Kompendium Theoretische Meteorologie

Max H. Balsmeier

© Max H. Balsmeier 2020
Das Skript enthält mit großer Wahrscheinlichkeit Fehler und Ungenauigkeiten. Es befindet sich unter permanenter Überarbeitung. Teile sind unvollständig oder es sind nur die Überschriften vorhanden.
Kommerzielle Nutzung wird untersagt, alle Rechte vorbehalten.

Inhaltsverzeichnis

1 Einleitung 9
1.1 Wichtige Literatur . . . 9
1.2 Skalen . . . 9

I Von der Physik zur Atmosphäre 13

2 Physikalische Grundlagen 15
2.1 Klassische Mechanik . . . 15
2.1.1 Newton'sche Mechanik . . . 15
2.1.2 Lagrange-Formalismus . . . 18
2.1.3 Hamilton-Formalismus . . . 21
2.1.3.1 Poisson-Klammer . . . 22
2.2 Elektrodynamik . . . 23
2.2.1 Elektromagnetische Wellen . . . 25
2.2.2 Energie des elektromagnetischen Feldes . . . 26
2.2.2.1 Strahlungsgrößen . . . 27
2.2.3 Spezielle Relativitätstheorie . . . 28
2.2.4 Relativistische Behandlung des elektromagnetischen Feldes . . . 31
2.3 Quantenmechanik . . . 33
2.3.1 Freies Teilchen . . . 34
2.3.2 Potentialtopf . . . 35
2.3.3 Potentialstufe . . . 36
2.3.4 Produktwellenfunktionen . . . 37
2.3.5 Harmonischer Oszillator . . . 38
2.3.6 Hilbert-Raum und Operatoren . . . 40
2.3.6.1 Hilbert-Raum . . . 40
2.3.6.2 Hermite'sche Operatoren . . . 43
2.3.6.3 Kommutierende Operatoren . . . 46
2.3.6.4 Leiteroperatoren . . . 47
2.3.7 Unschärferelation . . . 48
2.3.8 H-Atom . . . 49
2.3.9 Drehimpuls . . . 56
2.3.10 Spin . . . 62
2.3.11 Störungstheorie . . . 63
2.3.11.1 Zeitunabhängiger Fall . . . 63
2.3.11.2 Spin-Bahn-Kopplung im H-Atom . . . 66
2.3.11.3 Zeitabhängiger Fall . . . 69
2.3.11.4 Übergänge im H-Atom . . . 71
2.3.11.5 Relativistische Korrekturen im H-Atom . . . 73
2.3.12 Mehrteilchensysteme . . . 73
2.3.12.1 Molekülspektren . . . 74
2.3.12.2 Chemische Reaktionen . . . 74
2.4 Statistische Physik . . . 74
2.4.1 Mikrokanonisches Ensemble . . . 77
2.4.2 Kanonisches und großkanonisches Ensemble . . . 81
2.4.3 Thermodynamische Potentiale . . . 82
2.4.4 Ideales Gas . . . 86
2.4.5 Klassische Systeme . . . 90
2.4.5.1 Maxwell-Verteilung . . . 91
2.4.5.2 Kinetisches Gasmodell . . . 93
2.4.6 Clausius-Clapeyron-Gleichung . . . 95
2.4.7 Kapillarität . . . 97
2.4.7.1 Kelvin-Gleichung . . . 97
2.4.8 Photonengas . . . 99

3 Herrschende Gleichungen 103
3.1 Zustand der Atmosphäre . . . 103
3.1.1 Gasphase . . . 103
3.1.2 Zweiter Kontinuumsübergang . . . 103
3.1.2.1 Deskriptiver Informationsverlust . . . 105
3.2 Forcings und Zeitableitungen . . . 105
3.3 Kontinuitätsgleichungen . . . 106
3.4 Impulsgleichung . . . 109
3.4.1 Scheinkräfte . . . 111

3.4.2 Stress-Tensor . . . 112
3.4.2.1 Inkompressibler Grenzfall . . . 115
3.4.3 Addition der Kräfte . . . 116
3.4.4 Randbedingungen . . . 116
3.4.5 Näherungen . . . 117
3.4.5.1 Advektive Anteile . . . 117
3.4.5.2 Shallow atmosphere . . . 117
3.4.5.3 Modifizierter Coriolis-Parameter . . . 118
3.4.5.4 Flachwassergleichungen . . . 119
3.4.5.4.1 Linearisierung . . . 120
3.5 Generalisierte Vertikalkoordinaten . . . 120
3.5.1 p-System . . . 121
3.5.2 $\theta-$System . . . 122
3.5.3 σ_z-System . . . 123
3.5.4 σ_p-System . . . 124
3.6 Erster Hauptsatz in der Atmosphäre . . . 124
3.6.1 Ideales einatomiges Gas . . . 124
3.6.1.1 Temperatur als prognostische Variable . . . 124
3.6.1.2 Hydrostatischer Grenzfall . . . 126
3.6.1.3 Adiabatische Grenzfälle . . . 126
3.6.1.4 Potentielle Temperatur als prognostische Variable . . . 127
3.6.1.5 Druck als prognostische Variable . . . 129
3.6.1.6 Exner-Druck als prognostische Variable . . . 130
3.6.1.7 Entropie als prognostische Variable . . . 131
3.6.2 Ideales Gasgemisch mit homogener Zusammensetzung . . . 133
3.6.3 Ideales Gasgemisch mit variabler Zusammensetzung . . . 133
3.6.3.1 Beispiel: feuchte Luft . . . 134
3.6.4 Anwendungen . . . 134
3.6.4.1 Die isentrope trockene Atmosphäre . . . 134
3.6.5 Kondensate . . . 135
3.7 Integralrelationen einer einphasigen Atmosphäre . . . 137
3.7.1 APE . . . 140
3.8 Anwendung des Hamilton-Formalismus auf die Atmosphäre . . . 142
3.8.1 Trockene Atmosphäre . . . 142
3.8.1.1 Potentielle Temperatur als prognostische Variable . . . 143
3.8.1.2 Entropdiedichte als prognostische Variable . . . 145
3.9 Konkretisierung der Wärmeflüsse . . . 147
3.9.1 Wärmeleitung . . . 148
3.9.2 Phasenübergangswärme . . . 148
3.9.3 Wärmeübergang . . . 148
3.9.4 Dissipation . . . 149
3.9.5 Strahlungsübertragungsgleichung . . . 149
3.9.6 Randbedingungen . . . 151
3.10 Zusammenstellung der herrschenden Gleichungen . . . 152

II Dynamik **153**

4 Wichtige Approximationen 155
4.1 Hydrostatik . . . 155
4.2 Barotropie . . . 156
4.3 Geostrophie . . . 157
4.4 Boussinesq-Approximation . . . 158
4.5 Entwicklungen des Coriolis-Parameters in ebener Geometrie . . . 159
4.5.1 f-Ebene . . . 159
4.5.2 $\beta-$Ebene . . . 160
4.6 Gradientenwind . . . 160
4.7 Reibungswind . . . 161
4.8 Euler-Wind . . . 161
4.9 Zyklostrophischer Wind . . . 161

5 Vorticity und Divergenz 163
5.1 Vorticity . . . 164
5.1.1 Scherungs- und Krümmungsvorticity . . . 165
5.1.2 Zirkulationssatz . . . 166
5.1.3 Vorticitygleichung . . . 167
5.1.3.1 Vorticitygleichung im p-System . . . 169

5.1.4 Barotrope potentielle Vorticity . . . 170
5.2 Divergenz . . . 171
5.2.1 Geschwindigkeits- und Richtungsdivergenz . . . 171
5.2.2 Divergenzgleichung . . . 172
5.2.2.1 Divergenzgleichung im p-System . . . 172
5.3 Potentielle Vorticity . . . 174
5.3.1 Ertel'scher Wirbelsatz . . . 174
5.3.2 Definition und Eigenschaften der PV . . . 175

6 Wellen und Instabilitäten 177
6.1 Kinematik . . . 177
6.2 Begründung der Linearisierung . . . 179
6.2.1 Beispiel: Schallwellen . . . 180
6.3 Barotrope Wellen . . . 181
6.3.1 Sub-Poincaré-Wellen . . . 181
6.3.1.1 Stokes-Drift . . . 182
6.3.2 Poincaré-Wellen . . . 183
6.3.3 Kapillarwellen . . . 184
6.3.4 Inertialwellen . . . 185
6.3.5 Kelvin-Wellen . . . 186
6.3.6 Äquatoriale Kelvin-Wellen . . . 188
6.3.7 Globale Moden . . . 189
6.3.8 Rossby-Wellen . . . 190
6.3.8.1 Anschauliches Verständnis . . . 190
6.4 Barokline Wellen . . . 191
6.4.1 Schichtungswellen . . . 191
6.4.2 Vertikale Moden . . . 193
6.4.3 Barokline Rossby-Wellen . . . 194
6.4.4 Barokline Schwerewellen . . . 201
6.5 Instabilitäten . . . 206
6.5.1 Barotrope Instabilität . . . 206
6.5.2 Barokline Instabilität . . . 207
6.5.3 Kelvin-Helmholtz-Instabilität . . . 208
6.5.3.1 In diskreter Schichtung . . . 208
6.5.3.2 In kontinuierlicher Schichtung . . . 212
6.5.4 Thermische Instabilität . . . 215
6.5.4.1 Pseudopotentielle Temperatur . . . 218
6.5.4.2 Reversibel-pseudopotentielle Temperatur . . . 218
6.5.4.3 CAPE . . . 218

7 Synoptik und Meso–a–Sakla der Extratropen 221
7.1 Quasigeostrophie . . . 221
7.1.1 Tendenzgleichung . . . 221
7.1.2 ω–Gleichung . . . 222
7.2 Semigeostrophie . . . 222
7.3 PV-Denken . . . 222

8 Tropische Dynamik 223
8.1 Skalenanalyse . . . 223
8.2 Zyklogenese . . . 223

9 Turbulenz 225
9.1 Ekman-Transport . . . 227
9.1.1 Spin-down . . . 230
9.2 Konkrete Mittelungsoperatoren . . . 230
9.2.1 Gleitendes Zeitmittel . . . 230
9.2.2 Allgemeines gewichtetes Mittel . . . 231
9.3 Herleitung von Parametrisierungen . . . 231
9.3.1 Beispiel: skalare Diffusion . . . 231
9.3.2 Beispiel: Phasenübergangsraten . . . 232
9.4 Turbulenzspektren . . . 232
9.4.1 Das $k^{-5/3}$–Spektrum . . . 232
9.4.2 Das k^{-3}–Spektrum . . . 232
9.5 Energiekaskade . . . 232

10 Klimatologie der Atmosphäre 233
10.1 Zonal gemittelte Gleichungen . . . 233
10.2 Frontalzonen und Jets . . . 233

11 Ozeanzirkulation 235
11.1 Tide . . . 235
11.2 Windgetriebene Zirkulation . . . 235
11.3 Thermohaline Zirkulation . . . 238
11.4 Windsee . . . 238

III Strahlung und Wolkenmikrophysik 239

12 Strahlungstransport 241
12.1 Berechnung der Streu- und Absorptionskoeffizienten . . . 241
12.2 Approximationen . . . 241
12.2.1 Plan-parallele Atmosphäre . . . 241
12.2.2 Horizontale Entkopplung . . . 241
12.3 Atmosphärische Optik . . . 241

13 Wolkenmikrophysik 243
13.1 Köhler-Formel . . . 243
13.2 Zirkulation um Kondensate . . . 243
13.2.1 Stokes'sche Reibung . . . 243
13.3 Zirkulation in Kondensaten . . . 243

IV Numerik 245

14 Grundkonzepte der Numerik 247
14.1 Grundbegriffe von Diskretisierungen . . . 247
14.2 Finite Differenzen . . . 247
14.3 Die ebene Spektralmethode . . . 248
14.4 Die sphärische Spektralmethode . . . 248
14.5 Spezifika der Geofluidsimulation . . . 248

15 Zeitschrittverfahren 251
15.1 Rein explizite Verfahren . . . 251
15.1.1 Explizites Euler-Verfahren . . . 251
15.1.2 Leapfrog-Verfahren . . . 252
15.1.3 Runge-Kutta-Verfahren . . . 253
15.2 Verfahren mit impliziten Anteilen . . . 253
15.2.1 Implizites Euler-Verfahren . . . 253
15.2.2 Crank-Nicolson-Verfahren . . . 253
15.3 Mischung von Zeitschrittverfahren . . . 254
15.4 Aspekte partieller Differentialgleichungen . . . 254
15.4.1 Das Forward-backward-Verfahren . . . 254
15.5 Energetische Konsistenz im idealen Gas . . . 254
15.5.1 Advektion kinetischer Energie . . . 254
15.5.2 Generalisierte Coriolisterme . . . 255
15.5.3 Evolution der Temperatur . . . 256
15.5.3.1 Zeitentwicklung der inneren Energie . . . 256
15.5.3.2 Energetisch konsistente Zeitentwicklung der Temperatur . . . 256

16 Auswahl einer zukunftsfähigen horizontalen Diskretisierung 259
16.1 Aus Rechnerarchitektur folgende Beschränkungen . . . 259
16.2 Arakawa-Gitter . . . 259
16.3 Skalare Erhaltungseigenschaften auf dem C-Gitter . . . 259
16.4 Geostrophie auf dem C-Gitter . . . 260
16.4.1 Lineare SWEs . . . 260
16.4.2 Nichtlineare SWEs . . . 260
16.5 Probleme eines dreielementigen Erzeugendensystems . . . 260
16.5.1 Folgerungen . . . 266
16.5.1.1 Neuformulierung der Rotation . . . 266
16.5.1.2 Vorzug dex hexagonalen vorm dreieckigen Gitter . . . 266
16.6 Vergleich quasi-uniformer sphärischer C-Gitter . . . 266

17 Datenassimilation 267
17.1 3D-Var . . . 267
17.2 4D-Var . . . 267

18 Entwicklung eines dynamischen Kerns 269
18.1 Horizontales Gitter . . . 269
18.1.1 Konstanten des hexagonalen Gitters . . . 269

18.1.2 Gittergenerierung auf der Einheitskugel . . . 271
18.1.3 Gitteroptimierung . . . 271
18.2 Vertikales Gitter . . . 271
18.2.1 Funktionaldeterminante einer generalisierten Vertikalkoordinate . . . 272
18.3 Felder . . . 273
18.3.1 Skalarfelder . . . 273
18.3.2 Vektorfelder . . . 273
18.3.3 Rotationsfelder . . . 273
18.4 Prognostische Variablen . . . 273
18.5 Diskretisierung der Poisson-Klammern . . . 274
18.5.1 Volumengewichtete Mittelungsoperatoren . . . 274
18.5.2 Die innere-Energie-Klammer . . . 274
18.5.3 Die kinetische-Energie-Klammer . . . 275
18.6 Neuformulierung des PV-Flusses . . . 275
18.7 Zeitschrittverfahren: Variante I . . . 275
18.7.1 Modifikation zur Stabilisierung . . . 276
18.7.1.1 Vertikale Advektion des Horizontalwindes . . . 276
18.7.1.2 Vertikale Advektion des Vertikalwindes . . . 278
18.7.1.3 Vertikaler Sound wave solver . . . 279
18.7.1.4 Vertikale Advektion einer generalisierten Dichte . . . 280
18.8 Zeitschrittverfahren: Variante II . . . 280
18.9 Randbedingungen . . . 280
18.9.1 Obere Randbedingung . . . 280
18.9.2 Untere Randbedingung . . . 280
18.10 Betrachtung der Impulserhaltung . . . 280
18.11 Betrachtung der Drehimpulserhaltung . . . 280
18.12 Betrachtung der EPV-Advektion . . . 280
18.13 Regionaler Modus . . . 280
18.14 Tests . . . 280
18.14.1 JW-Test . . . 280
18.14.1.1 Stationärer Grundzustand . . . 281
18.14.1.2 Störung . . . 281
18.14.2 Steile Orographie . . . 281
18.14.2.1 Ruhende Atmosphäre . . . 281
18.14.2.2 Bewegte Atmosphäre . . . 281
18.14.3 Superzelle . . . 281
18.15 Horizontale Diffusion . . . 281
18.15.1 Temperaturdiffuson . . . 281
18.15.2 Massendiffuson . . . 281
18.15.3 Impulsdiffusion . . . 281
18.15.3.1 Dissipation . . . 281
18.16 Vertikale Diffusion . . . 281
18.16.1 Temperaturdiffuson . . . 281
18.16.2 Massendiffuson . . . 281
18.16.3 Impulsdiffusion . . . 281
18.16.3.1 Dissipation . . . 281
18.17 Turbulenzparametrisierungen . . . 281
18.17.1 Held-Suarez-Test . . . 281
18.18 Rahmen für die Berücksichtigung von Tracern . . . 281
18.18.1 Limiter . . . 281
18.19 Model output statistics (MOS) . . . 281

19 Strahlungstransportalgorithmen 283

V Anhang 285

A Grundlagen 287
A.1 cgs-System . . . 287
A.2 Summen und Reihen . . . 287
A.3 Kombinatorik . . . 288
A.4 Determinanten . . . 290
A.5 Grundfunktionen . . . 291
A.6 Deltadistribution . . . 294
A.7 Integralformeln . . . 295
A.7.1 Residuensatz . . . 297
A.8 Vektorräume . . . 297
A.8.1 Vektorprodukt . . . 299

B Vektoranalysis 301
B.1 Mehrdimensionale Ableitungen . . . 301

B.1.1 Krümmungradius . . . 302
B.1.2 Rechenregeln für Differenzialoperatoren . . . 304
B.2 Differenzialoperatoren unter Koordinatentransformationen . . . 307
B.2.1 Kugelkoordinaten . . . 308
B.2.1.1 Transformation auf geographische Koordinaten . . . 313
B.3 Mehrdimensionale Integralrechnung . . . 315

C Orthogonale Funktionensysteme 317
C.1 Komplexe Exponentialfunktionen . . . 317
C.2 Legendre-Polynome . . . 319
C.3 Hermite-Polynome . . . 328
C.4 Laguerre-Polynome . . . 330
C.5 Kugelflächenfunktionen . . . 332
C.5.1 Produkte . . . 334

D Geodäsie 335
D.1 Konvention über Koordinatensysteme . . . 335
D.1.1 Ruhende Koordinaten . . . 335
D.1.2 Globale Koordinaten . . . 335
D.1.3 Geographische Koordinaten . . . 335
D.2 Sphärische Geometrie . . . 335
D.2.1 Geodäten . . . 335
D.2.2 Vertikale Flächen . . . 337
D.2.3 Volumina . . . 337
D.2.4 Sphärische Dreiecke . . . 337
D.2.5 Sphärische Voronoi-Gitter . . . 337
D.3 Schwerefeld der Erde . . . 337
D.3.1 Eigenschaften von Ellipsen und Ellipsoiden . . . 337
D.3.2 Ellipsoidische Approximation des Schwerefeldes . . . 338
D.3.3 Senkrechte Trajektorien . . . 356
D.4 GREAT-Koordinaten . . . 358
D.4.1 Vertikalkoordinate . . . 359
D.4.2 Zonale Koordinate . . . 359
D.4.3 Meridionale Koordinate . . . 359
D.4.4 Metrische Faktoren . . . 359
D.4.5 Transformation von GREAT-Koordinaten in globale Koordinaten . . . 363
D.4.6 Transformation von globalen Koordinaten in GREAT-Koordinaten . . . 363
D.4.7 Lamb-Transformation in GREAT-Koordinaten . . . 366
D.5 Ellipsoidische Geometrie . . . 366
D.5.1 Ellipsoidische Geodäten . . . 366
D.5.2 Ellipsoidische Dreiecke . . . 366
D.5.3 Ellipsoidische Voronoi-Gitter . . . 366

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 $\rightarrow$ neben einer Größe, dass diese konstant bleibt, ein nach oben gerichteter Pfeil $\uparrow$, dass diese wächst, ein nach unten gerichteter Pfeil $\downarrow$, 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* [6], [5], [7], [8]
- Strömungsmechanik: *Kundu* [15]
- Strahlungstransport: *Chandrasekhar* [4]
- Wolkenmikrophysik: *Pruppacher und Klett* [14]
- Wasseroberflächenwellen: *Massel* [17]

1.2 Skalen

Das Wort *Skalen* bezeichnet Größenordnungen. Ziel der Skalenanalyse ist es, Gleichungen zu vereinfachen. Unterschiedliche Skalen sind durch unterschiedliche Phänomene charaktierisiert, 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	$1,380649 \cdot 10^{-23}$ JK^{-1} [19]
N_A	Avogadro-Konstante	$6,0221409 \cdot 10^{23}$ mol^{-1} = 1 [19]
$R = k_B \cdot N_A$	universelle Gaskonstante	$8,314463$ Jmol^{-1}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	$0,028964420$ kg/mol [16]
M_v	molare Masse von Wasser	$0,01801527$ kg/mol [20]
ε'	M_v/M_d	$0,62197931$
ω	Winkelgeschwindigkeit der Erdrotation	$7,292115 \cdot 10^{-5}$ 1/s [18]
a	Erdradius am Äquator	$6378137,0$ m [12]
$1/\widetilde{f}$	Abplattung	$298,257223563$ [12]
β	*Obliquität* der Erdachse	$23,439279°$ [18]
S_o	Solarkonstante	1361 W/m^2 [2]
Ω	Winkelgeschwindigkeit der Erdrevolution	$1,99099 \cdot 10^{-7}$s^{-1} [2]
M	Masse der Erde	$5,9723 \cdot 10^{24}$ kg [2]
spezifisch	pro Masse	

Tabelle 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$-\alpha-$Skala		$2 \cdot 10^5$ - $2 \cdot 10^6$	$2 \cdot 10^4$ - $2 \cdot 10^5$	tropische Zyklonen, Fronten
Meso$-\beta-$Skala		$2 \cdot 10^4$ - $2 \cdot 10^5$	$2 \cdot 10^3$ - $2 \cdot 10^4$	Land-Seewind-Zirkulation
Meso$-\gamma-$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

Tabelle 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}

Tabelle 1.3: Größenordnungen der synoptischen Skala, vgl. [11].

