komplexe, 294
- externe Kraft, 133
- Extratropen, 203
- Exzentrizität, 277
- f-Ebene, 145
- f-Kugel, 145, 176
- Fakultät, 246
- Faraday'sches Induktionsgesetz, 23
- Fehlerfunktion, 254
- Feinstrukturkonstante, 66
- Feld
 - elektrisches, 102
 - im Modell, 237
- Feldstärketensor, 30
- Fermion, 60
- Feuchtadiabate
 - irreversible, 197, 200
 - reversible, 197
- feuchtadiabatischer Temperaturgradient, 199
- Feuchte
 - absolute, 88
 - mikroskopische, 102
 - relative, 88
 - spezifische, 106

- spezifische, 88
feuchte Luft, 101, 120
Kontinuitätsgleichung, 123
Feuchtemaß, 88
Filterung, 141
finite Differenz, 227
Flachgeofluid, 112
Flachwassergleichung, 115
Flachwassergleichungen
Linearisierung, 116
Flachwasserwelle, 168
Fluid
ideales, 110
Flussdichte
magnetische, 102
Flächen des Modellgitters, 236
Forcing, 103
Formel
binomische
allgemeine, 247
Fourier-Transformation, 294
inverse, 294
Framework
konditionelles, 238
freie Energie, 81
freie Enthalpie, 81
freie Konvektion, 201
freies Teilchen, 33
Front, 204
Frontalzone, 215
Frontogenese, 184
Funktion
rationale, 249
trigonometrische, 250
Funktionaldeterminante, 276
Funktionensysteme
orthogonale, 278
Gammafunktion, 254
Gas
ideales, 85
Gaskonstante
individuelle, 231
Gasmodell
kinetisches, 92
Gauß'sche Summenformel, 245
Gauß'scher Satz, 22, 142, 276
geländefolgende Koordinaten, 242
gemischter Zustand, 75
generalisierte Geschwindigkeit, 20
generalisierte Koordinaten, 19
generalisierte Vertikalkoordinate, 116, 142
Geofluidsimulation, 231
geographische Koordinaten, 259
geometrische Reihe, 246
Geopotential, 131
Geopotentialtendenz, 203
geopotentielle Höhe, 142
Geostrophie, 143
gerade Permutation, 246
Gesamtdrehimpuls der Atmosphäre, 133
Gesamtimpuls der Atmosphäre, 133
Geschwindigkeit
generalisierte, 20
Geschwindigkeitsadvektion
2D-vektorinvariante Form, 276
Geschwindigkeitsdivergenz, 157
Geschwindigkeitspotential, 149
Gesetz
Coulomb'sches, 23
gewichtetes Mittel
allgemeines, 213
Gibbspotential, 81
Gitter
Arakawa, 232
hexagonales, 233
horizontales, 236
Modelgitter, 235
Orthogonalität, 231
Quasi-Uniformität, 231
Uniformität, 231
Gitteroptimierung, 242
Gleichgewichtsniveau, 201
Gleichung
herrschende, 137
prognostische
Druck, 123
Gleichungen
herrschende, 101
zonal gemittelte, 215
gleitendes Mittel, 212
gleitendes Zeitmittel, 212
globale Koordinaten, 259
globale Mode, 176
Gradient
im Modell, 239
Gradientenwind, 146
Gradientenwindhöhe, 211
Gravitationskonstante
Newton'sche, 142
Graßmann-Identität, 258
Grenzschicht, 211
planetare, 208
große Halbachse, 277
große Skala, 9
großkanonisches Ensemble, 80
großkanonisches Potential, 81
Großskala, 9
Grundfunktion, 249
Additionstheoreme, 251
Symmetrieeigenschaften, 250
Grundgleichung
hydrostatische, 141
Grundlage
mathematische, 245
Numerik, 227
Gruppengeschwindigkeit, 164
H-Atom, 48
relativistische Korrektur, 72
Übergang, 70
H-Theorem, 76
Halbachse
große, 277
kleine, 277
Hamilton'sche Bewegungsgleichung, 22
Hamilton-Formalismus, 18, 21