Abk.	Aussprache	Bedeutung
P	peta	10^{15}
T	terra	10^{12}
G	giga	10^9
M	mega	10^6
k	kilo	10^3
h	hekto	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	piko	10^{-12}
f	femto	10^{-15}
a	atto	10^{-18}

Tabelle 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 [6]. Das wichtigste Axiom ist das *Zweite Newton'sche Axiom:*

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

$$\frac{d\boldsymbol{p}}{dt} = \boldsymbol{F}. \tag{2.1}$$

Der Impuls ist dabei definiert durch

$$\boldsymbol{p} := m\frac{d\boldsymbol{r}}{dt}, \tag{2.2}$$

wobei $\boldsymbol{r} = \boldsymbol{r}(t)$ 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 $\boldsymbol{F}_1$ und $\boldsymbol{F}_2$ die Kräfte auf die Massen aufgrund der paarweisen Wechselwirkung (WW). Dann gilt

$$\boldsymbol{F}_1 = -\boldsymbol{F}_2. \tag{2.3}$$

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 $\boldsymbol{F}_j$ auf einen Massenpunkt wirken, in Glg. (2.1) die Summe dieser Kräfte einzusetzen ist:

$$m\frac{d^2\boldsymbol{r}}{dt^2} = \sum_{j=1}^{N} \boldsymbol{F}_j \tag{2.4}$$

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

$$\boldsymbol{F}_1 \parallel \boldsymbol{r}_1 - \boldsymbol{r}_2 \tag{2.5}$$

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

$$\boldsymbol{R} := \frac{m_1\boldsymbol{r}_1 + m_2\boldsymbol{r}_2}{M} \tag{2.6}$$

mit der Gesamtmasse

$$M := m_1 + m_2. \tag{2.7}$$

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

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

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

$$\boldsymbol{F}_1 = \boldsymbol{F}_1^{(\mathrm{int})} + \boldsymbol{F}_1^{(\mathrm{ext})} \tag{2.9}$$

$$\boldsymbol{F}_2 = \boldsymbol{F}_2^{(\mathrm{int})} + \boldsymbol{F}_2^{(\mathrm{ext})} \tag{2.10}$$

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

$$\boldsymbol{F}_1^{(\mathrm{int})} = -\boldsymbol{F}_2^{(\mathrm{int})}. \tag{2.11}$$

Man erhält also

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

Es gilt also eine Art Zweites Newton'sches Axiom

$$M\frac{d^2\boldsymbol{R}}{dt^2} = \sum_i \boldsymbol{F}_i^{(\mathrm{ext})} \tag{2.13}$$

für die Bewegung der Schwerpunktkoordinate. Man führt analog die Relativkoordinate

$$\boldsymbol{r} := \boldsymbol{r}_2 - \boldsymbol{r}_1 \tag{2.14}$$

ein. Diese erfüllt die Bewegungsgleichung

$$\frac{d^2\boldsymbol{r}}{dt^2} = \frac{d^2\boldsymbol{r}_2}{dt^2} - \frac{d^2\boldsymbol{r}_1}{dt^2} = \frac{\boldsymbol{F}_1}{m_1} - \frac{\boldsymbol{F}_2}{m_2} \Leftrightarrow \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}\frac{d^2\boldsymbol{r}}{dt^2} = \frac{m_2}{m_1 + m_2}\boldsymbol{F}_1 - \frac{m_1}{m_1 + m_2}\boldsymbol{F}_2. \tag{2.15}$$

Nimmt man nun ausschließlich interne WW an, erhält man

$$\mu\frac{d^2\boldsymbol{r}}{dt^2} = \boldsymbol{F}_1^{(\mathrm{int})}. \tag{2.16}$$

Hierbei wurde die reduzierte Masse

$$\mu := \frac{m_1 m_2}{M} \tag{2.17}$$

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

$$M := \sum_{i=1}^{N} m_i \tag{2.18}$$

sowie eine Schwerpunktkoordinate

$$\boldsymbol{R} := \frac{\sum_{i=1}^{N} m_i \boldsymbol{r}_i}{M} \tag{2.19}$$

definieren. Man leitet dies zweimal zeitlich ab und erhält

$$M\frac{d^2}{dt^2}\boldsymbol{R} = \sum_{i=1}^{N} m_i \frac{d^2}{dt^2}\boldsymbol{r}_i = \sum_{i=1}^{N} \boldsymbol{F}_i. \tag{2.20}$$

Es gilt wieder

$$\boldsymbol{F}_i = \boldsymbol{F}_i^{(\mathrm{int})} + \boldsymbol{F}_i^{(\mathrm{ext})} = \sum_{\substack{j=1,\\ j\neq i}}^{N} \boldsymbol{F}_i^{(j)} + \boldsymbol{F}_i^{(\mathrm{ext})}. \tag{2.21}$$

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

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

Hierbei wurde das Dritte Newton'sche Axiom

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

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* $\boldsymbol{L}$ eines Teilchens wird definiert durch

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

Das *Drehmoment* $\boldsymbol{F}$ ist

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

Durch Ableiten von Glg. (2.24) folgt

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

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

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

Für diesen gilt

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

Es wurde wieder das Dritte Newton'sche Axiom eingesetzt sowie die Zusatzaussage, dass die Kraft zwischen zwei Teilchen entlang der Verbindungslinie 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 $\boldsymbol{F} = \boldsymbol{F}(\boldsymbol{r})$, die jedem Punkt $\boldsymbol{r}$ eine dort wirkende Kraft $\boldsymbol{F}(\boldsymbol{r})$ zuordnet. Ein Massenpunkt bewege sich entlang der Trajektorie $\boldsymbol{r} = \boldsymbol{r}(t)$. Dann definiert man die *Arbeit* W, die das Kraftfeld im Zeitintervall $[t_1, t_2]$ am Massenpunkt leistet, durch

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

Mit dem Zweiten Newton'schen Axiom und partieller Integration folgt

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

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

$$\boxed{E_{\text{kin}} := \frac{1}{2} m \boldsymbol{v}^2, \tag{2.31}}$$

folgt

$$W = \Delta E_{\text{kin}}. \tag{2.32}$$

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

$$\boldsymbol{F} = -\nabla U. \tag{2.33}$$

In diesem Fall gilt nach Glg. (B.51)

$$\nabla \times \boldsymbol{F} = 0, \tag{2.34}$$

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

$$\int_{\partial A} \boldsymbol{F} \cdot d\boldsymbol{s} = 0 \tag{2.35}$$

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

$$E := E_{\text{kin}} + U, \tag{2.36}$$

so ist diese Größe erhalten:

$$\begin{aligned} \frac{dE}{dt} &= \frac{dE_{\text{kin}}}{dt} + \frac{dU}{dt} = \frac{1}{2} m 2 \frac{d\boldsymbol{r}}{dt} \cdot \frac{d^2\boldsymbol{r}}{dt^2} + \nabla U \cdot \frac{d\boldsymbol{r}}{dt} \\ &= \left(m \frac{d^2\boldsymbol{r}}{dt^2} + \nabla U \right) \cdot \frac{d\boldsymbol{r}}{dt} = (\boldsymbol{F} + \nabla U) \cdot \frac{d\boldsymbol{r}}{dt} = (-\nabla U + \nabla U) \cdot \frac{d\boldsymbol{r}}{dt} = 0 \end{aligned} \tag{2.37}$$

$$\boxed{\Rightarrow \frac{dE}{dt} = 0 \tag{2.38}}$$

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 *Zwangsbedingungen*. Besteht das System aus genau einem Teilchen mit der Trajektorie $\boldsymbol{r} = \boldsymbol{r}(t)$, so kann man eine Zwangsbedingung in der Form

$$g(\boldsymbol{r}, t) = 0 \tag{2.39}$$

schreiben. g ist dabei irgendein Skalarfeld. Die Bedingung $g = 0$ 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 Zwangsbedingung*, alle anderen Zwangsbedingungen heißen nichtholonom. Dies wäre zum Beispiel der Fall, wenn g eine Funktion von $\frac{d\boldsymbol{r}}{dt}$ wäre. Explizit zeitabhängige Zwangsbedingungen heißen *rheonom*, während zeitunabhängige Zwangsbedingungen *skleronom* genannt werden. Allgemein hat man N Teilchen, in diesem Fall kann man R Zwangsbedingungen aufstellen

$$g_\alpha(\boldsymbol{r}_1, \ldots, \boldsymbol{r}_N, t) = 0 \tag{2.40}$$

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 $\boldsymbol{Z}$ kann man also ansetzen

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

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

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

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

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

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 $\sum_{a=1}^{2} \lambda_a(t) \nabla g_a(\boldsymbol{r}, t)$ ein allgemeiner Ansatz für eine Kraft senkrecht zur Trajektorie, also für eine allgemeine Zwangskraft. Man hat nun zusammen mit $g_1(\boldsymbol{r}, t) = g_2(\boldsymbol{r}, t) = 0$ 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 $g_j(\boldsymbol{r}, t) = 0$ gegeben, kann man als Bewegungsgleichungen notieren

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

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

$$f = 3N - R \tag{2.45}$$

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

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

Die zweite Bedingung lässt sich formal ausdrücken durch

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

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

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

Summiert man dies über n, folgt

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

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

$$x := (x_1, \ldots, x_n) \tag{2.49}$$
$$\dot{x} := (\dot{x}_1, \ldots, \dot{x}_n) \tag{2.50}$$
$$q := (q_1, \ldots, q_n) \tag{2.51}$$
$$\dot{q} := (\dot{q}_1, \ldots, \dot{q}_n) \tag{2.52}$$

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

$$x_n = x_n (q, t) \tag{2.53}$$

total nach der Zeit ab:

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

Es folgt

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

Für die kinetische Energie T gilt

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

Hier setzt man Glg. (2.54) ein:

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

Aus Glg. (2.56) folgt

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

Weiterhin gilt

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

Leitet man dies total nach der Zeit ab, erhält man

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

Im letztem Term wurde die folgende Identität ausgenutzt:

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

Man definiert nun *verallgemeinerte Kräfte:*

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

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

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

Man setzt für die Kräfte

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

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

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

Jetzt kann man schreiben

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

Damit folgt die Gleichung

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

Man definiert die *Lagrange-Funktion* L durch

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

Damit erhält man

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

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

2.1.3 Hamilton-Formalismus

Man definiert zunächst die *kanonischen Impulse* durch

$$p_i := \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \tag{2.70}$$

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

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

Die *Hamilton-Funktion* H wird definiert durch

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

Die *Hamilton'schen Gleichungen* oder auch *kanonische Gleichungen* folgen durch partielles Differenzieren:

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

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

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

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

2.1.3.1 Poisson-Klammer

Zwei beliebige Größen F, K können nur von (q, p, t) abhängen. Man definiert die *Poisson-Klammer* $\{F, K\}$ von F und K durch

$$\{F, K\} := \sum_{i=1}^{f} \left(\frac{\partial F}{\partial q_i} \frac{\partial K}{\partial p_i} - \frac{\partial F}{\partial p_i} \frac{\partial K}{\partial q_i} \right). \tag{2.76}$$

Hieraus folgen unmittelbar

$$\{F, K\} = -\{K, F\}, \tag{2.77}$$

$$\{F, F\} = 0. \tag{2.78}$$

Im Hamilton-Formalismus gelten

$$\frac{\partial q_i}{\partial q_j} = \delta_{i,j}, \tag{2.79}$$

$$\frac{\partial q_i}{\partial p_j} = 0, \tag{2.80}$$

$$\frac{\partial q_i}{\partial t} = 0, \tag{2.81}$$

$$\frac{\partial p_i}{\partial q_j} = 0, \tag{2.82}$$

$$\frac{\partial p_i}{\partial p_j} = \delta_{i,j}, \tag{2.83}$$

$$\frac{\partial p_i}{\partial t} = 0. \tag{2.84}$$

Weiterhin sind

$$\{F, q_j\} = -\frac{\partial F}{\partial p_j}, \tag{2.85}$$

$$\{F, p_j\} = \frac{\partial F}{\partial q_j}. \tag{2.86}$$

Hieraus folgen weiter

$$\{q_i, q_j\} = 0, \tag{2.87}$$

$$\{p_i, p_j\} = 0, \tag{2.88}$$

$$\{p_i, q_j\} = -\delta_{i,j}. \tag{2.89}$$

Für die totale Zeitableitung von F erhält man nun

$$\frac{dF}{dt} = \sum_{i=1}^{f} \frac{\partial F}{\partial q_i}\dot{q}_i + \sum_{i=1}^{f} \frac{\partial F}{\partial p_i}\dot{p}_i + \frac{\partial F}{\partial t} = \sum_{i=1}^{f} \frac{\partial F}{\partial q_i}\frac{\partial H}{\partial p_i} - \sum_{i=1}^{f} \frac{\partial F}{\partial p_i}\frac{\partial H}{\partial q_i} + \frac{\partial F}{\partial t} \tag{2.90}$$

$$\Leftrightarrow \frac{dF}{dt} = \{F, H\} + \frac{\partial F}{\partial t}. \tag{2.91}$$

Dies impliziert

$$\frac{dH}{dt} = \frac{\partial H}{\partial t}. \tag{2.92}$$

Die Hamilton-Funktion ist also genau dann konstant, wenn sie nicht explizit von der Zeit abhängt. Aus Glg. (2.91) folgen die Glg.en (2.73) - (2.74) in der Form

$$\dot{p}_i = \{p_i, H\}, \tag{2.93}$$
$$\dot{q}_i = \{q_i, H\}. \tag{2.94}$$

2.2 Elektrodynamik

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

$$\boldsymbol{F} = q\left(\boldsymbol{E} + \frac{\boldsymbol{v}}{c} \times \boldsymbol{B}\right). \tag{2.95}$$

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

$$\nabla \cdot \boldsymbol{E} = 4\pi\varrho, \tag{2.96}$$
$$\nabla \cdot \boldsymbol{B} = 0, \tag{2.97}$$
$$\nabla \times \boldsymbol{E} + \frac{1}{c}\frac{\partial \boldsymbol{B}}{\partial t} = 0, \tag{2.98}$$
$$\nabla \times \boldsymbol{B} - \frac{1}{c}\frac{\partial \boldsymbol{E}}{\partial t} = \frac{4\pi}{c}\boldsymbol{j}. \tag{2.99}$$

Ladungen und Ströme sind also Quellen des elektromagnetischen Feldes. Die Glg.en (2.95) - (2.99) 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 $\boldsymbol{E}, \boldsymbol{B}$. Für jedes der Felder $\boldsymbol{E}$ und $\boldsymbol{B}$ 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:

$$\int_{\partial V} \boldsymbol{E} \cdot d\boldsymbol{n} = 4\pi Q \tag{2.100}$$
$$\int_{\partial V} \boldsymbol{B} \cdot d\boldsymbol{n} = 0 \tag{2.101}$$
$$\int_{\partial A} \boldsymbol{E} \cdot d\boldsymbol{s} + \frac{1}{c}\frac{\partial}{\partial t}\int_{A} \boldsymbol{B} \cdot d\boldsymbol{n} = 0 \tag{2.102}$$
$$\int_{\partial A} \boldsymbol{B} \cdot d\boldsymbol{s} - \frac{1}{c}\frac{\partial}{\partial t}\int_{A} \boldsymbol{E} \cdot d\boldsymbol{n} = \frac{4\pi}{c} I \tag{2.103}$$

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. (2.97) existiert ein Vektorfeld $\boldsymbol{A}$ mit

$$\boldsymbol{B} = \nabla \times \boldsymbol{A}, \tag{2.104}$$

das Feld $\boldsymbol{A}$ nennt man *das Vektorpotential*. Damit ist Glg. (2.97) nach Glg. (B.52) erfüllt. Wegen der dritten Maxwell-Gleichung Glg. (2.98) gilt

$$\nabla \times \left(\boldsymbol{E} + \frac{1}{c} \frac{\partial \boldsymbol{A}}{\partial t} \right) = 0. \tag{2.105}$$

Es existiert also ein Potential φ mit

$$\boldsymbol{E} = -\nabla \varphi - \frac{1}{c} \frac{\partial \boldsymbol{A}}{\partial t}, \tag{2.106}$$

φ nennt man *das skalare Potential*. Damit ist Glg. (2.98) erfüllt. Die Definitionen der Potentiale erhält man also aus den homogenen Maxwell-Gleichungen. Setzt man die bisherigen Festlegungen in Glg. (2.99) ein, erhält man mit Glg. (B.58)

$$-\Delta \boldsymbol{A} + \nabla \left(\nabla \cdot \boldsymbol{A} \right) + \frac{1}{c} \nabla \frac{\partial \varphi}{\partial t} + \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \boldsymbol{A}}{\partial t^2} = \frac{4\pi}{c} \boldsymbol{j}. \tag{2.107}$$

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

$$\varphi \to \varphi - \frac{1}{c} \frac{\partial \varphi'}{\partial t} \tag{2.108}$$

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

$$\nabla \cdot \boldsymbol{A} + \frac{1}{c} \frac{\partial \varphi}{\partial t} = 0 \tag{2.109}$$

wird die vierte MWG zu

$$\Delta \boldsymbol{A} - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \boldsymbol{A}}{\partial t^2} = -\frac{4\pi}{c} \boldsymbol{j}. \tag{2.110}$$

Die erste MWG wird zu

$$-\Delta \varphi - \frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} \nabla \cdot \boldsymbol{A} = 4\pi \varrho \Leftrightarrow \Delta \varphi - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \varphi}{\partial t^2} = -4\pi \varrho. \tag{2.111}$$

Damit sind vier lineare, unabhängige Differenzialgleichungen für φ, $\boldsymbol{A}$ gegeben, die die Maxwell-Gleichungen ersetzen. Über die Glg.en (2.106) und (2.104) kann hieraus das EMF $(\boldsymbol{E}, \boldsymbol{B})$ bestimmt werden.

Bildet man die partielle Zeitableitung von Glg. (2.96), multipliziert die Divergenz von Glg. (2.99) mit c und addiert die beiden resultierenden Gleichungen, erhält man

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

$$\boxed{\Leftrightarrow \frac{\partial \varrho}{\partial t} + \nabla \cdot \boldsymbol{j} = 0.} \tag{2.112}$$

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 $(\boldsymbol{E}, \boldsymbol{B})$ hergeleitet werden. Setzt man für das Potential $U = U(\boldsymbol{r}, \dot{\boldsymbol{r}}, t)$ an

$$U(\boldsymbol{r}, \dot{\boldsymbol{r}}, t) = q\varphi(\boldsymbol{r}, t) - \frac{q}{c}\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r}, t) \cdot \dot{\boldsymbol{r}}, \tag{2.113}$$

so folgt mit Glg. (2.64)

$$\begin{aligned} \boldsymbol{F}(\boldsymbol{r}, \dot{\boldsymbol{r}}, t) &\overset{(B.56)}{=} -q\nabla\varphi + \frac{q}{c}(\dot{\boldsymbol{r}} \cdot \nabla)\boldsymbol{A} + \frac{q}{c}\dot{\boldsymbol{r}} \times \boldsymbol{B} - \frac{q}{c}\frac{D}{Dt}\boldsymbol{A} = q\left(-\nabla\varphi - \frac{1}{c}\frac{\partial \boldsymbol{A}}{\partial t} + \frac{1}{c}\dot{\boldsymbol{r}} \times \boldsymbol{B}\right) \\ &= q\left(\boldsymbol{E} + \frac{\dot{\boldsymbol{r}}}{c} \times \boldsymbol{B}\right). \end{aligned} \tag{2.114}$$

Es ergibt sich also die Lorentz-Kraft nach Glg. (2.95), dies zeigt die Richtigkeit des Ansatzes Glg. (2.113). Also lautet die Lagrange-Funktion eines Teilchens im EMF

$$L(\boldsymbol{r}, \dot{\boldsymbol{r}}, t) = \frac{m}{2}\dot{\boldsymbol{r}}^2 - q\varphi(\boldsymbol{r}, t) + \frac{q}{c}\dot{\boldsymbol{r}} \cdot \boldsymbol{A}(\boldsymbol{r}, t) \tag{2.115}$$

Daraus folgt für die kanonischen Impulse

$$p_i = \frac{\partial L}{\partial \dot{x}_i} = m\dot{x}_i + \frac{q}{c}A_i \Rightarrow \dot{x}_i = \frac{1}{m}\left(p_i - \frac{q}{c}A_i\right). \tag{2.116}$$

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

$$\begin{aligned} H(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{p}, t) &= \frac{1}{m}\left(\boldsymbol{p} - \frac{q}{c}\boldsymbol{A}\right) \cdot \boldsymbol{p} - \frac{m}{2}\frac{1}{m^2}\left(\boldsymbol{p} - \frac{q}{c}\boldsymbol{A}\right)^2 + q\varphi(\boldsymbol{r}, t) - \frac{q}{cm}\left(\boldsymbol{p} - \frac{q}{c}\boldsymbol{A}\right) \cdot \boldsymbol{A}(\boldsymbol{r}, t) \\ &= \frac{1}{m}\left(\boldsymbol{p} - \frac{q}{c}\boldsymbol{A}\right)\left(\boldsymbol{p} - \frac{1}{2}\left(\boldsymbol{p} - \frac{q}{c}\boldsymbol{A}\right) - \frac{q}{c}\boldsymbol{A}\right) + q\varphi(\boldsymbol{r}, t) = \frac{1}{2m}\left(\boldsymbol{p} - \frac{q}{c}\boldsymbol{A}\right)^2 + q\varphi(\boldsymbol{r}, t). \end{aligned} \tag{2.117}$$

2.2.1 Elektromagnetische Wellen

Im Vakuum lauten die MWGen

$$\nabla \cdot \boldsymbol{E} = 0, \tag{2.118}$$

$$\nabla \cdot \boldsymbol{B} = 0, \tag{2.119}$$

$$\nabla \times \boldsymbol{E} + \frac{1}{c}\frac{\partial \boldsymbol{B}}{\partial t} = 0, \tag{2.120}$$

$$\nabla \times \boldsymbol{B} - \frac{1}{c}\frac{\partial \boldsymbol{E}}{\partial t} = 0. \tag{2.121}$$

Wendet man $\nabla\times$ auf die Glg.en (2.120) und (2.121) an, erhält man

$$-\Delta\boldsymbol{E} + \frac{1}{c}\frac{\partial}{\partial t}\nabla \times \boldsymbol{B} = 0 \Leftrightarrow \Delta\boldsymbol{E} - \frac{1}{c^2}\frac{\partial^2}{\partial t^2}\boldsymbol{E} = 0, \tag{2.122}$$

$$-\Delta\boldsymbol{B} - \frac{1}{c}\frac{\partial}{\partial t}\nabla \times \boldsymbol{E} = 0 \Leftrightarrow \Delta\boldsymbol{B} - \frac{1}{c^2}\frac{\partial^2}{\partial t^2}\boldsymbol{B} = 0, \tag{2.123}$$

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

$$\boldsymbol{E} = \boldsymbol{E}_0 e^{i(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r} - \omega t)}, \tag{2.124}$$

$$\boldsymbol{B} = \boldsymbol{B}_0 e^{i(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r} - \omega t + \varphi)}. \tag{2.125}$$

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 $\boldsymbol{E}_0, \boldsymbol{B}_0$, sowie an der Phasenverschiebung φ. Aus den Glg.en (2.118) und (2.119) folgt $\boldsymbol{E}_0, \boldsymbol{B}_0 \perp \boldsymbol{k}$. Elektromagnetische Wellen sind also Transversalwellen. Man stellt weiterhin mit Glg. (B.55) fest

$$\nabla \times \boldsymbol{E} = -i\boldsymbol{E} \times \boldsymbol{k}. \tag{2.126}$$

Außerdem gelten

$$\nabla \times \boldsymbol{B} = -i\boldsymbol{B} \times \boldsymbol{k}, \tag{2.127}$$
$$\frac{\partial \boldsymbol{E}}{\partial t} = -i\omega \boldsymbol{E}, \tag{2.128}$$
$$\frac{\partial \boldsymbol{B}}{\partial t} = -i\omega \boldsymbol{B}. \tag{2.129}$$

Setzt man dies in die Glg.en (2.120) - (2.121) ein, erhält man

$$-i\boldsymbol{E} \times \boldsymbol{k} - \frac{1}{c} i\omega \boldsymbol{B} = 0, \tag{2.130}$$
$$-i\boldsymbol{B} \times \boldsymbol{k} + \frac{1}{c} i\omega \boldsymbol{E} = 0. \tag{2.131}$$

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

$$\boldsymbol{E} \times \boldsymbol{k} = -k\boldsymbol{B}. \tag{2.132}$$

Hieraus folgen

$$\boldsymbol{E} \cdot \boldsymbol{B} = 0, \tag{2.133}$$
$$\varphi = 0. \tag{2.134}$$

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

$$E = B \tag{2.135}$$

und somit

$$E_0 = B_0. \tag{2.136}$$

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 $\boldsymbol{r}_i$. Die Arbeit, die das elektromagnetische Feld an diesem System leistet, ist nach Glg. (2.95) gegeben durch

$$\begin{aligned} W &= \sum_{i=1}^{N} \int \boldsymbol{F}(\boldsymbol{r}_i) \cdot \frac{d\boldsymbol{r}_i}{dt} dt = \sum_{i=1}^{N} \int q_i \left(\boldsymbol{E}(\boldsymbol{r}_i) + \frac{1}{c} \frac{d\boldsymbol{r}_i}{dt} \times \boldsymbol{B} \right) \cdot \frac{d\boldsymbol{r}_i}{dt} dt \\ &= \sum_{i=1}^{N} \int q_i \boldsymbol{E}(\boldsymbol{r}_i) \cdot \frac{d\boldsymbol{r}_i}{dt} dt. \end{aligned} \tag{2.137}$$

Daraus folgt

$$\frac{dW}{dt} = \sum_{i=1}^{N} q_i \boldsymbol{E}(\boldsymbol{r}_i) \cdot \frac{d\boldsymbol{r}_i}{dt}. \tag{2.138}$$

Hier kann man die Stromdichte

$$\boldsymbol{j}(\boldsymbol{r}, t) = \sum_{i=1}^{N} q_i \boldsymbol{v}_i \delta(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}_i) \tag{2.139}$$

einsetzen:

$$\frac{dW}{dt} = \int_{\mathbb{R}^3} \boldsymbol{j} \cdot \boldsymbol{E} d^3 r \tag{2.140}$$

Dies kann man mittels der Maxwell-Gleichungen umformen,

$$\boldsymbol{j} \cdot \boldsymbol{E} = \frac{c}{4\pi} \boldsymbol{E} \cdot \nabla \times \boldsymbol{B} - \frac{1}{4\pi} \boldsymbol{E} \cdot \frac{\partial \boldsymbol{E}}{\partial t}. \tag{2.141}$$

Mit Glg. (B.59) erhält man

$$\boldsymbol{j} \cdot \boldsymbol{E} = -\frac{c}{4\pi} \nabla \cdot (\boldsymbol{E} \times \boldsymbol{B}) + \frac{c}{4\pi} \boldsymbol{B} \cdot \nabla \times \boldsymbol{E} - \frac{1}{8\pi} \frac{\partial \boldsymbol{E}^2}{\partial t} = -\frac{c}{4\pi} \nabla \cdot (\boldsymbol{E} \times \boldsymbol{B}) - \frac{1}{8\pi} \frac{\partial}{\partial t} \left(\boldsymbol{E}^2 + \boldsymbol{B}^2 \right). \tag{2.142}$$

Nun definiert man die Energiedichte w des elektromagnetischen Feldes durch

$$\boxed{w(\boldsymbol{r}, t) := \frac{1}{8\pi} \left(\boldsymbol{E}^2 + \boldsymbol{B}^2 \right)} \tag{2.143}$$

sowie die Strahlungsflussdichte als

$$\boxed{\boldsymbol{S}(\boldsymbol{r}, t) := \frac{c}{4\pi} (\boldsymbol{E} \times \boldsymbol{B}).} \tag{2.144}$$

Damit folgt

$$\boxed{\frac{\partial w}{\partial t} + \nabla \cdot \boldsymbol{S} = -\boldsymbol{j} \cdot \boldsymbol{E}.} \tag{2.145}$$

Glg. (2.145) ist das *Poynting-Theorem*. Dies kann man sich noch veranschaulichen. Man integriert dazu Glg. (2.145) über ein zeitunabhängiges Volumen V:

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_V w(\boldsymbol{r}, t) \, d^3 r + \int_{\partial V} \boldsymbol{S} \cdot d\boldsymbol{n} = -\frac{dW}{dt}. \tag{2.146}$$

Ist Glg. (2.143) die Energiedichte des elektromagnetischen Feldes, so ist

$$U = \int_V w(\boldsymbol{r}, t) \, d^3 r \tag{2.147}$$

die Energie desselben. Somit folgt

$$\frac{dU}{dt} + \frac{dW}{dt} = -\int_{\partial V} \boldsymbol{S} \cdot d\boldsymbol{n}. \tag{2.148}$$

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

$$\varphi = \int_0^\infty \varphi_\lambda d\lambda. \tag{2.149}$$

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/m^2	i. A. vektorielle Größe, Strahlungsenergie, die pro Zeit durch eine bestimmte Fläche tritt
spektrale Strahlungsflussdichte	W/m^3	Strahlungsflussdichte pro Wellenlänge
Strahldichte	W/m^2	Strahlungsflussdichte pro Raumwinkel
spektrale Strahldichte	W/m^3	Strahldichte pro Wellenlänge
Energiedichte	J/m^3	Energie, die pro Volumen in Form elektromagnetischer Wellen vorhanden ist
spektrale Energiedichte	J/m^4	Energiedichte pro Wellenlänge

Tabelle 2.1: Zusammenfasssung 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 Galileitransformation. Diese ist daher falsch und durch die *Lorentz-Transformation* zu ersetzen, welche für Geschwindigkeiten $v \ll c$ die Galileitransformation als Grenzfall enthalten muss. Dies ist die Aussage der *Speziellen Relativitätstheorie*.

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

$$\left(x^{(a)}\right) := \begin{pmatrix} ct \\ x \\ y \\ z \end{pmatrix}, \tag{2.150}$$

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:

$$\begin{aligned} \left(x_1^{(a)}\right) &= \begin{pmatrix} ct_1 \\ x_1 \\ y_1 \\ z_1 \end{pmatrix}, \\ \left(x_2^{(a)}\right) &= \begin{pmatrix} ct_2 \\ x_2 \\ y_2 \\ z_2 \end{pmatrix}. \end{aligned} \tag{2.151}$$

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

$$s_{1,2}^2 := c^2 (t_2 - t_1)^2 - (x_2 - x_1)^2 - (y_2 - y_1)^2 - (z_2 - z_1)^2 . \tag{2.152}$$

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

$$s_{1,2}^2 = s_{1,2}'^2. \tag{2.153}$$

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

$$s_{1,2}^2 = s_{1,2}'^2 = 0, \tag{2.154}$$

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

$$s_{1,2}^2 = (c^2 - v^2)(t_2 - t_1) = (c^2 - v'^2)(t_2' - t_1') = s_{1,2}'^2 \tag{2.155}$$

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

$$\eta := \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}. \tag{2.156}$$

Damit kann man den Abstand zweier Ereignisse ds linear entwickeln:

$$ds^2 = c^2dt^2 - dx^2 - dy^2 - dz^2 = \sum_{\alpha=0}^{3}\sum_{\beta=0}^{3} \eta_{\alpha,\beta} dx^{(\alpha)} dx^{(\beta)} =: \eta_{\alpha,\beta} dx^{(\alpha)} dx^{(\beta)} \tag{2.157}$$

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

$$x'^{(\alpha)} = \Lambda^{(\alpha)}_{\beta} x^{(\beta)} + b^{(\alpha)}. \tag{2.158}$$

Hieraus folgt

$$dx'^{(\alpha)} = \Lambda^{(\alpha)}_{\beta} dx^{(\beta)}. \tag{2.159}$$

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

$$\begin{aligned} ds'^2 &= \eta_{\alpha,\beta} dx'^{(\alpha)} dx'^{(\beta)} = \eta_{\alpha,\beta} dx'^{(\alpha)} \Lambda^{(\beta)}_{\delta} dx^{(\delta)} = \eta_{\alpha,\beta} \Lambda^{(\alpha)}_{\gamma} dx^{(\gamma)} \Lambda^{(\beta)}_{\delta} dx^{(\delta)} \\ &= \eta_{\alpha,\beta} \Lambda^{(\alpha)}_{\gamma} \Lambda^{(\beta)}_{\delta} dx^{(\gamma)} dx^{(\delta)} = \eta_{\gamma.\delta} dx^{(\gamma)} dx^{(\delta)} = ds^2. \end{aligned} \tag{2.160}$$

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

$$\eta_{\gamma,\delta} = \eta_{\alpha,\beta} \Lambda^{(\alpha)}_{\gamma} \Lambda^{(\beta)}_{\delta}. \tag{2.161}$$

Dies bedeutet

$$\eta_{\gamma,\delta} = \sum_{\alpha,\beta=0}^{3} \eta_{\alpha,\beta} \Lambda^{(\alpha)}_{\gamma} \Lambda^{(\beta)}_{\delta} = \sum_{\alpha=0}^{3} \Lambda^{(\alpha)}_{\gamma} \sum_{\beta=0}^{3} \eta_{\alpha,\beta} \Lambda^{(\beta)}_{\delta} = \sum_{\alpha=0}^{3} \left(\Lambda^{(\gamma)}_{\alpha}\right)^T \sum_{\beta=0}^{3} \eta_{\alpha,\beta} \Lambda^{(\beta)}_{\delta} = \left(\Lambda^T \eta \Lambda\right)_{\gamma,\delta}, \tag{2.162}$$

also

$$\Lambda^T \eta \Lambda = \eta. \tag{2.163}$$

Für die oben beschriebene Anordnung zweier KS IS und IS' gilt $\boldsymbol{b} = 0$. 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

$$\overleftrightarrow{\Lambda} = \begin{pmatrix} \Lambda^{(0)}_{0} & \Lambda^{(0)}_{1} & 0 & 0 \\ \Lambda^{(1)}_{0} & \Lambda^{(1)}_{1} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}. \tag{2.164}$$

Weiterhin gilt für den Ursprung von IS'

$$x^{(0)} = ct \quad \leftrightarrow \quad x'^{(0)} = ct', \tag{2.165}$$

$$x^{(1)} = vt \quad \leftrightarrow \quad x'^{(1)} = 0, \tag{2.166}$$

$$x^{(2)} = 0 \quad \leftrightarrow \quad x'^{(2)} = 0, \tag{2.167}$$

$$x^{(3)} = 0 \quad \leftrightarrow \quad x'^{(3)} = 0. \tag{2.168}$$

Aus Glg. (2.163) folgt

$$\begin{aligned}
\begin{pmatrix} \Lambda_0^{(0)} & \Lambda_0^{(1)} \\ \Lambda_1^{(0)} & \Lambda_1^{(1)} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Lambda_0^{(0)} & \Lambda_1^{(0)} \\ \Lambda_0^{(1)} & \Lambda_1^{(1)} \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \\
\Rightarrow \begin{pmatrix} \Lambda_0^{(0)} & -\Lambda_0^{(1)} \\ \Lambda_1^{(0)} & -\Lambda_1^{(1)} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Lambda_0^{(0)} & \Lambda_1^{(0)} \\ \Lambda_0^{(1)} & \Lambda_1^{(1)} \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \\
\Rightarrow \begin{pmatrix} \left(\Lambda_0^{(0)}\right)^2 - \left(\Lambda_0^{(1)}\right)^2 & \Lambda_0^{(0)}\Lambda_1^{(0)} - \Lambda_0^{(1)}\Lambda_1^{(1)} \\ \Lambda_0^{(0)}\Lambda_1^{(0)} - \Lambda_0^{(1)}\Lambda_1^{(1)} & \left(\Lambda_0^{(1)}\right)^2 - \left(\Lambda_1^{(1)}\right)^2 \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \qquad (2.169)
\end{aligned}$$

Daraus folgen die drei Bedingungen

$$\left(\Lambda_0^{(0)}\right)^2 - \left(\Lambda_0^{(1)}\right)^2 = 1, \qquad (2.170)$$

$$\left(\Lambda_0^{(1)}\right)^2 - \left(\Lambda_1^{(1)}\right)^2 = -1, \qquad (2.171)$$

$$\Lambda_0^{(0)}\Lambda_1^{(0)} - \Lambda_0^{(1)}\Lambda_1^{(1)} = 0. \qquad (2.172)$$

Man kann für zwei reelle Zahlen ψ, φ ansetzen

$$\Lambda_0^{(1)} = -\sinh\left(\psi\right), \qquad (2.173)$$

$$\Lambda_1^{(0)} = -\sinh\left(\varphi\right). \qquad (2.174)$$

Es gelten also

$$\Lambda_0^{(0)} = \pm\cosh\left(\psi\right), \qquad (2.175)$$

$$\Lambda_1^{(1)} = \pm\cosh\left(\varphi\right). \qquad (2.176)$$

Für $\psi, \varphi \to 0$ soll die identische Transformation herauskommen, also schließt man an dieser Stelle das Minuszeichen aus. Die dritte Bedingung lautet

$$\cosh\left(\psi\right)\sinh\left(\varphi\right) = \cosh\left(\varphi\right)\sinh\left(\psi\right), \qquad (2.177)$$

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

$$\begin{pmatrix} \Lambda_0^{(0)} & \Lambda_1^{(0)} \\ \Lambda_0^{(1)} & \Lambda_1^{(1)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cosh\left(\psi\right) & -\sinh\left(\psi\right) \\ -\sinh\left(\psi\right) & \cosh\left(\psi\right) \end{pmatrix}. \qquad (2.178)$$

Somit gilt

$$x'^{(1)} = 0 = -\sinh\left(\psi\right) ct + \cosh\left(\psi\right) x^{(1)} = \left[-\sinh\left(\psi\right) c + \cosh\left(\psi\right) v\right] t. \qquad (2.179)$$

Hieraus folgt

$$\tanh\left(\psi\right) = \frac{v}{c} \Rightarrow \psi = \operatorname{artanh}\left(\frac{v}{c}\right). \qquad (2.180)$$

ψ nennt man *Rapidität*. Man definiert weiterhin

$$\gamma := \cosh\left(\psi\right) = \frac{1}{\sqrt{1 - \tanh\left(\psi\right)^2}} = \frac{1}{\sqrt{1 - v^2/c^2}}, \qquad (2.181)$$

dann gilt

$$\sinh\left(\psi\right) = \gamma\frac{v}{c}. \qquad (2.182)$$

Die Lorentz-Transformation ist in diesem Fall also durch

$$\begin{pmatrix} ct' \\ x' \\ y' \\ z' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \gamma & -\gamma\frac{v}{c} & 0 & 0 \\ -\gamma\frac{v}{c} & \gamma & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} ct \\ x \\ y \\ z \end{pmatrix} \tag{2.183}$$

festgelegt.