Hamilton-Funktion, 22
Hamilton-Operator, 32
harmonischer Oszillator, 37
Hauptquantenzahl, 54
Hauptsatz der Algebra, 42
Hauptsatz der Vektoranalysis, 149
Hebungskondensationsniveau (HKN), 197, 200
Hebungskurve, 122

- Herleitung
einer Parametrisierung, 213
- Hermite'sche Differenzialgleichung, 287
- Hermite'scher Operator, 42
- Hermite-Polynom, 39, 287
- Hermitezität
 Impulsoperator, 43
- herrschende Gleichung, 101, 137
- hexagonales Gitter, 233
- Hilbert-Raum, 39
- HKN, 197, 200
- hohe Breiten, 203
- holonome Zwangsbedingung, 18
- horizontaler Laplace-Operator, 261
- horizontaler Nabla-Operator, 261
- horizontales Gitter, 236
- Hydrostatis, 118, 141
- hydrostatische Grundgleichung, 141
- hydrostatische Stabilität im θ -System, 162
- Hyperbelfunktion, 249
- Höhe
 geopotentielle, 142
- ideales Fluid, 110
- ideales Gas, 85
- implizites Euler-Verfahren, 229
- Impuls
 der Atmosphäre, 133
 kanonischer, 21
- Impulserhaltungssatz, 17
- Impulsflussdichtetensor, 108, 110
- Impulsgleichung, 107, 111
- Impulsoperator, 33
 Hermitezität, 43, 44
- individuelle Gaskonstante, 231
- Induktion
 vollständige, 246
- Induktionsgesetz
 Faraday'sches, 23
- Inertialwelle, 172
- Inertialwellen, 172
- innere Energie, 132–134
- Instabilität, 163, 187
 barokline, 189
 barotrope, 187
 lineare, 229
 thermische, 196
- Integralformel, 253
- Integralrechnung
 mehrdimensionale, 276
- Integralrelation
 einer einphasigen Atmosphäre, 131
- Integration
 partielle, 134, 253
- inverse Fourier-Transformation, 294
- inverse Matrix, 41
- Inversion, 197
- Ion, 48
- Ionisation, 48
- Ionosphäre, 102
- irreversible Feuchtadiabate, 197, 200
- iseentrope Koordinate, 161
- isentrope Koordinate, 118, 126
- Isentropenexponent, 167
- isentropes Koordinatensystem, 126
- Isotop, 48
- Jacobi-Matrix, 259
- Jet, 188, 215
- JW-Test, 242
- kalorische Zustandsgleichung, 79
- kalorische Zustandsgleichung idealer Gase, 86
- kanonischer Impuls, 21
- kanonisches Ensemble, 80
- Kapillardruck, 171
- Kapillarwellen, 170
- Kelvin-Formel, 223
- Kelvin-Helmholtz-Instabilität
 in diskreter Schichtung, 190
 in kontinuierlicher Schichtung, 193
- Kelvin-Welle, 172
 äquatoriale, 174
- Kelvin-Helmholtz-Instabilität, 190
- Kern
 dynamischer, 9, 235
 Ankopplung eines Strahlungsmodells, 242
 Zeitschrittverfahren, 242
- Ketzustand, 40
- Kinematik
 Welle, 163
- kinematische Randbedingung, 112, 132, 133, 191
- kinematische Viskosität, 110
- kinetische Energie, 18, 134
 spezifische, 111, 131
- kinetische Energiedichte, 131
- kinetisches Gasmodell, 92
- Kirchhoff'sches Strahlungsgesetz, 98
- KKN, 201
- klassische Mechanik, 15
- kleine Halbachse, 277
- Klimatologie
 der Atmosphäre, 215
- Kollision, 128
- Kommutator, 45
- kommutierende Operatoren, 45
- Kombinatorik, 246
- komplexe Exponentialfunktion, 294
- komplexe Zahl, 252
- Kondensat, 126, 231
- Kondensatklasse, 101
- konditionelles Framework, 238
- konkrete Mittelungsoperatoren, 212
- konservatives Kraftfeld, 18