2.2.4 Relativistische Behandlung des elektromagnetischen Feldes

Die Gleichungen der Potentiale Glg.en (2.110) und (2.111) sowie die Lorenz-Eichung (2.109) werden hier noch einmal zusammengefasst:

$$\left(\Delta - \frac{1}{c^2}\frac{\partial^2}{\partial t^2}\right)\varphi = -4\pi\varrho, \tag{2.184}$$

$$\left(\Delta - \frac{1}{c^2}\frac{\partial^2}{\partial t^2}\right)\boldsymbol{A} = -4\pi\boldsymbol{j}, \tag{2.185}$$

$$\frac{1}{c}\frac{\partial\varphi}{\partial t} + \nabla\cdot\boldsymbol{A} = 0. \tag{2.186}$$

Nun wird der 4-Vektor

$$\left(A^{(a)}\right) := \begin{pmatrix} \varphi \\ A_x \\ A_y \\ A_z \end{pmatrix} \tag{2.187}$$

definiert. Definiere weiter

$$\left(j^{(a)}\right) := \begin{pmatrix} \varrho \\ j_x \\ j_y \\ j_z \end{pmatrix} \tag{2.188}$$

Man definiert als Kurzschreibweise für partielle Ableitungen

$$\partial_0 = \partial^{(0)} := \frac{1}{c}\frac{\partial}{\partial t}, \tag{2.189}$$

$$\partial^{(i)} := \frac{\partial}{\partial x_i} = -\frac{\partial}{\partial x^{(i)}} = -\partial_i \tag{2.190}$$

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

$$\Box := \partial_\beta\partial^{(\beta)} = \frac{1}{c^2}\frac{\partial^2}{\partial t^2} - \Delta \tag{2.191}$$

kann man dies als

$$\Box A^{(a)} = \frac{4\pi}{c}j^{(a)} \tag{2.192}$$

notieren. Die Lorenz-Eichung schreibt sich damit als

$$\partial_a A^{(a)} = 0. \tag{2.193}$$

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

$$F^{(a,\beta)} = \partial^{(a)}A^{(\beta)} - \partial^{(\beta)}A^{(a)}. \tag{2.194}$$

Diese Matrix ist antisymmetrisch:

$$\overleftrightarrow{F}^{(\beta,a)} = \partial^{(\beta)}A^{(a)} - \partial^{(a)}A^{(\beta)} = -\left(\partial^{(a)}A^{(\beta)} - \partial^{(\beta)}A^{(a)}\right) = -F^{(a,\beta)} \tag{2.195}$$

An dieser Stelle sei weiterhin an

$$\boldsymbol{E} = -\nabla\varphi - \frac{1}{c}\frac{\partial \boldsymbol{A}}{\partial t}, \tag{2.196}$$

$$\boldsymbol{B} = \nabla \times \boldsymbol{A} \tag{2.197}$$

erinnert. Es gilt

$$\begin{aligned} F^{(\alpha,\beta)} &= \begin{pmatrix} 0 & \frac{1}{c}\frac{\partial A_x}{\partial t} + \frac{\partial\varphi}{\partial x} & \frac{1}{c}\frac{\partial A_y}{\partial t} + \frac{\partial\varphi}{\partial y} & \frac{1}{c}\frac{\partial A_z}{\partial t} + \frac{\partial\varphi}{\partial z} \\ -\frac{\partial\varphi}{\partial x} - \frac{1}{c}\frac{\partial A_x}{\partial t} & 0 & \frac{\partial}{\partial y} - \frac{\partial}{\partial x} & \frac{\partial}{\partial z} - \frac{\partial}{\partial x} \\ -\frac{\partial\varphi}{\partial y} - \frac{1}{c}\frac{\partial A_y}{\partial t} & \frac{\partial}{\partial x} - \frac{\partial}{\partial y} & 0 & \frac{\partial}{\partial z} - \frac{\partial}{\partial y} \\ -\frac{\partial\varphi}{\partial z} - \frac{1}{c}\frac{\partial A_z}{\partial t} & \frac{\partial}{\partial x} - \frac{\partial}{\partial z} & \frac{\partial}{\partial y} - \frac{\partial}{\partial z} & 0 \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} 0 & -E_x & -E_y & -E_z \\ E_x & 0 & -B_z & B_y \\ E_y & B_z & 0 & -B_x \\ E_z & -B_y & B_x & 0 \end{pmatrix}. \end{aligned} \tag{2.198}$$

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 $(\boldsymbol{E}, \boldsymbol{B})$ und $(\boldsymbol{E}', \boldsymbol{B}')$ bezeichnet. Die Feldstärketensoren transformieren sich mit Glg. (2.183) wie

$$\begin{aligned} F' &= \Lambda F \Lambda^T = \Lambda \begin{pmatrix} 0 & -E_x & -E_y & -E_z \\ E_x & 0 & -B_z & B_y \\ E_y & B_z & 0 & -B_x \\ E_z & -B_y & B_x & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \gamma & -\gamma\frac{v}{c} & 0 & 0 \\ -\gamma\frac{v}{c} & \gamma & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} \gamma & -\gamma\frac{v}{c} & 0 & 0 \\ -\gamma\frac{v}{c} & \gamma & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \gamma E_x\frac{v}{c} & -\gamma E_x & -E_y & -E_z \\ \gamma E_x & -\gamma E_x\frac{v}{c} & -B_z & B_y \\ \gamma E_x - \gamma B_z\frac{v}{c} & -\gamma E_y\frac{v}{c} + \gamma B_z & 0 & -B_x \\ \gamma E_z + \gamma B_y\frac{v}{c} & -\gamma E_z\frac{v}{c} - \gamma B_y & B_x & 0 \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} 0 & -\gamma^2 E_x + \gamma^2 E_x\frac{v^2}{c^2} & -\gamma E_y + B_z\gamma\frac{v}{c} & -E_z\gamma - B_y\gamma\frac{v}{c} \\ -\gamma^2 E_x\frac{v^2}{c^2} + \gamma^2 E_x & 0 & E_y\gamma\frac{v}{c} - B_z\gamma & E_z\gamma\frac{v}{c} + \gamma B_y \\ \gamma E_x - \gamma B_z\frac{v}{c} & -\gamma E_y\frac{v}{c} + \gamma B_z & 0 & -B_x \\ \gamma E_z + \gamma B_y\frac{v}{c} & -\gamma E_z\frac{v}{c} - \gamma B_y & B_x & 0 \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} 0 & -E_x & -\gamma E_y + B_z\gamma\frac{v}{c} & -E_z\gamma - B_y\gamma\frac{v}{c} \\ E_x & 0 & E_y\gamma\frac{v}{c} - B_z\gamma & E_z\gamma\frac{v}{c} + \gamma B_y \\ \gamma E_x - \gamma B_z\frac{v}{c} & -\gamma E_y\frac{v}{c} + \gamma B_z & 0 & -B_x \\ \gamma E_z + \gamma B_y\frac{v}{c} & -\gamma E_z\frac{v}{c} - \gamma B_y & B_x & 0 \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} 0 & -E'_x & -E'_y & -E'_z \\ E'_x & 0 & -B'_z & B'_y \\ E'_y & B'_z & 0 & -B'_x \\ E'_z & -B'_y & B'_x & 0 \end{pmatrix}. \end{aligned} \tag{2.199}$$

Hieraus folgen

$$E'_x = E_x, \tag{2.200}$$

$$E'_y = \gamma\left(E_y - B_z\frac{v}{c}\right), \tag{2.201}$$

$$E'_z = \gamma\left(E_z + B_y\frac{v}{c}\right), \tag{2.202}$$

$$B'_x = B_x, \tag{2.203}$$

$$B'_y = \gamma\left(B_y + E_z\frac{v}{c}\right), \tag{2.204}$$

$$B'_z = \gamma\left(B_z - E_y\frac{v}{c}\right). \tag{2.205}$$

Dies kann man vektoriell verallgemeinern zu

$$\boldsymbol{E}'_{\parallel} = \boldsymbol{E}_{\parallel}, \tag{2.206}$$
$$\boldsymbol{B}'_{\parallel} = \boldsymbol{B}_{\parallel}, \tag{2.207}$$
$$\boldsymbol{E}'_{\perp} = \gamma\left(\boldsymbol{E}_{\perp} + \frac{\boldsymbol{v}}{c} \times \boldsymbol{B}\right), \tag{2.208}$$
$$\boldsymbol{B}'_{\perp} = \gamma\left(\boldsymbol{B}_{\perp} - \frac{\boldsymbol{v}}{c} \times \boldsymbol{E}\right), \tag{2.209}$$

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

$$\boldsymbol{E}_{\parallel} = \boldsymbol{E}'_{\parallel}, \tag{2.210}$$
$$\boldsymbol{B}_{\parallel} = \boldsymbol{B}'_{\parallel}, \tag{2.211}$$
$$\boldsymbol{E}_{\perp} = \gamma\left(\boldsymbol{E}'_{\perp} - \frac{\boldsymbol{v}}{c} \times \boldsymbol{B}'\right), \tag{2.212}$$
$$\boldsymbol{B}_{\perp} = \gamma\left(\boldsymbol{B}'_{\perp} + \frac{\boldsymbol{v}}{c} \times \boldsymbol{E}'\right). \tag{2.213}$$

2.3 Quantenmechanik

Hier werden nur die Grundlagen der Quantenmechanik (QM) erklärt, für eine ausführlichere Darstellung s. [7]. In der QM wird die Bahnkurve $\boldsymbol{r}(t)$ durch die Wellenfunktion $\psi(\boldsymbol{r}, t)$ ersetzt, um den Zustand eines Teilchens ohne Spin festzulegen. ψ ist i. A. komplexwertig und $\left|\psi(\boldsymbol{r}, t)\right|^2$ ist die Wahrscheinlichkeitsdichte, das Teilchen zur Zeit t bei $\boldsymbol{r}$ anzutreffen. Für Funktionen $f, g : \mathbb{R}^3 \to \mathbb{C}$ definiert man das unitäre Produkt $\langle|\rangle$ durch

$$\langle f|g\rangle := \int_{\mathbb{R}^3} f^* g d^3 r. \tag{2.214}$$

Da das Teilchen irgendwo ist, gilt

$$\langle\psi|\psi\rangle = 1. \tag{2.215}$$

Es gilt die *Schrödinger-Gleichung (SG)*

$$\hat{H}\psi(\boldsymbol{r}, t) = i\hbar\frac{\partial\psi(\boldsymbol{r}, t)}{\partial t} \tag{2.216}$$

mit dem *Hamilton-Operator*

$$\hat{H} := -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(\boldsymbol{r}). \tag{2.217}$$

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

$$\boldsymbol{p} = \hbar\boldsymbol{k} \tag{2.218}$$

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

$$E = \hbar\omega \tag{2.219}$$

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

$$\psi(\boldsymbol{r}, t) = \psi_0 \exp\left(i\left(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r} - \omega t\right)\right) = \psi_0 \exp\left(\frac{i}{\hbar}\left(\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r} - Et\right)\right) \tag{2.220}$$

notiert werden. Hierbei stellt man fest, dass

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(\boldsymbol{r}, t) = E\psi(\boldsymbol{r}, t) \tag{2.221}$$

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

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi(\boldsymbol{r},t) = \frac{p^2}{2m}\psi(\boldsymbol{r},t) = E_{\text{kin}}\psi(\boldsymbol{r},t) \tag{2.222}$$

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

$$-i\hbar\nabla\psi(\boldsymbol{r},t) = \boldsymbol{p}\psi(\boldsymbol{r},t) \tag{2.223}$$

definiert man

$$\hat{\boldsymbol{p}} := -i\hbar\nabla \tag{2.224}$$

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

$$\psi(\boldsymbol{r},t) = \psi(\boldsymbol{r})\exp\left(-i\frac{E}{\hbar}t\right), \tag{2.225}$$

zu

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t} = E. \tag{2.226}$$

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

$$\hat{H}\psi(\boldsymbol{r},t) = E\psi(\boldsymbol{r},t). \tag{2.227}$$

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

2.3.1 Freies Teilchen

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

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi = i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}. \tag{2.228}$$

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

$$\psi(\boldsymbol{r},t) = \psi_0\exp(i(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}-\omega t)) = \psi_0\exp\left(\frac{i}{\hbar}(\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r}-Et)\right), \tag{2.229}$$

so folgt daraus die Dispersionsrelation

$$\frac{\hbar^2\boldsymbol{k}^2}{2m} = E = \hbar\omega \Leftrightarrow \omega(\boldsymbol{k}) = \frac{\hbar\boldsymbol{k}^2}{2m}. \tag{2.230}$$

Glg. (2.230) nennt man *Dispersionsrelation*. Die Phasengeschwindigkeit c_{ph} einer Materiewelle wird somit zu

$$c_{\text{ph}} = \frac{\omega}{k} = \frac{\hbar k}{2m}, \tag{2.231}$$

während für die Gruppengeschwindigkeit c_{gr} gilt

$$c_{\text{gr}} = \sum_{i=1}^{3}\frac{\partial\omega}{\partial k_i}\boldsymbol{e}_i = \frac{\hbar\boldsymbol{k}}{m}. \tag{2.232}$$

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

$$V(x) := \begin{cases} 0, & 0 \leq x \leq L, \\ \infty, & \text{sonst} \end{cases} \tag{2.233}$$

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

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(x)\,. \tag{2.234}$$

Die Randbedingungen ergeben sich aus der Tatsache

$$\psi(x) = 0 \text{ für } x \notin (0, L)\,. \tag{2.235}$$

Man macht den Ansatz

$$\psi(x) = C\exp(ik_1 x) + C_2\exp(ik_2 x) \tag{2.236}$$

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

$$\psi(0) = 0 \tag{2.237}$$

folgt

$$C = -C_2, \tag{2.238}$$

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

$$\psi(x) = C\left(\exp(ik_1 x) - \exp(ik_2 x)\right). \tag{2.239}$$

Aus der Randbedingung

$$\psi(L) = 0 \tag{2.240}$$

folgt

$$\exp(ik_1 L) = \exp(ik_2 L)\,. \tag{2.241}$$

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

$$k_1 L = k_2 L + 2n\pi \tag{2.242}$$

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

$$k_1 - k_2 = \frac{2n\pi}{L}. \tag{2.243}$$

Setze also

$$k_1 = n_1\frac{\pi}{L}, \tag{2.244}$$

$$k_2 = n_2\frac{\pi}{L} \tag{2.245}$$

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

$$\begin{aligned} 1 &\overset{!}{=} \int_0^L \left|\psi(x)\right|^2 dx = |C|^2 \int_0^L 2 - \exp\left(i\left(k_1 - k_2\right)x\right) - \exp\left(i\left(k_2 - k_1\right)x\right) dx \\ &\Leftrightarrow \quad |C|^2\, 2L \Leftrightarrow |C| = \frac{1}{\sqrt{2L}}. \end{aligned} \tag{2.246}$$

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

$$\boxed{\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2L}} \left[\exp\left(in_1 \frac{\pi}{L} x\right) - \exp\left(in_2 \frac{\pi}{L} x\right)\right]. \qquad (2.247)}$$

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

$$\boxed{E_{n_1,n_2} = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\pi^2}{L^2} \left(n_1^2 + n_2^2\right). \qquad (2.248)}$$

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

$$V(x) = \begin{cases} V_0, & 0 \leq x \leq L, \\ 0, & \text{sonst} \end{cases} \qquad (2.249)$$

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 $L \to \infty$. Ein Index 1 stehe von nun an für den Bereich $x < 0$, während ein Index 2 von nun an für den Bereich $x \geq 0$ stehe. Das Potential $V(x)$ sei gegeben durch

$$V(x) = \begin{cases} 0, & x < 0 \\ V_0, & x \geq 0 \end{cases} \qquad (2.250)$$

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

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi_1(x) = E\psi_1(x), \qquad (2.251)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi_2(x) = (E - V_0)\psi_2(x) \qquad (2.252)$$

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

$$\psi_1(x) = C\exp(ikx) + C_2\exp(-ikx) \qquad (2.253)$$

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

$$\psi_2(x) = C_3\exp(-\lambda x) \qquad (2.254)$$

mit $C_3, \lambda > 0$.

Für ψ gilt die stationäre Schrödinger-Gleichung, also hat die zweite Ableitung von ψ die gleichen Stetigkeitseigenschaften wie das Potential V. In diesem Fall ist die zweite Ableitung unstetig, jedoch ist ψ immernoch stetigdifferenzierbar. Dadurch erhält man folgende zwei Anschlussbedingungen:

$$C + C_2 = C_3, \qquad (2.255)$$

$$ikC - ikC_2 = -\lambda C_3 \qquad (2.256)$$

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

$$\begin{aligned} ikC - ikC_2 &= -\lambda C - \lambda C_2 \Leftrightarrow C_2 (\lambda - ik) = -C (\lambda + ik) \\ \Leftrightarrow C_2 &= -\frac{\lambda + ik}{\lambda - ik} = -\exp(2\varphi) \end{aligned} \tag{2.257}$$

mit

$$\varphi = \arctan\left(\frac{k}{\lambda}\right). \tag{2.258}$$

Damit folgt

$$C_3 = C - \exp(2\varphi). \tag{2.259}$$

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

$$\frac{\hbar^2 k^2}{2m} = E \Rightarrow k = \frac{1}{\hbar}\sqrt{2mE} \tag{2.260}$$

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

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\lambda^2 = E - V_0 \Rightarrow \lambda = \frac{1}{\hbar}\sqrt{2m(V_0 - E)} \tag{2.261}$$

Die Lösungen werden noch einmal zusammengefasst:

$$\boxed{\begin{aligned} \psi_1(x) &= C\exp\left(\frac{i}{\hbar}\sqrt{2mE}x\right) - \exp\left(2\varphi - \frac{i}{\hbar}\sqrt{2mE}x\right), && (2.262) \\ \psi_2(x) &= \left(C - \exp(2\varphi)\right)\exp\left(-\frac{1}{\hbar}\sqrt{2m(V_0 - E)}x\right). && (2.263) \end{aligned}}$$

C 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 $E > V_0 =$ const. existiert ein kontinuierliches Energiespektrum.
- Im Fall $E < V_0 =$ const. kann das Teilchen in Form eines exponentiellen Abfalls in diesen Bereich hineinpropagieren.
- 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

$$\hat{H}_x = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + V_x(x), \tag{2.264}$$

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

$$\hat{H}_x \psi_{n_x}(x) = E_{n_x}\psi_{n_x}(x) \tag{2.265}$$

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

$$V(x, y, z) = V_x(x) + V_y(y) + V_z(z), \tag{2.266}$$

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.

$$\hat{H} = \hat{H}_x + \hat{H}_y + \hat{H}_z \tag{2.267}$$

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

$$\psi(x,y,z) = \psi_{n_x}(x)\,\psi_{n_y}(y)\,\psi_{n_z}(z)\,, \tag{2.268}$$

dann gilt

$$\begin{aligned} \hat{H}\psi(x,y,z) &= \left(\hat{H}_x + \hat{H}_y + \hat{H}_z\right)\psi_{n_x}(x)\,\psi_{n_y}(y)\,\psi_{n_z}(z) \\ &= \left(E_{n_x} + E_{n_y} + E_{n_z}\right)\psi_{n_x}(x)\,\psi_{n_y}(y)\,\psi_{n_z}(z)\,. \end{aligned} \tag{2.269}$$

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

$$\hat{H}\psi(x,y,z) = E\psi(x,y,z)\,. \tag{2.270}$$

Mit diesen Erkenntnissen kann man beispielsweise leicht die Schrödinger-Gleichung für ein Teilchen in einem dreidimensionalen harmonischen Oszillator 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

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2}m\omega^2x^2, \tag{2.271}$$

also lautet die stationäre Schrödinger-Gleichung

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\psi'' + \frac{1}{2}m\omega^2x^2\psi = E\psi. \tag{2.272}$$

Dieses Eigenwertproblem ist zu lösen. Man kann dies schreiben als

$$\psi'' - \frac{x^2}{b^4}\psi = -\frac{2mE}{\hbar^2}\psi \tag{2.273}$$

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

$$\frac{d}{dx} = \frac{du}{dx}\frac{d}{du} = \frac{1}{b}\frac{d}{du}, \tag{2.274}$$

$$\frac{d^2}{dx^2} = \frac{1}{b^2}\frac{d^2}{du^2}. \tag{2.275}$$

Die stationäre SG wird mit der Ersetzung

$$\psi(x) \to \psi(u) \tag{2.276}$$

zu

$$\psi'' - u^2\psi = -\frac{2E}{\hbar\omega}\psi. \tag{2.277}$$

In der Unendlichkeit wird dies zu

$$\psi'' - u^2\psi \approx 0. \tag{2.278}$$

Hierfür wird der Ansatz

$$f(u) = \exp\left(-\frac{u^2}{2\sigma^2}\right) \tag{2.279}$$

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

$$\frac{d^2}{du^2}\exp\left(-\frac{u^2}{2\sigma^2}\right) = \frac{d}{du}\left(-\frac{u}{\sigma^2}\exp\left(-\frac{u^2}{2\sigma^2}\right)\right) \approx \frac{u^2}{\sigma^4}\exp\left(-\frac{u^2}{2\sigma^2}\right) \tag{2.280}$$

für große u. Setzt man dies ein, erhält man

$$\frac{u^2}{\sigma^4} - u^2 \stackrel{!}{=} 0 \Rightarrow \sigma = 1. \tag{2.281}$$

Man macht für ψ den Ansatz

$$\psi(u) = P(u)\exp\left(-\frac{u^2}{2}\right). \tag{2.282}$$

Die zweite Ableitung ergibt sich zu

$$\frac{d^2\psi}{du^2} = \frac{d}{du}\left[P'\exp\left(-\frac{u^2}{2}\right) - uP\exp\left(-\frac{u^2}{2}\right)\right] = \exp\left(-\frac{u^2}{2}\right)\left[P'' - 2uP' - P + u^2P\right]. \tag{2.283}$$

Glg. (2.277) wird mit $\widetilde{E} = \frac{2E}{\hbar\omega}$ zu

$$P'' - 2uP' - P = -\widetilde{E}P \Leftrightarrow P'' - 2uP' + P\left(\widetilde{E} - 1\right) = 0. \tag{2.284}$$

Für $P(u)$ wird ein Potenzreihenansatz

$$P(u) = \sum_{i=0}^{\infty} a_i u^i \tag{2.285}$$

gemacht. Damit ergeben sich

$$P'(u) = \sum_{i=0}^{\infty} i a_i u^{i-1} \tag{2.286}$$

und

$$P''(u) = \sum_{i=0}^{\infty} (i-1)\, i a_i u^{i-2} = \sum_{i=0}^{\infty} (i+2)(i+1)\, a_{i+2} u^i. \tag{2.287}$$

Setzt man dies in Glg. (2.284) ein, erhält man

$$\sum_{i=0}^{\infty} (i+2)(i+1)\, a_{i+2} u^i - 2\sum_{i=0}^{\infty} i a_i u^i + \left(\widetilde{E} - 1\right)\sum_{i=0}^{\infty} a_i u^i = 0. \tag{2.288}$$

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

$$(i+2)(i+1)\, a_{i+2} - 2i a_i + \left(\widetilde{E} - 1\right) a_i = 0, \tag{2.289}$$

also erhält man für die a_i die Rekursionsformel

$$a_{i+2} = a_i \frac{2i - \widetilde{E} + 1}{(i+2)(i+1)}. \tag{2.290}$$

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

$$\boxed{2n - \widetilde{E} + 1 = 0 \Leftrightarrow \frac{2E}{\hbar\omega} = 1 + 2n \Leftrightarrow E = E_n = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right).} \tag{2.291}$$

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

$$a_i = a_{i+2}\frac{(i+2)(i+1)}{2(i-n)}, \tag{2.292}$$

durch a_n und $a_{n+1} = 0$ sind die Polynome $P_n(u)$ festgelegt, sie heißen *Hermite-Polynome* $H_n(u)$, s. Absch. C.3.

Es gilt die Normierungsbedingung

$$\int_{-\infty}^{\infty} \left|\psi(y)\right|^2 dy = \int_{-\infty}^{\infty} c_n^2 \exp\left(-\frac{y^2}{b^2}\right) H_n^2\left(\frac{y}{b}\right) dy = \int_{-\infty}^{\infty} c_n^2 b \exp\left(-u^2\right) H_n^2(u)\, du = 1, \tag{2.293}$$

also gilt mit Glg. (C.116)

$$c_n^2 b = \frac{1}{\sqrt{\pi}\, 2^n n!}. \tag{2.294}$$

Die Eigenzustände des harmonischen Oszillators sind also

$$\boxed{\psi_n(u) = c_n H_n(u) \exp\left(-\frac{u^2}{2}\right)} \tag{2.295}$$

mit

$$b = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}, \tag{2.296}$$

$$c_n = \frac{1}{\sqrt{b\sqrt{\pi}\, 2^n n!}}, \tag{2.297}$$

$$u = \frac{x}{b}. \tag{2.298}$$

Zum Schluss werden noch zwei Relationen festgehalten, die aus den Glg.en (C.115) und (C.114) folgen:

$$u\psi_n(u) = \sqrt{\frac{n}{2}}\psi_{n-1}(u) + \sqrt{\frac{n+1}{2}}\psi_{n+1}(u) \tag{2.299}$$

$$\frac{d\psi_n}{du}(u) = \sqrt{2n}\psi_{n-1}(u) - u\psi_n(u) = \sqrt{\frac{n}{2}}\psi_{n-1}(u) - \sqrt{\frac{n+1}{2}}\psi_{n+1}(u) \tag{2.300}$$

2.3.6 Hilbert-Raum und Operatoren

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

2.3.6.1 Hilbert-Raum

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

$$\langle f|g\rangle := \int_{\mathbb{R}^3} f^* g\, d^3r. \tag{2.301}$$

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

$$\langle f_i | f_j \rangle = \delta_{i,j} \tag{2.302}$$

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

$$\psi(\boldsymbol{r}, t) = \sum_{i=1}^{\infty} a_i(t) f_i(\boldsymbol{r}). \tag{2.303}$$

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

$$\langle f_k | \psi \rangle = \int_{\mathbb{R}^3} f_k^\star(\boldsymbol{r}) \left(\sum_{i=1}^{\infty} a_i f_i(\boldsymbol{r}) \right) d^3 r = \sum_{i=1}^{\infty} a_i \int_{\mathbb{R}^3} f_k^\star(\boldsymbol{r}) f_i(\boldsymbol{r}) \, d^3 r = \sum_{i=1}^{\infty} a_i \delta_{ki} = a_k, \tag{2.304}$$

also

$$a_i = \langle f_i | \psi \rangle. \tag{2.305}$$

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

$$\psi(\boldsymbol{r}, t) = \sum_{i=1}^{\infty} a_i(t) f_i(\boldsymbol{r}) = \sum_{i=1}^{\infty} \tilde{a}_i(t) \widetilde{f_i}(\boldsymbol{r}). \tag{2.306}$$

In diesem Fall wird der Zustand $\psi(\boldsymbol{r}, t)$ 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 $\psi(\boldsymbol{r})$ durch $N \geq 1$ Quantenzahlen $n_1, \dots, n_N$ festlegen, $\psi(\boldsymbol{r}, t) = \psi(n_1, \dots, n_N, \boldsymbol{r}, t)$. Es gibt also unendlich viele Möglichkeiten, einen Zustand eines Teilchens festzulegen. Will man sich nicht auf eine solche Möglichkeit festlegen, schreibt man einfach

$$|\psi\rangle. \tag{2.307}$$

Dies können zum Beispiel spektrale Koeffizienten a_i sein $|\psi\rangle = (a_i)$ oder eine Quantenzahl n wie beim eindimensionalen harmonischen Oszillator, $|\psi\rangle = |n\rangle$. 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

$$\langle \psi | := |\psi\rangle^\star. \tag{2.308}$$

Das bedeutet: Wenn für den Zustand $|\psi\rangle$ im Ortsraum gilt $|\psi\rangle = \psi(\boldsymbol{r}, t)$, dann gilt $\langle \psi | = \psi^\star(\boldsymbol{r}, t)$. 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

$$|\chi\rangle = \hat{O} |\psi\rangle \tag{2.309}$$

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

$$\left\langle \psi | \hat{O} \chi \right\rangle = \left\langle \hat{O}^+ \psi | \chi \right\rangle, \tag{2.310}$$

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

$$\overleftrightarrow{A}^{+} = \overleftrightarrow{A}^{-1} \tag{2.311}$$

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

$$\overleftrightarrow{A}^{-1}\overleftrightarrow{A} = 1 \tag{2.312}$$

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

$$A^{+} = (A^{\star})^{T}. \tag{2.313}$$

Schreibt man für einen Zustand

$$|\psi\rangle = \sum_{i=1}^{\infty} a_i |\psi_i\rangle, \tag{2.314}$$

so gilt

$$\begin{aligned} 1 &= \langle\psi|\psi\rangle = \left\langle \sum_{i=1}^{\infty} a_i^{\star} f_i^{\star}(\boldsymbol{r}) \middle| \sum_{j=1}^{\infty} a_j f_j(\boldsymbol{r}) \right\rangle \\ &= \int_{\mathbb{R}^3} \left(\sum_{i=1}^{\infty} a_i^{\star} f_i^{\star}(\boldsymbol{r}) \right) \left(\sum_{j=1}^{\infty} a_j f_j(\boldsymbol{r}) \right) d^3r = \sum_{i,j=1}^{\infty} \int_{\mathbb{R}^3} a_i^{\star} f_i^{\star}(\boldsymbol{r})\, a_j f_j(\boldsymbol{r})\, d^3r \\ &= \sum_{i,j=1}^{\infty} a_i^{\star} a_j \delta_{i,j} = \sum_{i=1}^{\infty} |a_i|^2 . \end{aligned} \tag{2.315}$$

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

$$P_i = \left|\langle f_i|\psi\rangle\right|^2 = |a_i|^2 . \tag{2.316}$$

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

$$\langle E\rangle = \sum_{i=1}^{\infty} P_i E_i = \sum_{i=1}^{\infty} \left|\langle f_i|\psi\rangle\right|^2 E_i. \tag{2.317}$$

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

$$\begin{aligned} \langle o\rangle &= \sum_{i=1}^{\infty} P_i o_i = \sum_{i=1}^{\infty} \left|\langle f_i|\psi\rangle\right|^2 o_i = \sum_{i=1}^{\infty} \langle\psi|f_i\rangle o_i \langle f_i|\psi\rangle = \sum_{i=1}^{\infty} \langle\psi|o_i f_i\rangle a_i \\ &= \sum_{i=1}^{\infty} \int_{\mathbb{R}^3} \psi^{\star} o_i a_i f_i d^3r = \int_{\mathbb{R}^3} \psi^{\star} \sum_{i=1}^{\infty} o_i a_i f_i d^3r = \int_{\mathbb{R}^3} \psi^{\star} \sum_{i=1}^{\infty} \hat{O} a_i f_i d^3r \\ &= \int_{\mathbb{R}^3} \psi^{\star} \hat{O} \sum_{i=1}^{\infty} a_i f_i d^3r = \int_{\mathbb{R}^3} \psi^{\star} \hat{O} \psi d^3r. \end{aligned} \tag{2.318}$$

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

$$\langle\hat{O}\rangle = \int_{\mathbb{R}^3} \psi^{\star} \hat{O} \psi d^3r = \left\langle \psi|\hat{O}|\psi \right\rangle . \tag{2.319}$$

Man entwickele 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

$$|\chi\rangle := \hat{O}|\psi\rangle = \sum_{i=1}^{\infty} b_i f_i(\boldsymbol{r}) \tag{2.320}$$

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

$$b_k = \sum_{l=1}^{\infty} O_{k,l}\langle f_l|\psi\rangle = \sum_{l=1}^{\infty} O_{k,l}\delta_{l,j} = O_{k,j}. \tag{2.321}$$

$|b_k|^2$ ist die Wahrscheinlichkeit, das System nach Wirken des Operators im Zustand f_k anzutreffen, $\left|O_{k,j}\right|^2$ 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

$$O_{i,j} = \left\langle f_i \middle| \hat{O} \middle| f_j \right\rangle. \tag{2.322}$$

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

$$\hat{O}|\psi\rangle = x|\psi\rangle. \tag{2.323}$$

Wähle nun eine Orthonormalbasis $\left(|\psi_1\rangle, \dots\right)$ von H und entwickele $\hat{O}$ und $|\psi\rangle$ bezüglich dieser Basis, dann wird das Problem zu

$$O\boldsymbol{a} = x\boldsymbol{a} \tag{2.324}$$

mit $\boldsymbol{a} = (a_1, \dots)^T$ 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

$$p(x) := \det(O - x) \tag{2.325}$$

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

$$\langle \hat{O}f|g\rangle = \langle f|\hat{O}g\rangle, \tag{2.326}$$

also ausgeschrieben

$$\int_{\mathbb{R}^3} \left(\hat{O}f\right)^\star g d^3r = \int_{\mathbb{R}^3} f^\star \left(\hat{O}g\right) d^3r. \tag{2.327}$$

Hermite'sche Operatoren sind also selbstadjungiert,

$$\hat{O}^+ = \hat{O}. \tag{2.328}$$

Nun wird gezeigt, dass die Eigenwerte hermitescher 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

$$a^\star\langle\psi|\psi\rangle \quad = \quad \langle\hat{O}\psi|\psi\rangle = \langle\psi|\hat{O}\psi\rangle = a\langle\psi|\psi\rangle, \tag{2.329}$$

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

$$\begin{aligned} \left\langle \psi \left| \hat{O} \right| \psi \right\rangle^\star &= \left(\int_{\mathbb{R}^3} \psi^\star \hat{O} \psi d^3 r \right)^\star = \int_{\mathbb{R}^3} \psi \left(\hat{O} \psi \right)^\star d^3 r \\ &= \int_{\mathbb{R}^3} \left(\hat{O} \psi \right)^\star \psi d^3 r = \left\langle \hat{O} \psi | \psi \right\rangle = \left\langle \psi \left| \hat{O} \right| \psi \right\rangle \end{aligned} \tag{2.330}$$

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

$$\hat{O}|\psi\rangle = a|\psi\rangle, \tag{2.331}$$

$$\hat{O}|\chi\rangle = \beta|\chi\rangle. \tag{2.332}$$

Dann gilt

$$\beta\langle\psi|\chi\rangle = \langle\psi|\hat{O}\chi\rangle = \langle\hat{O}\psi|\chi\rangle = a\langle\psi|\chi\rangle, \tag{2.333}$$

also ist

$$\langle\psi|\chi\rangle = 0. \tag{2.334}$$

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

$$\int \left(-\frac{d}{dx}\varphi \right)^\star \psi dx = \int -\frac{d}{dx}\varphi^\star \psi dx = \int \varphi^\star \frac{d}{dx}\psi dx, \tag{2.335}$$

also ist

$$\left(\frac{d}{dx} \right)^+ = -\frac{d}{dx}. \tag{2.336}$$

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

$$\int \left((-1)^n \frac{d^n}{dx^n}\varphi \right)^\star \psi dx = (-1)^n \int \frac{d^n}{dx^n}\varphi^\star \psi dx = (-1)^n (-1)^n \int \varphi^\star \frac{d^n\psi}{dx^n} dx, \tag{2.337}$$

also ist

$$\left(\frac{d^n}{dx^n} \right)^+ = (-1)^n \frac{d^n}{dx^n}. \tag{2.338}$$

Wegen

$$\begin{aligned} \int (\Delta\varphi)^\star \psi d^3 r &= \int \left(\sum_{i=1}^{3} \frac{d^2}{dx_i^2}\varphi^\star \right) \psi d^3 r = \sum_{i=1}^{3} \int \left(\frac{d^2\varphi^\star}{dx_i^2} \right) \psi d^3 r \\ &= \sum_{i=1}^{3} \int \varphi^\star \left(\frac{d^2\psi}{dx_i^2} \right) d^3 r = \int \varphi^\star \Delta\psi d^3 r \end{aligned} \tag{2.339}$$