- Konsistenz
 eines numerischen Verfahrens, 227
- kontinuierliche Schichtung
 Kelvin-Helmholtz-Instabilität, 193
- Kontinuitätsgleichung, 104, 231
 feuchte Luft, 123
- Konvektion
 freie, 201
- Konvektionskondensationsniveau (KKN), 201
- konvektiv verfügbare potentielle Energie, 200
- konvektive Schranke, 201
- Konvention
 über Koordinatensysteme, 259
- Koordinate
 generalisierte, 19
 isentrope, 126, 161
 orographische, 119, 120
- Koordinaten
 geländefolgende, 242
 orthogonale, 266
 ruhende, 134
- Koordinatensystem
 geographisches, 259

- globales, 259
isentropes, 126
Konvention, 259
Kugel, 268
orthogonales, 266
ruhendes, 259
Koordinatentransformation
Differentialoperator, 266
Koordinate
 isentrope, 118
Korrelationsfluss, 207
Kraft
 externe, 133
 verallgemeinerte, 21, 77
Kraftfeld
 konservatives, 18
Krümmungsradius, 261
Krümmungsvorticity, 151
Kugelflächenfunktion, 291
Kugelkoordinaten, 268
Köhler-Formel, 223
Körper
 schwarzer, 99
Ladungsdichte, 22
 der Tracer, 101
Lagrange-Formalismus, 18
Lagrange-Funktion, 21
Lagrange-Gleichung
 1. Art, 19
 2. Art, 21
Laguerre'sche Differenzialgleichung, 53
Laguerre-Polynom, 53, 289
laminare Strömung, 207
laminare Unterschicht, 209
Landéfaktor, 62
Langwellennäherung, 71
Laplace-Gleichung, 192
Laplace-Operator, 260
 horizontaler, 261
latente Wärme, 128
Layer, 236
LCL, 197, 200
Legendre'sche Differenzialgleichung, 279
Legendre-Funktion
 assoziierte, 285
Legendre-Polynom, 279
Legendre-Polynome
 Normierung, 281
 Orthogonalität, 281
Lehrsatz
 binomischer, 247
Leistungsspektrum, 294
Leiteroperator, 46
Level, 236
level of free convection, 201
Levi-Civita-Symbol, 247
LFC, 201
lifted condensation level (LCL), 197, 200
lineare Balancegleichung, 159
lineare Instabilität, 229
Linearisierung
 der Flachwassergleichungen, 116
 Wellengleichung, 165
Literatur, 9
Logarithmusfunktion
 natürliche, 249
Longitudinalwelle, 165
Lorentz-Kraft, 22
Lorentz-Transformation, 27
Lorenz-Eichung, 23
Luft, 101
 feuchte, 101, 120
 trockene, 101
Längen des Modellgitters, 236
magnetische Flussdichte, 102
Magnetquantenzahl, 58
Makrozustand, 74
Massenstromdichte, 101
Massenzahl, 48
Mastergleichung, 75
materielle Ableitung, 260, 275
materielle Zeitableitung
 Wirkung auf ein Vektorfeld, 268
mathematische Grundlage, 245
Matrix, 256
 adjungierte, 41
 inverse, 41
 quadratische, 256
 unitäre, 41
maximale Wolkenobergrenze, 201
Maxwell'scher Verschiebungsstrom, 23
Maxwell-Gleichung, 22
Maxwell-Gleichungen
 Eichinvarianz, 23
Maxwell-Relation, 83
Maxwell-Verteilung, 90
Mechanik
 klassische, 15
mechanische Oberflächenspannung, 171
Mehr-Stoff-System, 223
mehrdimensionale Ableitung, 259
mehrdimensionale Integralrechnung, 276
Mehrteilchensystem, 72
Meso- α -Skala, 9, 203
Meso- β -Skala, 9
Meso- γ -Skala, 9
Mesoskala, 9, 203
mikrokanonische Zustandssumme, 76
mikrokanonisches Ensemble, 76
Mikroskala, 9
mikroskopische Dichte, 102
mikroskopische Feuchte, 102
Mikrozustand, 73
Mischungsverhältnis, 88