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

$$\begin{aligned} \int \left(\left(-1 - x\frac{d}{dx} \right) \varphi \right)^\star \psi dx &= -\int \varphi^\star \psi dx - \int \left(x\frac{d}{dx}\varphi^\star \right) \psi dx \\ &= -\int \varphi^\star \psi dx \qquad + \int \varphi^\star \left(\psi + x\frac{d}{dx}\psi \right) dx = \int \varphi^\star x\frac{d}{dx}\psi dx \end{aligned} \tag{2.340}$$

ist

$$\left(x\frac{d}{dx}\right)^{+} = -1 - x\frac{d}{dx}. \tag{2.341}$$

Der *Vernichtungsoperatpr* $\hat{a}$ ist definiert durch

$$\hat{a} := \frac{1}{\sqrt{2}}\left(x + \frac{\partial}{\partial x}\right). \tag{2.342}$$

Es gilt

$$\int \left(\frac{1}{\sqrt{2}}\left(x - \frac{\partial}{\partial x}\right)\varphi\right)^{\star} \psi dx = \int \frac{1}{\sqrt{2}}\varphi^{\star} x\psi + \frac{1}{\sqrt{2}}\varphi^{\star}\frac{\partial\psi}{\partial x}dx = \int \varphi^{\star}\frac{1}{\sqrt{2}}\left(x + \frac{\partial}{\partial x}\right)\psi dx, \tag{2.343}$$

das heißt

$$\hat{a}^{+} = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(x - \frac{\partial}{\partial x}\right), \tag{2.344}$$

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

$$\hat{N} := \frac{1}{2}\left(x^2 - \frac{\partial^2}{\partial x^2}\right). \tag{2.345}$$

Damit gilt

$$\begin{aligned} &\int \left(\frac{1}{2}\left(x^2 - \frac{\partial^2}{\partial x^2}\right)\varphi\right)^{\star} \psi dx = \int \frac{1}{2}x^2\varphi^{\star}\psi - \frac{1}{2}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\varphi^{\star}\psi dx \\ = &\int \varphi^{\star}\frac{1}{2}\left(x^2 - \frac{\partial^2}{\partial x^2}\right)\psi dx = \int \varphi^{\star}\hat{N}\psi dx, \end{aligned} \tag{2.346}$$

also ist

$$\hat{N}^{+} = \hat{N}. \tag{2.347}$$

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 $\alpha\hat{A} + \beta\hat{B}$ mit $\alpha, \beta \in \mathbb{R}$ hermitesch Seien nämlich $f, g \in H$. Dann gilt

$$\left\langle f \middle| \left(\alpha\hat{A} + \beta\hat{B}\right) g\right\rangle = \left\langle f \middle| \alpha\hat{A}g\right\rangle + \left\langle f \middle| \beta\hat{B}g\right\rangle = \left\langle \alpha\hat{A}f \middle| g\right\rangle + \left\langle \beta\hat{B}f \middle| g\right\rangle = \left\langle \left(\alpha\hat{A} + \beta\hat{B}\right) f \middle| g\right\rangle. \tag{2.348}$$

Weiterhin gilt in diesem Fall

$$\left\langle f \middle| \hat{A}\hat{B}g\right\rangle = \left\langle \hat{A}f \middle| \hat{B}g\right\rangle = \left\langle \hat{B}\hat{A}f \middle| g\right\rangle, \tag{2.349}$$

also

$$\left(\hat{A}\hat{B}\right)^{+} = \hat{B}\hat{A}. \tag{2.350}$$

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

$$\left(\hat{A}^n\right)^{+} = \hat{A}^n. \tag{2.351}$$

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

ist der Hamilton-Operator

$$\hat{H} = \frac{\hat{\boldsymbol{p}}^2}{2m} + \hat{v}_h \tag{2.352}$$

hermitesch.

2.3.6.3 Kommutierende Operatoren

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

$$\left[\hat{A}, \hat{B}\right] := \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}. \tag{2.353}$$

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

$$\left[\hat{H}, \hat{A}\right] = 0, \tag{2.354}$$

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

$$\frac{\partial}{\partial t}\left\langle \hat{A} \right\rangle = \frac{\partial}{\partial t}\left\langle \psi \middle| \hat{A} \middle| \psi \right\rangle = \left\langle \frac{\partial}{\partial t}\psi \middle| \hat{A} \middle| \psi \right\rangle + \left\langle \psi \middle| \frac{\partial}{\partial t}\hat{A} \middle| \psi \right\rangle + \left\langle \psi \middle| \hat{A} \middle| \frac{\partial}{\partial t}\psi \right\rangle \tag{2.355}$$

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

$$\frac{\partial}{\partial t}\left\langle \hat{A} \right\rangle = -\frac{1}{i\hbar}\left\langle \hat{H}\psi \middle| \hat{A} \middle| \psi \right\rangle + \frac{1}{i\hbar}\left\langle \psi \middle| \hat{A} \middle| \hat{H}\psi \right\rangle = -\frac{1}{i\hbar}\left\langle \hat{H}\psi \middle| \hat{A} \middle| \psi \right\rangle + \frac{1}{i\hbar}\left\langle \psi \middle| \hat{H}\hat{A}\psi \right\rangle = 0, \tag{2.356}$$

da $\hat{H}$ hermitesch ist. Gilt $\left[\hat{A}, \hat{B}\right] = 0$ 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

$$\hat{B}\hat{A}\,|\psi\rangle = \hat{B}a\,|\psi\rangle \Leftrightarrow \hat{A}\left(\hat{B}\,|\psi\rangle\right) = a\left(\hat{B}\,|\psi\rangle\right), \tag{2.357}$$

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 $|\psi_1\rangle, \ldots, |\psi_n\rangle$ aufgespannt wird, die man als orthonormal annehmen kann, also

$$\left\langle \psi_i \middle| \psi_j \right\rangle = \delta_{i,j}. \tag{2.358}$$

Wegen Glg. (2.357) existieren $k_i \in \mathbb{C}$ für $1 \leq i \leq n$ mit

$$\hat{B}\,|\psi\rangle = \sum_{i=1}^{n} k_i |\psi_i\rangle. \tag{2.359}$$

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

$$B' = U^T B U = \begin{pmatrix} \lambda_1 & & & \\ & \lambda_2 & & \\ & & \ddots & \\ & & & \lambda_n \end{pmatrix} \tag{2.360}$$

mit nicht notwendigerweise verschiedenen Eigenwerten $\lambda_1, \ldots, \lambda_n \in \mathbb{C}$ 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

$$\hat{a}^+ := \frac{1}{\sqrt{2}}\left(u - \frac{\partial}{\partial u}\right). \tag{2.361}$$

und

$$\hat{a} := \frac{1}{\sqrt{2}}\left(u + \frac{\partial}{\partial u}\right) \tag{2.362}$$

Für die Zustände $\psi_n(u)$ des harmonischen Oszillators gelten mit den Glg.en (2.299) und (2.300)

$$\hat{a}\psi_n(u) = \sqrt{n}\psi_{n-1}(u) \tag{2.363}$$

und

$$\hat{a}^+\psi_n(u) = \sqrt{n+1}\psi_{n+1}(u). \tag{2.364}$$

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

$$\left(\hat{a}^+\right)^n \psi_0(u) = \sqrt{n!}\psi_n(u) \Leftrightarrow \psi_n(u) = \frac{1}{\sqrt{n!}}\left(\hat{a}^+\right)^n \psi_0(u) \tag{2.365}$$

Es sollte gelten

$$\hat{a}\psi_0(u) \stackrel{!}{=} 0. \tag{2.366}$$

Dies bedeutet

$$\left(u + \frac{\partial}{\partial u}\right)\psi_0(u) \quad \propto \quad \left(u + \frac{\partial}{\partial u}\right)\exp\left(-\frac{u^2}{2}\right) = (u-u)\exp\left(-\frac{u^2}{2}\right) = 0, \tag{2.367}$$

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

$$\begin{aligned} \langle f|\hat{a}g\rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} f^* \hat{a} g du = \int_{-\infty}^{\infty} f^* \frac{1}{\sqrt{2}}\left(u + \frac{\partial}{\partial u}\right) g du \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} g \frac{1}{\sqrt{2}}\left(u - \frac{\partial}{\partial u}\right) f^* du = \langle \hat{a}^+ f|g\rangle \end{aligned} \tag{2.368}$$

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

$$\hat{N} := \hat{a}^+\hat{a} \tag{2.369}$$

gilt

$$\hat{N}\psi_n(u) = \hat{a}^+\sqrt{n}\psi_{n-1}(u) = n\psi_n(u). \tag{2.370}$$

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

$$\begin{aligned} \left[\hat{a}, \hat{a}^+\right]\psi_n(u) &= \left(\hat{a}\hat{a}^+ - \hat{a}^+\hat{a}\right)\psi_n(u) = \hat{a}\sqrt{n+1}\psi_{n+1}(u) - \hat{a}^+\sqrt{n}\psi_{n-1}(u) \\ &= (n+1)\psi_n(u) - n\psi_n(u) = \psi_n(u). \end{aligned} \tag{2.371}$$

Es ist also allgemein

$$\left[\hat{a}, \hat{a}^+\right] = \hat{1}. \tag{2.372}$$

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

$$\hat{a}+\hat{a}^{+} \quad = \quad \sqrt{2}u=\frac{\sqrt{2}x}{b} \Leftrightarrow \hat{x}=\frac{b}{\sqrt{2}}\left(\hat{a}+\hat{a}^{+}\right). \tag{2.373}$$

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

$$\hat{a}-\hat{a}^{+} \quad = \quad \sqrt{2}\frac{\partial}{\partial u}=\sqrt{2}b\frac{\partial}{\partial x}=ib\frac{\sqrt{2}}{\hbar}\hat{p}_x \Leftrightarrow \hat{p}_x=-i\frac{\hbar}{b\sqrt{2}}\left(\hat{a}-\hat{a}^{+}\right). \tag{2.374}$$

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

$$\begin{aligned}\hat{H} &= \frac{\hat{p}_x^2}{2m}+\frac{1}{2}m\omega^2x^2=-\frac{1}{2m}\frac{\hbar^2}{2b^2}\left(\hat{a}^2+\left(\hat{a}^{+}\right)^2-\hat{a}\hat{a}^{+}-\hat{a}^{+}\hat{a}\right)+\frac{1}{4}m\omega^2b^2\left(\hat{a}^2+\left(\hat{a}^{+}\right)^2+\hat{a}\hat{a}^{+}+\hat{a}^{+}\hat{a}\right)\\ &= \frac{\hbar\omega}{4}\left(2\hat{a}\hat{a}^{+}+2\hat{a}^{+}\hat{a}\right)=\frac{\hbar\omega}{2}\left(2\hat{N}+1\right).\end{aligned} \tag{2.375}$$

2.3.7 Unschärferelation

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

$$\left\langle\left(\Delta\hat{A}\right)^2\right\rangle \quad := \quad \left\langle\left(\hat{A}-\left\langle\hat{A}\right\rangle\right)^2\right\rangle \tag{2.376}$$

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

$$\begin{aligned}\left\langle\left(\Delta\hat{A}\right)^2\right\rangle &= \left\langle\left(\hat{A}-\left\langle\hat{A}\right\rangle\right)^2\right\rangle=\left\langle\hat{A}^2+\left\langle\hat{A}\right\rangle^2-2\hat{A}\left\langle\hat{A}\right\rangle\right\rangle\\ &= \left\langle\hat{A}^2\right\rangle-\left\langle\hat{A}\right\rangle^2.\end{aligned} \tag{2.377}$$

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

$$\begin{aligned}F(x) &:= \int_{\mathbb{R}^3}\left|\left[x\left(\hat{A}-\left\langle\hat{A}\right\rangle\right)-i\left(\hat{B}-\left\langle\hat{B}\right\rangle\right)\right]\psi\right|^2 d^3r\\ &= \int_{\mathbb{R}^3}\left(\left[x\left(\hat{A}-\left\langle\hat{A}\right\rangle\right)-i\left(\hat{B}-\left\langle\hat{B}\right\rangle\right)\right]\psi\right)^{\star}\left[x\left(\hat{A}-\left\langle\hat{A}\right\rangle\right)-i\left(\hat{B}-\left\langle\hat{B}\right\rangle\right)\right]\psi d^3r\\ &= \int_{\mathbb{R}^3}\psi^{\star}\left[x\left(\hat{A}-\left\langle\hat{A}\right\rangle\right)+i\left(\hat{B}-\left\langle\hat{B}\right\rangle\right)\right]\left[x\left(\hat{A}-\left\langle\hat{A}\right\rangle\right)-i\left(\hat{B}-\left\langle\hat{B}\right\rangle\right)\right]\psi d^3r.\end{aligned} \tag{2.378}$$

Mit

$$\begin{aligned}& xi\left[\left(\hat{B}-\left\langle\hat{B}\right\rangle\right)\left(\hat{A}-\left\langle\hat{A}\right\rangle\right)-\left(\hat{A}-\left\langle\hat{A}\right\rangle\right)\left(\hat{B}-\left\langle\hat{B}\right\rangle\right)\right]\\ =\ & xi\left[\hat{B}\hat{A}-\hat{B}\left\langle\hat{A}\right\rangle-\left\langle\hat{B}\right\rangle\hat{A}+\left\langle\hat{B}\right\rangle\left\langle\hat{A}\right\rangle-\hat{A}\hat{B}+\hat{A}\left\langle\hat{B}\right\rangle+\left\langle\hat{A}\right\rangle\hat{B}-\left\langle\hat{A}\right\rangle\left\langle\hat{B}\right\rangle\right]\\ =\ & -xi\left[\hat{A},\hat{B}\right]\end{aligned} \tag{2.379}$$

folgt

$$\begin{aligned}F(x) &= \int_{\mathbb{R}^3}\psi^{\star}\left[x^2\left(\hat{A}-\left\langle\hat{A}\right\rangle\right)^2+\left(\hat{B}-\left\langle\hat{B}\right\rangle\right)^2-xi\left[\hat{A},\hat{B}\right]\right]\psi d^3r\\ &= x^2\left\langle\left(\Delta\hat{A}\right)^2\right\rangle+\left\langle\left(\Delta\hat{B}\right)^2\right\rangle-x\left\langle i\left[\hat{A},\hat{B}\right]\right\rangle\geq 0.\end{aligned} \tag{2.380}$$

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

$$\begin{aligned} & \langle i\,[A,B]\,f|g\rangle = \left\langle i\left(\hat{A}\hat{B}-\hat{B}\hat{A}\right)f|g\right\rangle = \left\langle i\hat{A}\hat{B}f - i\hat{B}\hat{A}f|g\right\rangle \\ = & \left\langle i\hat{A}\hat{B}f|g\right\rangle - \left\langle i\hat{B}\hat{A}f|g\right\rangle = -\left\langle \hat{B}f|i\hat{A}g\right\rangle + \left\langle \hat{A}f|i\hat{B}g\right\rangle = \left\langle f|i\hat{A}\hat{B}g\right\rangle - \left\langle f|i\hat{B}\hat{A}g\right\rangle \\ = & \left\langle f|i\left(\hat{A}\hat{B}-\hat{B}\hat{A}\right)g\right\rangle = \left\langle f|i\left[\hat{A},\hat{B}\right]g\right\rangle. \end{aligned} \tag{2.381}$$

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

$$0 = 2x_0\left\langle\left(\Delta\hat{A}\right)^2\right\rangle - \left\langle i\left[\hat{A},\hat{B}\right]\right\rangle \Leftrightarrow x_0 = \frac{\left\langle i\left[\hat{A},\hat{B}\right]\right\rangle}{2\left\langle\left(\Delta\hat{A}\right)^2\right\rangle}. \tag{2.382}$$

Setzt man dies in Glg. (2.380) ein, erhält man

$$\frac{1}{4}\frac{\left\langle i\left[\hat{A},\hat{B}\right]\right\rangle^2}{\left\langle\left(\Delta\hat{A}\right)^2\right\rangle} + \left\langle\left(\Delta\hat{B}\right)^2\right\rangle - \frac{\left\langle i\left[\hat{A},\hat{B}\right]\right\rangle^2}{2\left\langle\left(\Delta\hat{A}\right)^2\right\rangle} \geq 0 \Leftrightarrow \left\langle\left(\Delta\hat{A}\right)^2\right\rangle\left\langle\left(\Delta\hat{B}\right)^2\right\rangle \geq \frac{1}{4}\left\langle i\left[\hat{A},\hat{B}\right]\right\rangle^2. \tag{2.383}$$

Dies kann man auch schreiben als

$$\left\langle\left(\Delta\hat{A}\right)^2\right\rangle\left\langle\left(\Delta\hat{B}\right)^2\right\rangle \geq \frac{1}{4}\left|\left\langle\left[\hat{A},\hat{B}\right]\right\rangle\right|^2. \tag{2.384}$$

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 $\hat{A}_1, \ldots, \hat{A}_N$ 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 ${}^N_Z A$, 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 klassischem Fall aus und stellt die Lagrange-Funktion des Zwei-Teilchen-Systems auf:

$$L\left(\dot{\boldsymbol{r}}_1, \dot{\boldsymbol{r}}_2, \boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2\right) = \frac{m_1}{2}\dot{\boldsymbol{r}}_1^2 + \frac{m_2}{2}\dot{\boldsymbol{r}}_2^2 - V\left(\boldsymbol{r}_2 - \boldsymbol{r}_1\right) \tag{2.385}$$

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

Definitionen

$$\boldsymbol{r} := \boldsymbol{r}_2 - \boldsymbol{r}_1, \tag{2.386}$$

$$\boldsymbol{R} := \frac{m_1\boldsymbol{r}_1 + m_2\boldsymbol{r}_2}{m_1 + m_2}, \tag{2.387}$$

$$M := m_1 + m_2, \tag{2.388}$$

$$\mu := \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2} \tag{2.389}$$

ein, kann man rechnen

$$\begin{aligned} \frac{M}{2}\dot{\boldsymbol{R}}^2 + \frac{\mu}{2}\dot{\boldsymbol{r}}^2 &= \frac{1}{2M}\left(m_1^2\dot{\boldsymbol{r}}_1^2 + m_2^2\dot{\boldsymbol{r}}_2^2 + 2m_1m_2\dot{\boldsymbol{r}}_1\cdot\dot{\boldsymbol{r}}_2\right) + \frac{m_1m_2}{2\left(m_1+m_2\right)}\left(\dot{\boldsymbol{r}}_1^2 + \dot{\boldsymbol{r}}_2^2 - 2\dot{\boldsymbol{r}}_1\cdot\dot{\boldsymbol{r}}_2\right) \\ &= \frac{1}{2}m_1\dot{\boldsymbol{r}}_1^2 + \frac{1}{2}m_2\dot{\boldsymbol{r}}_2^2. \end{aligned} \tag{2.390}$$

Somit lautet eine alternative Lagrange-Funktion

$$L\left(\dot{\boldsymbol{R}}, \dot{\boldsymbol{r}}, \boldsymbol{r}\right) = \frac{M}{2}\dot{\boldsymbol{R}}^2 + \frac{\mu}{2}\dot{\boldsymbol{r}}^2 - V(\boldsymbol{r}). \tag{2.391}$$