Mischungsweg, 208
Mittel
 gewichtetes
 allgemeines, 213
 gleitendes, 212
Mittelungsoperator
 konkreter, 212
mittlere Breiten, 203
mittlere Stoßzeit, 92
Mode
 globale, 176
 vertikale, 180
Modell
 duales Vektorfeld, 237
 Skalarfeld, 237
 Vektorfeld, 237
 duales, 237
Modellgitter, 235
 Erweiterung
 vertikale, 236

- Flächen, 236
- Generierung auf der Einheitskugel, 236
- Längen, 236
 - vertikale Erweiterung, 236
- molekulare Skala, 9
- Molekülspektrum, 73
- Montgomery-Potential, 119
- Multinomialkoeffizient, 247
- Multischrittverfahren, 230
- Nabla-Operator
 - horizontaler, 261
- natürliche Logarithmusfunktion, 249
- Newton'sche Gravitationskonstante, 142
- Newton'sches Axiom
 - Zusatz, 15
 - Zweites, 15, 133
 - der Rotation, 17
- Normierung
 - Legendre-Polynome, 281
- Numerik, 9, 227
 - Grundlage, 227
- Oberflächenschicht, 209
- Oberflächenspannung
 - mechanische, 171
- Obliquität, 10
- Observable
 - vollständige, 48
- Operator, 238, 256
 - Hermite'scher, 42
 - statistischer, 74
 - Vektorprodukt, 239
- Operatoren
 - kommutierende, 45
- Optik
 - atmosphärische, 221
- Orbital, 55
- Orographie, 134, 242
- orographie, 119
- orographische Koordinate, 119, 120
- orographischer β -Effekt, 157
- orthogonale Funktionensysteme, 278
- Orthogonalität
 - eines Gitters, 231
 - eines Koordinatensystems, 266
 - Legendre-Polynome, 281
- Oszillator
 - harmonischer, 37
- overshooting top, 201
- Ozeanzirkulation, 217
- p-System, 117, 136, 161
- Parallelisierung, 231
- Parametrisierung, 208
 - der Reibung durch Stommel, 218
 - Diffusion
 - skalare, 213
 - Herleitung, 213
 - Phasenübergangsrate, 213
 - skalare Diffusion, 213
- partielle Integration, 134, 253
- Pauli-Gleichung, 62
- Pauli-Matrix, 61
- Pauli-Prinzip, 73
- Permutation, 246
 - gerade, 246
 - ungerade, 246
 - Vorzeichen, 246
- Permutationsoperator, 72
- Phasenraum, 22
- Phasenspektrum, 294
- Phasenübergang, 93, 128
- Phasenübergangsrate
 - Parametrisierung, 213
- Phasenübergangswärme, 128
- Photonengas, 95
- Physik
 - statistische, 73
- Planck'sches Strahlungsgesetz, 97
- Planck'sches Wirkungsquantum, 32
- planetare Vorticity, 150
- planetarische Grenzschicht, 208
- Poincaré-Welle, 169
- Poisson-Gleichung, 149
- Polarkreis, 203
- Polynom, 249
- Potential, 18
 - chemisches, 81
 - großkanonisches, 81
 - skalares, 23
 - thermodynamisches, 81
- Potentialstufe, 35
- Potentialtopf, 34
- potentielle Energie, 134
 - konvektiv verfügbare, 200
 - verfügbare, 134
- potentielle Temperatur, 121, 123
 - virtuelle, 128
- potentielle Vorticity, 204
- potentielle Vorticity, 159, 161
- Powerspektrum, 294
- Poynting-Theorem, 26
 - Meteorologie, 132
- Prandtl-Frequenz, 196
- Prandtl-Schicht, 209
- primitive, nonhydrostatic equations (PNEs), 231
- Produktwellenfunktion, 36
- prognostische Gleichung
 - Druck, 123
- Prozess
 - quasistatischer, 77
- pseudopotentielle Temperatur, 128, 200
- PV-Denken, 204
- quadratische Matrix, 256
- Quantenmechanik, 32
- quantenmechanischer Drehimpuls, 55
- Quasi-Uniformität
 - eines Gitters, 231
- Quasigeostrophie, 181, 203
- quasigeostrophische potentielle Vorticity, 183
- quasigeostrophische Vorticitygleichung, 182
- quasigeostrophisches Zweischichtmodell, 184
- quasistationärer Zustand, 102
- quasistatischer Prozess, 77
- radiale Schrödinger-Gleichung, 51
- Radius
 - volumenkonformer, 241
- Ranbedingung
 - kinematische, 133
- Randbedingung, 112, 131
 - dynamische, 112, 191

- kinematische, 112, 132, 191
 Rapidity, 29
 rationale Funktion, 249
 Rauhigkeitslänge, 209
 Raumzeit, 27
 Reaktion
 chemische, 73
 Rechenregel
 Differentialoperator, 263
 Reibung, 109
 Boden, 112
 Stokes'sche, 223
 Reibungsgeschwindigkeit, 209
 Reibungswind, 147
 Reihe, 245
 geometrische, 246
 reiner Zustand, 75
 relative Feuchte, 88
 relative Vorticity, 150
 Relativistik
 H-Atom, 72
 Relativitätstheorie
 Spezielle, 27
 Relaxation der spherical geopotential approximation (SGA)
 241
 Residuensatz, 255
 reversibel, 133
 reversibel-pseudopotentielle Temperatur, 200
 reversible Feuchtadiabate, 197
 Reynolds-Mittelung, 207
 Reynolds-Operator, 207
 rheonome Zwangsbedingung, 18
 Richardson-Zahl, 196
 Richtungsdivergenz, 157
 Rodrigues-Formel, 278
 Rossby-Parameter, 145
 Rossby-Welle, 176
 barokline, 181
 barotrope, 176
 Rossby-Zahl, 143
 Rotation
 im Modell, 240
 duale, 240
 Rotationsellipsoid, 277, 278
 ruhende Koordinaten, 134, 259
 Runge-Kutta-Verfahren, 230
- Satz
 Gauß'scher, 142
 Satz von Gauß, 22, 276
 Satz von Stokes, 22, 151, 152
 Schallwelle, 166
 Scheinkraft, 109
 Scherungsvorticity, 151
 Schichtung
 diskrete
 Kelvin-Helmholtz-Instabilität, 190
 kontinuierliche
 Kelvin-Helmholtz-Instabilität, 193
 Schichtungswelle, 178, 201
 Schließungsproblem, 207
 Schranke
 konvektive, 201
 Schrödinger-Gleichung, 32, 50
 freies Teilchen, 33
 harmonischer Oszillator, 37
 Potentialstufe, 35
 Potentialtopf, 34
 radiale, 51
- stationäre, 33, 37
 schwarzer Körper, 99
 Schwerefeld der Erde, 277
 Schwerewelle, 187
 Schwerpunkt, 15
 Selbstkonsistenz
 eines numerischen Verfahrens, 227
 Semigeostrophie, 204
 SI-System, 9, 245
 Skala
 große, 9
 Meso- α -Skala, 9, 203
 Meso- β -Skala, 9
 Meso- γ -Skala, 9
 Mesoskala, 9, 203
 Mikroskala, 9
 molekulare, 9
 synoptische, 9
 skalare Diffusion
 Parametrisierung, 213
 skalares Potential, 23
 Skalarfeld
 im Modell, 237
 Skalarprodukt
 im Modell, 239
 Skalenanalyse, 9
 Tropen, 205
 Skalierbarkeit, 231
 skleronome Zwangsbedingung, 18
 Solenoidterm, 154
 spektrale Strahldichte, 102
 Spektrum, 294
 Spezielle Relativitätstheorie, 27
 spezifische Enthalpie, 125
 spezifische Feuchte, 88, 106
 spezifische kinetische Energie, 111, 131
 spezifische Wärmekapazität, 79, 231
 spherical geopotential approximation (SGA)
 Relaxation, 241
 Spin, 60, 61
 Spin-Bahn-Kopplung, 65
 Spin-down, 212
 Spin-down-Zustand, 60
 Spin-up-Zustand, 60
 Spinmatrix, 61
 Spinoperator, 61
 Spinor, 61
 Spinzustand, 60
 Stabilitätsparameter, 120
 statischer, 181