Für die kanonischen Impulse folgt

$$\boldsymbol{p} = \frac{\partial L}{\partial \dot{\boldsymbol{r}}} = \mu\dot{\boldsymbol{r}}, \tag{2.392}$$

$$\boldsymbol{P} = \frac{\partial L}{\partial \dot{\boldsymbol{R}}} = M\dot{\boldsymbol{R}}. \tag{2.393}$$

Für die Hamilton-Funktion folgt

$$H(\boldsymbol{P}, \boldsymbol{p}, \boldsymbol{r}) = \frac{\boldsymbol{P}^2}{2M} + \frac{\boldsymbol{p}^2}{2\mu} + V(\boldsymbol{r}). \tag{2.394}$$

Mit den Ersetzungsregeln für Operatoren schreibt man

$$\boldsymbol{P} \rightarrow \hat{\boldsymbol{P}} = -i\hbar\frac{\partial}{\partial \boldsymbol{R}}, \tag{2.395}$$

$$\boldsymbol{p} \rightarrow \hat{\boldsymbol{p}} = -i\hbar\frac{\partial}{\partial \boldsymbol{r}}. \tag{2.396}$$

So erhält man den Hamilton-Operator

$$\hat{H}' = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_{\boldsymbol{R}} - \frac{\hbar^2}{2\mu}\Delta_{\boldsymbol{r}} + V(\boldsymbol{r}). \tag{2.397}$$

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

$$\hat{H}'\psi(\boldsymbol{R}, \boldsymbol{r}) = E\psi(\boldsymbol{R}, \boldsymbol{r}). \tag{2.398}$$

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

$$\left[\hat{H}', \hat{\boldsymbol{P}}\right] = 0. \tag{2.399}$$

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

$$\hat{\boldsymbol{P}}\psi(\boldsymbol{R}, \boldsymbol{r}) = \hbar\boldsymbol{K}\psi(\boldsymbol{R}, \boldsymbol{r}). \tag{2.400}$$

Daraus folgt

$$\psi(\boldsymbol{R},\boldsymbol{r}) = \exp(i\boldsymbol{K}\cdot\boldsymbol{R})\,\varphi(\boldsymbol{r})\,. \tag{2.401}$$

Dies setzt man in die stationäre SG ein:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2M}\Delta_{\boldsymbol{R}} - \frac{\hbar^2}{2\mu}\Delta_{\boldsymbol{r}} + V(\boldsymbol{r}) - E\right)\exp(i\boldsymbol{K}\cdot\boldsymbol{R})\,\varphi(\boldsymbol{r}) = 0 \tag{2.402}$$

Mit den Definitionen

$$\Delta := \Delta_{\boldsymbol{r}}, \tag{2.403}$$

$$\varepsilon := E - \frac{\hbar^2 K^2}{2M} \tag{2.404}$$

wird dies zu

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2\mu}\Delta + V(\boldsymbol{r}) - \varepsilon\right)\varphi(\boldsymbol{r}) = 0. \tag{2.405}$$

Mit dem Hamilton-Operator

$$\hat{H} := -\frac{\hbar^2}{2\mu}\Delta + V(\boldsymbol{r}) \tag{2.406}$$

erhält man

$$\hat{H}\varphi(\boldsymbol{r}) = \varepsilon\varphi(\boldsymbol{r})\,. \tag{2.407}$$

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

$$m_e \to \mu \tag{2.408}$$

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

$$\hat{H}\left|\psi\right\rangle = E\left|\psi\right\rangle \tag{2.409}$$

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

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi + V(r)\,\psi = E\psi, \tag{2.410}$$

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

$$\psi(r,\theta,\varphi) = R(r)\,G(\theta,\varphi)\,. \tag{2.411}$$

Man kann für den Laplace-Operator Δ schreiben

$$\Delta = \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{1}{r^2}\Delta_{\theta,\varphi} \tag{2.412}$$

mit einem Anteil $\Delta_{\theta,\varphi}$, der nur partielle Winkelableitungen enthält (s. Glg. (B.105)). Setzt man dies mit Glg. (2.411) in die Schrödinger-Gleichung ein, erhält man zunächst

$$\begin{aligned}&-G(\theta,\varphi)\,\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right)R(r) - R(r)\,\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{r^2}\Delta_{\theta,\varphi}G(\theta,\varphi)\\ &+V(r)\,R(r)\,G(\theta,\varphi) = ER(r)\,G(\theta,\varphi)\,.\end{aligned} \tag{2.413}$$

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

$$-\frac{1}{R(r)}\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right)R(r)+r^2V(r)-Er^2=\frac{1}{G(\theta,\varphi)}\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_{\theta,\varphi}G(\theta,\varphi)\,. \tag{2.414}$$

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

$$\Delta_{\theta,\varphi}G_l(\theta,\varphi)=-l(l+1)\,G_l(\theta,\varphi)\,. \tag{2.415}$$

Dies wird von den Kugelflächenfunktionen $Y_{l,m}(\theta,\varphi)$ Glg. (C.149) erfüllt, s. Glg. (C.160), hierbei gilt $|m|\leq l$. Die Normierungsbedingung lautet

$$\int_{\varphi=0}^{2\pi}\int_{\theta=0}^{\pi}|G_l|^2\sin(\theta)\,d\theta d\varphi\overset{!}{=}1. \tag{2.416}$$

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

$$\begin{aligned}-\frac{\hbar^2}{2m}\left[r^2R_l''(r)+2rR_l'(r)\right]+r^2V(r)R_l(r)-Er^2R_l(r) &= -\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2m}R_l(r)\\ \Leftrightarrow\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{d^2}{dr^2}+\frac{2}{r}\frac{d}{dr}\right)+\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2}+V(r)-E\right]R_l(r) &= 0.\end{aligned} \tag{2.417}$$

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

$$\begin{aligned}\left(\frac{d^2}{dr^2}+\frac{2}{r}\frac{d}{dr}\right)\frac{U_l(r)}{r} &= \frac{d}{dr}\left(-\frac{U_l(r)}{r^2}+\frac{\frac{dU_l(r)}{dr}}{r}\right)+\frac{2}{r}\left(\frac{\frac{dU_l(r)}{dr}}{r}-\frac{1}{r^2}U_l(r)\right)\\ &= 2\frac{U_l(r)}{r^3}-\frac{\frac{dU_l(r)}{dr}}{r^2}+\frac{\frac{d^2U_l(r)}{dr^2}}{r}-\frac{\frac{dU_l(r)}{dr}}{r^2}+\frac{2}{r^2}\frac{dU_l(r)}{dr}-\frac{2}{r^3}U_l(r)\,,\end{aligned} \tag{2.418}$$

also ist

$$\left(\frac{d^2}{dr^2}+\frac{2}{r}\frac{d}{dr}\right)R_l(r)=\frac{1}{r}\frac{d^2}{dr^2}U_l(r)\,. \tag{2.419}$$

Die $U_l(r)$ erfüllen also die Differenzialgleichung

$$\begin{aligned}\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dr^2}+\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2}+V(r)-E\right]U_l(r) &= 0\\ \Leftrightarrow\left[-\frac{d^2}{dr^2}+\frac{l(l+1)}{r^2}+\frac{2mV(r)}{\hbar^2}-\frac{2mE}{\hbar^2}\right]U_l(r) &= 0.\end{aligned} \tag{2.420}$$

Glg. (2.420) ist die *radiale Schrödinger-Gleichung*. Nun wird für $V(r)$ das Coulomb-Potential eingesetzt

$$V(r)=-\frac{Ze^2}{r}, \tag{2.421}$$

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. (2.420) wird damit zu

$$\left[-\frac{d^2}{dr^2}+\frac{l(l+1)}{r^2}-\frac{2mZe^2}{\hbar^2 r}-\frac{2mE}{\hbar^2}\right]U_l(r) = 0. \tag{2.422}$$

An dieser Stelle definiert man den Bohr-Radius a_B durch

$$a_B:=\frac{\hbar^2}{e^2m_e}, \tag{2.423}$$

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

$$\frac{d^2}{dr^2} = \frac{d}{dr}\left(\frac{du}{dr}\frac{d}{du}\right) = \frac{d}{dr}\left(\frac{1}{a_B}\frac{d}{du}\right) = \frac{1}{a_B^2}\frac{d^2}{du^2}. \tag{2.424}$$

Mit der Ersetzung

$$U_l(r) \to U_l(u) \tag{2.425}$$

und den Definitionen

$$E_{\text{at}} := \frac{\hbar^2}{m_e a_B^2}, \tag{2.426}$$

$$\varepsilon := \frac{E}{E_{\text{at}}} \tag{2.427}$$

wird Glg. (2.422) zu

$$\left[-\frac{d^2}{du^2} + \frac{l(l+1)}{u^2} - \frac{2Z}{u} - 2\varepsilon\right] U_l(u) = 0. \tag{2.428}$$

Für große u gilt

$$-\frac{d^2}{du^2}U_l(u) - 2\varepsilon U_l(u) \approx 0. \tag{2.429}$$

Man macht einen Ansatz

$$U_l(u) = \exp(-\lambda u) \tag{2.430}$$

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

$$\lambda^2 = -2\varepsilon. \tag{2.431}$$

Für kleine r gilt

$$\frac{d^2 U_l(u)}{du^2} \approx l(l+1)\frac{U_l(u)}{u^2}. \tag{2.432}$$

Hier bietet sich ein Ansatz

$$U_l(u) = u^k \tag{2.433}$$

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

$$k(k-1) = l(l+1), \tag{2.434}$$

also

$$k = l + 1. \tag{2.435}$$

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

$$U_l(u) = P_l(u)\, u^{l+1} \exp(-\lambda u) \tag{2.436}$$

an. Dann gelten

$$
\begin{aligned}
U_l' &= P_l' u^{l+1} \exp(-\lambda u) + (l+1)\frac{U_l}{u} - \lambda U_l = P_l' u^{l+1} \exp(-\lambda u) + U_l\left(\frac{l+1}{u} - \lambda\right), && (2.437)\\
U_l'' &= P_l'' u^{l+1} \exp(-\lambda u) + (l+1) P_l' u^l \exp(-\lambda u)\\
&\quad -\lambda P_l' u^{l+1} \exp(-\lambda u) + U_l'\left(\frac{l+1}{u} - \lambda\right) - \frac{l+1}{u^2} U_l = P_l'' u^{l+1} \exp(-\lambda u)\\
&\quad + (l+1) P_l' u^l \exp(-\lambda u) - \lambda P_l' u^{l+1} \exp(-\lambda u)\\
&\quad + \left(\frac{l+1}{u} - \lambda\right)\left[P_l' u^{l+1} \exp(-\lambda u) + U_l\left(\frac{l+1}{u} - \lambda\right)\right] - \frac{l+1}{u^2} U_l\\
&= P_l'' u^{l+1} \exp(-\lambda u) + P_l' u^l \exp(-\lambda u)\, 2(l+1) - 2\lambda P_l' u^{l+1} \exp(-\lambda u)\\
&\quad + \lambda^2 P_l u^{l+1} \exp(-\lambda u) - 2\lambda(l+1) P_l u^l \exp(-\lambda u) + l(l+1) P_l u^{l-1} \exp(-\lambda u)\\
&= \exp(-\lambda u)\, u^{l+1}\left[P_l'' + \frac{2(l+1)P_l'}{u} - 2\lambda P_l' + \lambda^2 P_l - 2\lambda\frac{l+1}{u} P_l + l\frac{l+1}{u^2} P_l\right]. && (2.438)
\end{aligned}
$$

Setzt man dies in Glg. (2.428) ein, erhält man

$$
\begin{aligned}
&-\exp(-\lambda u)\, u^{l+1}\left[P_l'' + \frac{2(l+1)P_l'}{u} - 2\lambda P_l' + \lambda^2 P_l - 2\lambda\frac{l+1}{u} P_l + l\frac{l+1}{u^2} P_l\right]\\
&+ l\frac{l+1}{u^2} P_l \exp(-\lambda u)\, u^{l+1} - 2Z\exp(-\lambda u)\, u^l P_l - 2\varepsilon\exp(-\lambda u)\, u^{l+1} P_l = 0\\
\Leftrightarrow\quad & -u^{l+1} P_l'' - u^l 2(l+1) P_l' + 2\lambda P_l' u^{l+1} - \lambda^2 P_l u^{l+1} + 2\lambda(l+1) u^l P_l - 2Z u^l P_l - 2\varepsilon u^{l+1} P_l = 0\\
\Leftrightarrow\quad & u P_l'' + 2(l+1) P_l' - 2\lambda P_l' u + \lambda^2 P_l u - 2\lambda(l+1) P_l + 2Z P_l + 2\varepsilon u P_l = 0\\
\Leftrightarrow\quad & u P_l'' + (2l + 2 - 2\lambda u) P_l' + (\lambda^2 u - 2\lambda(l+1) + 2Z + 2\varepsilon u) P_l = 0\\
\Leftrightarrow\quad & u P_l'' + (2l + 2 - 2\lambda u) P_l' + (-2\lambda(l+1) + 2Z) P_l = 0, && (2.439)
\end{aligned}
$$

der letzte Schritt folgt wegen $\lambda^2 = -2\varepsilon$, Glg. (2.431). Dies wird durch 2λ dividiert:

$$
\frac{1}{2\lambda} u P_l'' + \left(\frac{l+1}{\lambda} - u\right) P_l' + \left(\frac{Z}{\lambda} - l - 1\right) P_l = 0 \qquad (2.440)
$$

Definiere

$$
x := 2\lambda u, \qquad (2.441)
$$

dann sind

$$
\begin{aligned}
u &= \frac{x}{2\lambda}, && (2.442)\\
\frac{d}{du} &= 2\lambda\frac{d}{dx}, && (2.443)\\
\frac{d^2}{du^2} &= 4\lambda^2\frac{d^2}{dx^2}. && (2.444)
\end{aligned}
$$

Ersetzt man

$$
P_l(u) \to P_l(x), \qquad (2.445)
$$

erhält man

$$
\begin{aligned}
x P_l'' + \left(\frac{l+1}{\lambda} - \frac{x}{2\lambda}\right) 2\lambda P_l' + \left(\frac{Z}{\lambda} - l - 1\right) P_l &= 0\\
\Leftrightarrow x P_l'' + (2l + 2 - x) P_l' + \left(\frac{Z}{\lambda} - l - 1\right) P_l &= 0. && (2.446)
\end{aligned}
$$

Dies ist die *Laguerre'sche Differenzialgleichung*. In Absch. C.4 ist gezeigt, dass die dort in Glg. (C.126) 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

$$n = n_r + l + 1, \tag{2.447}$$

hieraus folgt $l < n$. Es gilt somit für die Energie-Eigenwerte mit Glg. (2.431)

$$\varepsilon = -\frac{\lambda^2}{2} = -\frac{Z^2}{2n^2}, \tag{2.448}$$

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

$$\boxed{E_n = -\frac{Z^2}{2n^2} E_{\text{at}} = -\frac{Z^2 \hbar^2}{2n^2 m_e a_B^2}.} \tag{2.449}$$

Somit gilt für die Radialfunktionen

$$\begin{aligned} R_{n_r,l}(r) &= C_{n_r,l} \frac{U_{n_r,l}(r)}{r} = C_{n_r,l} \frac{1}{r} L_{n_r,2l+1}\left(\frac{2Zr}{na_B}\right)\left(\frac{2Zr}{na_B}\right)^{l+1} \exp\left(-\frac{Zr}{na_B}\right) \\ &= C_{n_r,l} \frac{2Z}{na_B}\left(\frac{2Zr}{na_B}\right)^{l} L_{n_r,2l+1}\left(\frac{2Zr}{na_B}\right) \exp\left(-\frac{Zr}{na_B}\right) \end{aligned} \tag{2.450}$$

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

$$P(r) = \int_0^r \int_0^{2\pi} \int_0^{\pi} \left|\psi_{n,l,m}(r', \theta, \varphi)\right|^2 r'^2 \sin(\theta)\, d\theta d\varphi dr' = \int_0^r \left|R_{n_r,l}(r')\right|^2 r'^2 dr', \tag{2.451}$$

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

$$\varrho_{n_r,l}(r) = \frac{dP}{dr} = R_{n_r,l}(r)^2 r^2. \tag{2.452}$$

Die Normierungsbedingung lautet daher

$$\int_0^\infty R_{n_r,l}(r)^2 r^2 dr \stackrel{!}{=} 1. \tag{2.453}$$

Man setzt

$$\int_0^\infty U_{n_r,l}(r)^2 dr \stackrel{!}{=} \frac{1}{C_{n_r,l}^2} \tag{2.454}$$

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

$$\begin{aligned} \int_0^\infty U_{n_r,l}(r)^2 dr &= \int_0^\infty y^{2l+2} L_{n_r,2l+1}(y)^2 \exp(-y) \frac{na_B}{2Z} dy \\ &= \frac{na_B}{2Z} \int_0^\infty y^{2l+2} L_{n_r,2l+1}(y)^2 \exp(-y)\, dy. \end{aligned} \tag{2.455}$$

Für das verbleibende Integral gilt mit Glg. (C.136)

$$\int_0^\infty y^{2l+2} L_{n_r,2l+1}(y)^2 \exp(-y)\, dy = \frac{(n_r + 2l + 1)!}{n_r!}(2n_r + 2l + 2) = 2n \frac{(n+l)!}{n_r!}. \tag{2.456}$$

Es folgt

$$C_{n_r,l} = \sqrt{\frac{Z}{a_B}} \frac{1}{n} \sqrt{\frac{n_r!}{(n+l)!}}. \tag{2.457}$$

l	**Bezeichnung**
0	s
1	p
2	d
3	f

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

Die normierten Radialfunktionen lauten also

$$R_{n,l}(r) = \sqrt{\frac{Z^3}{a_B^3}}\sqrt{\frac{(n-l-1)!}{(n+l)!}}\frac{2}{n^2}\left(\frac{2Zr}{na_B}\right)^l L_{n-l-1,2l+1}\left(\frac{2Zr}{na_B}\right)\exp\left(-\frac{Zr}{na_B}\right). \tag{2.458}$$

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

$$\begin{aligned}\psi_{n,l,m}(r,\theta,\varphi) &= R_{n,l}(r)\,Y_{l,m}(\theta,\varphi)\\ &= \sqrt{\frac{Z^3}{a_B^3}}\frac{2}{n^2}\sqrt{\frac{(n-l-1)!}{(n+l)!}}\left(\frac{2Zr}{na_B}\right)^l L_{n-l-1,2l+1}\left(\frac{2Zr}{na_B}\right)\exp\left(-\frac{Zr}{na_B}\right)Y_{l,m}(\theta,\varphi).\end{aligned} \tag{2.459}$$

Die Wahrscheinlichkeitsdichten $\left|\psi_{n,l,m}\right|^2$ 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):

$$N = \sum_{l=0}^{n-1}\sum_{m=-l}^{l} 1 = \sum_{l=0}^{n-1}(2l+1) = \sum_{l=1}^{n}(2l-1) = n(n+1) - n = n^2. \tag{2.460}$$

Dabei wurde die Gauß'sche Summenformel Glg. (A.5) verwendet. Die Wasserstoff-Eigenfunktionen zum Energie-Eigenwert 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 $\boldsymbol{L}$ einer Punktmasse mit dem Impuls $\boldsymbol{p} = (p_1, p_2, p_3)^T$ am Ort $\boldsymbol{r} = (x_1, x_2, x_3)^T$ wird in der klassischen Mechanik durch

$$\boldsymbol{L} := \boldsymbol{r} \times \boldsymbol{p} = \sum_{j,k,l=1}^{3} \varepsilon_{j,k,l} x_j p_k \boldsymbol{e}_l \tag{2.461}$$