 Stabilitätswellenzahl, 184
 Standardatmosphäre, 126, 237
 stationäre Schrödinger-Gleichung, 33, 37
 statischer Stabilitätsparameter, 181
 statistische Physik, 73
 statistischer Operator, 74
 Stefan-Boltzmann-Gesetz, 97
 Stefan-Boltzmann-Konstante, 97
 Steilheit, 165
 Stirling-Formel, 254
 Stokes'sche Reibung, 223
 Stokes'scher Satz, 22, 151, 152
 Stokes-Drift, 168
 Stommel-Modell, 218
 Stoßzeit
 mittlere, 92
 Strahldichte, 27

- spektrale, 102
- Strahlung, 26, 128
- Strahlungsenergie, 27
- Strahlungsfluss, 27
- Strahlungsflussdichte, 27
- Strahlungsgesetz
 - Kirchhoff'sches, 98
 - Planck'sches, 97
- Strahlungsgröße, 26
- Strahlungsmodell
 - Ankopplung an einen dynamischen Kern, 242
- Strahlungstransport, 129
- Strahlungsübertragungsgleichung, 129, 131
- Stratosphäre, 240
- Streukoeffizient, 221
- Streuquerschnitt, 98, 130
- Stromdichte, 22
- Stromfunktion, 149, 191
- Strömung
 - laminare, 207
- Störungstheorie, 62
 - zeitabhängige, 68
 - zeitunabhängige, 62
- Sub-Poincaré-Welle, 167
- Subgeostrohpie, 146
- subgeostrophischer Wind, 146
- Substitutionsregel, 253
- Summe, 245
- Summenformel
 - Gauß'sche, 245
- Summenkonvention
 - Einstein'sche, 28
- Supergeostrohpie, 146
- supergeostrophischer Wind, 146
- Sverdrup-Balance, 218
- Symmetrie
 - der Grundfunktionen, 250
 - der Wellenfunktion, 72
- Synoptik
 - der Extratropen, 203
- synoptische Skala, 9
- Sättigungsdampfdruck, 223
- Taylor-Goldstein-Gleichung, 195
- Teilchen
 - freies, 33
- Teilchenzahloperator, 44, 46
- Temperatur, 77, 101
 - potentielle, 121, 123
 - virtuelle, 128
 - pseudopotentielle, 128, 200
 - reversibelpseudopotentielle, 200
 - virtuelle, 88
 - potentielle, 128
- Temperaturadvektion
 - differenzielle, 204
- Temperaturgradient
 - feuchtadiabatischer, 199
 - trockenadiabatischer, 121, 197
- Temperaturleitfähigkeit, 93
- Temperaturzuschlag
 - virtueller, 88
- Tendenz
 - des Geopotentials, 203
- Tendenzgleichung, 183, 203
- thermische Instabilität, 196
- thermische Zustandsgleichung, 79, 231
- thermischer Wind, 144
- Thermodynamik
 - Erster Hauptsatz, 231
 - in der Atmosphäre, 120
- Thermodynamik
 - Erster Hauptsatz, 299
- thermodynamisches Potential, 81
- Thermodynamika
 - Erster Hauptsatz, 231
- thermohaline Zirkulation, 218
- Tide, 217
- Tiefwasserwelle, 168
- Tornado, 147
- totale Ableitung, 117, 260
- totale potentielle Energie, 134
- Tracer, 101
- Tracerklasse, 101
- Transversalwelle, 165
- Trennung der Variablen, 253
- trigonometrischen Funktionen, 250
- Trockenadiabate, 122
- trockenadiabatischer Temperaturgradient, 121, 197
- trockene Luft, 101
- Tropen, 203
- Tropopausenhöhe, 200
- Tunneleffekt, 35
- Turbulenz, 207
 - volle, 207
- Turbulenzkorrelationstensor, 207
- Turbulenzspektrum, 213
- ungerade Permutation, 246
- Uniformität
 - eines Gitters, 231
- unitäre Matrix, 41
- Unschärferelation, 47
- Unterschicht
 - laminare, 209
- Vektorfeld
 - Divergenz, 260
 - Wirkung der materiellen Zeitableitung, 268
- Vektorfelder
 - im Modell, 237
- Vektorpotential, 23
- Vektorprodukt, 257
 - im Modell, 239
- Vektorraum, 255
- verallgemeinerte Kraft, 21, 77
- verbotener Übergang, 42
- verfügbare potentielle Energie, 134
- Vernichtungsoperator, 44, 46
- Verschiebungsstrom, 23
- vertikale Erweiterung des Modellgitters, 236
- vertikale Mode, 180
- Vertikalkoordinate
 - generalisierte, 116, 142
- virtuelle potentielle Temperatur, 128
- virtuelle Temperatur, 88
 - potentielle, 128
- virtueller Temperaturzuschlag, 88
- Viskosität
 - dynamische, 93, 110
 - kinematische, 110
- volle Turbulenz, 207
- vollständige Induktion, 246
- vollständige Observable, 48
- volumenkonformer Radius, 241

- von Karman-Konstante, 209
von Neumann-Gleichung, 75
Voronoi-Diagramm, 236
Vorticity, 149, 150
 planetare, 150
 potentielle, 159, 161, 204
 barotrope, 156
 quasigeostrophische
 potentielle, 183
 relative, 150
Vorticitygleichung, 153
 barotrope, 154, 188
 p-System, 155
 quasigeostrophische, 182
Vorzeichen einer Permutation, 246
- Wasserstoff, 48
Wassserstoff
 Drehimpuls, 57
Weber-Transformation, 266
Welle, 163
 barokline, 178
 barotrope, 167
 elektromagnetische, 24
 evanescente, 163
 Flachwasser, 168
 Inertialwelle, 172
 Instabilität, 187
 Kelvin-Welle, 172
 Kinematik, 163
 Poincaré-Welle, 169
 Rossby-Welle
 barokline, 181
 barotrope, 176
 Schichtungswelle, 178
 Sub-Poincaré, 167
 Tiefwasser, 168
- Wellenfunktion
 Antisymmetrie, 72
 Symmetrie, 72
- Wellenhöhe, 165
Wendekreis, 203
Wind
 subgeostrophischer, 146
 supergeostrophischer, 146
 thermischer, 144
 zyklostrophischer, 147
- windgetriebene Zirkulation, 217
- Windsee, 218
Windvektor, 101
Wirbelsatz
 Ertel'scher, 159, 160
- Wirkungsquerschnitt, 92
Wolkenmikrophysik, 223
Wolkenobergrenze
 maximale, 201
- Wärme, 77
 latente, 128
- Wärmedurchgangszahl, 129
- Wärmekapazität, 79
 spezifische, 79
 sspezifische, 231
- Wärmeleitung, 128
- Wärmeleitungsgleichung, 93
- Wärmeübergang, 128, 129
- Zahl
 komplexe, 252
- zeitabhängige Bernoulli-Gleichung, 157, 191
zeitabhängige Störungstheorie, 68
Zeitableitung
 materielle
 Wirkung auf ein Vektorfeld, 268
- Zeitmittel
 gleitendes, 212
- Zeitschrittverfahren, 228
 im dynamischen Kern, 242
- zeitunabhängige Störungstheorie, 62
- Zerfall, 128
- Zirkulation
 thermohaline, 218
 windgetriebene, 217
- Zirkulationssatz, 152, 191
- zonal gemittelte Gleichungen, 215
- Zusatz
 zu den Newton'schen Axiomen, 15
- Zustand, 39
 atmosphärischer, 102
 der Atmosphäre, 101
 gemischter, 75
 quasistationärer, 102
 reiner, 75
- Zustandsgleichung
 kalorische, 79
 idealer Gase, 86
 thermische, 79, 231
- Zustandssumme
 mikrokanonische, 76
- Zwangbedingung, 18
 holome, 18
 rheonome, 18
 skleronome, 18
- Zwei-Strom-Methode, 221
- Zweischichtmodell
 quasigeostrophisches, 184
- Zweites Newton'sches Axiom, 15, 133
 der Rotation, 17
- Zyklogenese, 141, 184, 203, 205
- Zyklostrophischer Wind, 147
- Übergang
 verbotener, 42
- Übergang im H-Atom, 70
- äquatoriale Kelvin-Welle, 174