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

$$x_j \to \hat{x}_j \tag{2.462}$$

sowie die kartesischen Impulskomponenten durch die Impulsoperatoren

$$p_k \to \hat{p}_k, \tag{2.463}$$

erhält man den *Drehimpulsoperator*

$$\hat{\boldsymbol{L}} := \hbar \sum_{j,k,l=1}^{3} -i\varepsilon_{j,k,l}\hat{x}_j \frac{\partial}{\partial x_k}\boldsymbol{e}_l. \tag{2.464}$$

Ausgeschrieben erhält man in der Ortsdarstellung in kartesischen Koordinaten

$$\hat{L}_x = \frac{\hbar}{i}\left(y\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial y}\right), \tag{2.465}$$

$$\hat{L}_y = \frac{\hbar}{i}\left(z\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial z}\right), \tag{2.466}$$

$$\hat{L}_z = \frac{\hbar}{i}\left(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}\right). \tag{2.467}$$

Der Impulsoperator $\hat{\boldsymbol{p}}$ ist genau wie der Ortsoperator $\hat{\boldsymbol{r}}$ 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 hermitsch. Man definiert

$$\hat{L}_\pm := \hat{L}_x \pm i\hat{L}_y. \tag{2.468}$$

Als Kurzschreibweise führt man einen verallgemeinerten Drehimpulsoperator

$$\hat{\boldsymbol{J}} := -i\hat{\boldsymbol{r}} \times \nabla \tag{2.469}$$

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

$$\hat{J}_l = -i\sum_{j,k=1}^{3} \varepsilon_{j,k,l} x_j \frac{\partial}{\partial x_k}. \tag{2.470}$$

Somit folgt für den Kommutator zweier Komponenten des Drehimpulsoperators

$$\begin{aligned}
\left[\hat{J}_j, \hat{J}_k\right] &= \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_{mn} \frac{\partial}{\partial x_o} \\
&= \sum_{l,m,n,o=1}^{3} x_l x_n \left(\varepsilon_{l,m,k}\varepsilon_{n,o,j} - \varepsilon_{l,m,j}\varepsilon_{n,o,k}\right) \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}\left(\varepsilon_{l,n,k}\varepsilon_{n,o,j} - \varepsilon_{l,n,j}\varepsilon_{n,o,k}\right) = \sum_{n=1}^{3}\sum_{l,o=1}^{3} \left(\varepsilon_{l,n,k}\varepsilon_{n,o,j} - \varepsilon_{l,n,j}\varepsilon_{n,o,k}\right) 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{1}{-i}\hat{J}_n = i\sum_{n=1}^{3} \varepsilon_{j,k,n}\hat{J}_n.
\end{aligned} \tag{2.471}$$

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

$$\left[\hat{J}_1, \hat{J}_2\right] = i\hat{J}_3, \tag{2.472}$$

$$\left[\hat{J}_2, \hat{J}_3\right] = i\hat{J}_1, \tag{2.473}$$

$$\left[\hat{J}_3, \hat{J}_1\right] = i\hat{J}_2. \tag{2.474}$$

Somit ist

$$\left[\hat{J}_3, \hat{J}_\pm\right] = \left[\hat{J}_3, \hat{J}_1 \pm i\hat{J}_2\right] = \left[\hat{J}_3, \hat{J}_1\right] \pm \left[\hat{J}_3, i\hat{J}_2\right] = i\hat{J}_2 \pm i\left(-i\hat{J}_1\right) = \pm\hat{J}_1 + i\hat{J}_2 = \pm\hat{J}_\pm. \tag{2.475}$$

Weiterhin gelten

$$\begin{aligned} \hat{J}_\pm\hat{J}_\mp &= \left(\hat{J}_1 \pm i\hat{J}_2\right)\left(\hat{J}_1 \mp i\hat{J}_2\right) = \hat{J}_1^2 + \hat{J}_2^2 \mp i\hat{J}_1\hat{J}_2 \pm i\hat{J}_2\hat{J}_1 \\ &= \hat{\boldsymbol{J}}^2 - \hat{J}_3^2 \mp i\left[\hat{J}_1, \hat{J}_2\right] = \hat{\boldsymbol{J}}^2 - \hat{J}_3\left(\hat{J}_3 \mp 1\right) \end{aligned} \tag{2.476}$$

und

$$\begin{aligned} \left[\hat{\boldsymbol{J}}^2, \hat{J}_1\right] &= \left[\hat{J}_2^2 + \hat{J}_3^2, \hat{J}_1\right] = \hat{J}_2\hat{J}_2\hat{J}_1 - \hat{J}_1\hat{J}_2\hat{J}_2 + \hat{J}_3\hat{J}_3\hat{J}_1 - \hat{J}_1\hat{J}_3\hat{J}_3 \\ &= \hat{J}_2\hat{J}_2\hat{J}_1 - \hat{J}_1\hat{J}_2\hat{J}_2 + \hat{J}_2\hat{J}_1\hat{J}_2 - \hat{J}_2\hat{J}_1\hat{J}_2 + \hat{J}_3\hat{J}_3\hat{J}_1 - \hat{J}_1\hat{J}_3\hat{J}_3 + \hat{J}_3\hat{J}_1\hat{J}_3 - \hat{J}_3\hat{J}_1\hat{J}_3 \\ &= \hat{J}_2\left[\hat{J}_2, \hat{J}_1\right] + \left[\hat{J}_2, \hat{J}_1\right]\hat{J}_2 + \hat{J}_3\left[\hat{J}_3, \hat{J}_1\right] + \left[\hat{J}_3, \hat{J}_1\right]\hat{J}_3 \\ &= -i\hat{J}_2\hat{J}_3 - i\hat{J}_3\hat{J}_2 + i\hat{J}_3\hat{J}_2 + i\hat{J}_2\hat{J}_3 = 0, \end{aligned} \tag{2.477}$$

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

$$\left[\hat{\boldsymbol{J}}^2, \hat{J}_\pm\right] = 0. \tag{2.478}$$

Für die Behandlung des Drehimpulses im H-Atom sollen nun die Drehimpulsoperatoren in Kugelkoordinaten transformiert werden. Dazu verwendet man neben Glg. (B.102) die Darstellung

$$\nabla = \boldsymbol{e}_r\frac{\partial}{\partial r} + \boldsymbol{e}_\theta\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial\theta} + \boldsymbol{e}_\varphi\frac{1}{r\sin(\theta)}\frac{\partial}{\partial\varphi}. \tag{2.479}$$

des Gradienten. Weiterhin gelten die bekannten Relationen

$$\boldsymbol{e}_r \times \boldsymbol{e}_\theta = \boldsymbol{e}_\varphi \tag{2.480}$$

sowie

$$\boldsymbol{e}_r \times \boldsymbol{e}_\varphi = -\boldsymbol{e}_\theta. \tag{2.481}$$

Damit folgt in der Ortsdarstellung

$$\hat{\boldsymbol{J}} = -i\boldsymbol{r} \times \nabla = -ir\boldsymbol{e}_r \times \left(\boldsymbol{e}_r\frac{\partial}{\partial r} + \boldsymbol{e}_\theta\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial\theta} + \boldsymbol{e}_\varphi\frac{1}{r\sin(\theta)}\frac{\partial}{\partial\varphi}\right) = -i\boldsymbol{e}_\varphi\frac{\partial}{\partial\theta} + i\boldsymbol{e}_\theta\frac{1}{\sin(\theta)}\frac{\partial}{\partial\varphi}. \tag{2.482}$$

Aufgrund der Glg.en (B.77) - (B.79) gelten

$$\hat{J}_x = -i\left(-\sin(\varphi)\frac{\partial}{\partial\theta} - \cos(\varphi)\cot(\theta)\frac{\partial}{\partial\varphi}\right), \tag{2.483}$$

$$\hat{J}_y = -i\left(\cos(\varphi)\frac{\partial}{\partial\theta} - \sin(\varphi)\cot(\theta)\frac{\partial}{\partial\varphi}\right), \tag{2.484}$$

$$\hat{J}_z = -i\frac{\partial}{\partial\varphi}. \tag{2.485}$$

Weiterhin gilt

$$\begin{aligned}
\hat{\boldsymbol{J}}^2 &= \hat{J}_x^2 + \hat{J}_y^2 + \hat{J}_z^2 \\
&= -\sin^2(\varphi)\frac{\partial^2}{\partial\theta^2} - \cos^2(\varphi)\cot^2(\theta)\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2} - \cos^2(\varphi)\frac{\partial^2}{\partial\theta^2} - \sin^2(\varphi)\cot^2(\theta)\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2} - \frac{\partial^2}{\partial\varphi^2} - \cot(\theta)\frac{\partial}{\partial\theta} \\
&= -\left(\frac{\partial^2}{\partial\theta^2} + \cot^2(\theta)\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2} + \frac{\partial^2}{\partial\varphi^2} + \cot(\theta)\frac{\partial}{\partial\theta}\right) = -\left(\frac{1}{\sin(\theta)}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin(\theta)\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\sin^2(\theta)}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right). \quad (2.486)
\end{aligned}$$

Dies entspricht mit Glg. (B.107) der Aussage

$$\hat{\boldsymbol{J}}^2 = -\Delta_{\theta,\varphi}. \quad (2.487)$$

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. (2.459), der Definition der Kugelflächenfunktionen Glg. (C.149), der Darstellung der z-Komponenten des Drehimpulsoperators Glg. (2.485), der eben hergeleiteten Glg. (2.487) sowie der Eigenschaft Glg. (C.160) der Kugelflächenfunktionen gelten folgende zwei Aussagen:

$$\begin{aligned}
\hat{\boldsymbol{L}}^2|n,l,m\rangle &= \hbar^2 l(l+1)|n,l,m\rangle, && (2.488)\\
\hat{L}_z|n,l,m\rangle &= m\hbar|n,l,m\rangle && (2.489)
\end{aligned}$$

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*.
- $\hat{\boldsymbol{L}}^2$, $\hat{L}_z$ 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

$$\begin{aligned}
\hat{J}_\pm &= \hat{J}_x \pm i\hat{J}_y = -i\left(-\sin(\varphi)\frac{\partial}{\partial\theta} - \cos(\varphi)\cot(\theta)\frac{\partial}{\partial\varphi}\right) \pm \left(\cos(\varphi)\frac{\partial}{\partial\theta} - \sin(\varphi)\cot(\theta)\frac{\partial}{\partial\varphi}\right) \\
&= \left(i\cos(\varphi) - \pm\sin(\varphi)\right)\cot(\theta)\frac{\partial}{\partial\varphi} + \left(\pm\cos(\varphi) + i\sin(\varphi)\right)\frac{\partial}{\partial\theta} \\
&= ie^{\pm i\varphi}\cot(\theta)\frac{\partial}{\partial\varphi} \pm e^{\pm i\varphi}\frac{\partial}{\partial\theta} = \exp(\pm i\varphi)\left(i\cot(\theta)\frac{\partial}{\partial\varphi} \pm \frac{\partial}{\partial\theta}\right). \quad (2.490)
\end{aligned}$$

Nun wird der verallgemeinerte Drehimpulsoperator $\hat{\boldsymbol{J}}$ Glg. (2.469) noch etwas weiter behandelt. Er und seine Komponenten wurden als hermitesch identifiziert, somit ist auch $\hat{\boldsymbol{J}}^2$ als Hintereinanderausführung Hermite'scher, kommutativer Operatoren nach Absch. 2.3.6.2 hermitesch Es gilt weiterhin

$$\begin{aligned}
\hat{J}_+^\dagger &= \hat{J}_-, && (2.491)\\
\hat{J}_-^\dagger &= \hat{J}_+. && (2.492)
\end{aligned}$$

Unter den vier Operatoren $\hat{\boldsymbol{J}}^2, \hat{J}_x, \hat{J}_y, \hat{J}_z$ kann man nach Glg. (2.471) und Glg. (2.477) zwei finden, die kommutieren, nämlich $\hat{\boldsymbol{J}}^2$ und ein anderer, hierfür wird $\hat{J}_z$ gewählt. Diese haben nach Absch. 2.3.6.3 die gleichen Eigenfunktionen, also kann man schreiben

$$\begin{aligned}
\hat{\boldsymbol{J}}^2|\lambda,m\rangle &= \lambda|\lambda,m\rangle, && (2.493)\\
\hat{J}_z|\lambda,m\rangle &= m|\lambda,m\rangle && (2.494)
\end{aligned}$$

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

$$\hat{J}_+|\lambda,m\rangle \quad (2.495)$$

und

$$\hat{J}_- \left|\lambda, m\right\rangle \tag{2.496}$$

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

$$\hat{\boldsymbol{J}}^2 \hat{J}_\pm \left|\lambda, m\right\rangle = \hat{J}_\pm \hat{\boldsymbol{J}}^2 \left|\lambda, m\right\rangle = \lambda \hat{J}_\pm \left|\lambda, m\right\rangle . \tag{2.497}$$

Mit Glg. (2.475) folgt

$$\hat{J}_z \hat{J}_\pm - \hat{J}_\pm \hat{J}_z = \pm \hat{J}_\pm \Leftrightarrow \hat{J}_z \hat{J}_\pm = \hat{J}_\pm \hat{J}_z \pm \hat{J}_\pm \tag{2.498}$$

und somit

$$\hat{J}_z \hat{J}_\pm \left|\lambda, m\right\rangle = \left(\hat{J}_\pm \hat{J}_z \pm \hat{J}_\pm\right) \left|\lambda, m\right\rangle = \hat{J}_\pm \left(\hat{J}_z \pm 1\right) \left|\lambda, m\right\rangle = (m \pm 1) \hat{J}_\pm \left|\lambda, m\right\rangle . \tag{2.499}$$

Es gilt also

$$\hat{\boldsymbol{J}}_\pm \left|\lambda, m\right\rangle = c_\pm \left|\lambda, m \pm 1\right\rangle . \tag{2.500}$$

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

$$\langle \lambda, m | \lambda, m \rangle \stackrel{!}{=} 1 \tag{2.501}$$

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

$$c_\pm^2 = \langle \lambda, m \pm 1 \left| c_\pm c_\pm \right| \lambda, m \pm 1 \rangle = \left\langle \hat{J}_\pm \lambda, m \left| \hat{J}_\pm \right| \lambda, m \right\rangle = \left\langle \lambda, m \left| \hat{J}_\mp \hat{J}_\pm \right| \lambda, m \right\rangle . \tag{2.502}$$

Hier kann man Glg. (2.476) einsetzen und erhält mit der Forderung $c_\pm > 0$

$$\begin{aligned} c_\pm^2 &= \left\langle \lambda, m \left| \hat{\boldsymbol{J}}^2 - \hat{J}_z^2 \mp \hat{J}_z \right| \lambda, m \right\rangle = \lambda - m^2 \mp m \\ \Leftrightarrow c_\pm &= \sqrt{\lambda - m^2 \mp m} = \sqrt{\lambda - m\,(m \pm 1)}. \end{aligned} \tag{2.503}$$

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

$$\left\langle f \middle| \hat{A}^2 f \right\rangle = \left\langle \hat{A} f \middle| \hat{A} f \right\rangle \geq 0. \tag{2.504}$$

Daraus folgt

$$0 \leq \left\langle \lambda, m \left| \hat{J}_x^2 \right| \lambda, m \right\rangle + \left\langle \lambda, m \left| \hat{J}_y^2 \right| \lambda, m \right\rangle = \left\langle \lambda, m \left| \hat{\boldsymbol{J}}^2 - \hat{J}_z^2 \right| \lambda, m \right\rangle = \lambda - m^2. \tag{2.505}$$

Folglich gilt

$$\lambda \geq m^2 \geq 0. \tag{2.506}$$

Aus einem Zustand $\left|\lambda, m\right\rangle$ erhält man somit durch Anwendung der Auf - und Absteigeoperatoren die Zustände $\left|\lambda, m \pm 1\right\rangle$, $\left|\lambda, m \pm 2\right\rangle$ und so weiter. Dies muss jedoch wegen (2.506) irgendwo abbrechen, also muss die Normierung Glg. (2.503) bei einem maximalen $m-$Wert $m_{\max}$ und bei einem minimalen $m-$Wert $m_{\min}$ verschwinden:

$$\hat{J}_+ \left|\lambda, m_{\max}\right\rangle = 0 \Rightarrow c_+ = 0 \Rightarrow \lambda = m_{\max}\,(m_{\max} + 1)\,, \tag{2.507}$$

$$\hat{J}_- \left|\lambda, m_{\min}\right\rangle = 0 \Rightarrow c_- = 0 \Rightarrow \lambda = m_{\min}\,(m_{\min} - 1) \tag{2.508}$$

$$\Rightarrow (m_{\max} + m_{\min})\,(m_{\max} - m_{\min} + 1) = 0 \tag{2.509}$$

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

$$m_{\max} = -m_{\min} =: j \tag{2.510}$$

Es gilt

$$\lambda = j\,(j+1)\,. \tag{2.511}$$

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

$$|\lambda, m\rangle = |j\,(j+1)\,, m\rangle \to |j, m\rangle \tag{2.512}$$

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

$$\langle j', m' | j, m\rangle \quad = \quad \delta_{j,j'}\delta_{m,m'}\,. \tag{2.513}$$

Ist j ganzzahlig, so ist die Ortsdarstellung der Lösung gegeben durch die Kugelflächenfunktionen Glg. (C.149). 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 $|s s_z\rangle = \left|\frac{1}{2}, s_z\right\rangle$ bezeichnet. Man definiert

$$\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} := \left|\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right\rangle, \tag{2.514}$$

$$\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} := \left|\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\right\rangle. \tag{2.515}$$

Glg. (2.514) wird als *Spin-up-Zustand* und Glg. (2.515) wird als *Spin-down-Zustand* bezeichnet. Es gilt $\hat{J}_z \left|\frac{1}{2}, m\right\rangle = m \left|\frac{1}{2}, m\right\rangle$, also folgt in Matrixschreibweise

$$J_z \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad = \quad \begin{pmatrix} \frac{1}{2} \\ 0 \end{pmatrix}, \tag{2.516}$$

$$J_z \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad = \quad \begin{pmatrix} 0 \\ -\frac{1}{2} \end{pmatrix}, \tag{2.517}$$

was erfüllt ist für

$$J_z = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \tag{2.518}$$

Für die Normierungskonstante $c_\pm$ aus Glg. (2.503) gelten mit $\lambda = j\,(j+1) = \frac{1}{2}\frac{3}{2} = \frac{3}{4}$

$$c_+ \quad = \quad \sqrt{\frac{3}{4} + \frac{1}{2}\left(-\frac{1}{2} + 1\right)} = 1, \tag{2.519}$$

$$c_- \quad = \quad \sqrt{\frac{3}{4} - \frac{1}{2}\left(\frac{1}{2} - 1\right)} = 1. \tag{2.520}$$

Somit gilt wegen $\hat{J}_+ \left|\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right\rangle = 0$ und $\hat{J}_+ \left|\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\right\rangle = \left|\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right\rangle$ auch

$$J_+ = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}. \tag{2.521}$$

Wegen $\hat{J}_- \left|\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right\rangle = \left|\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\right\rangle$ und $\hat{J}_- \left|\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\right\rangle = 0$ gilt

$$J_- = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}. \tag{2.522}$$

Somit gelten

$$J_x \quad = \quad \frac{1}{2}\,(J_+ + J_-) = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \tag{2.523}$$

$$J_y \quad = \quad -i\frac{1}{2}\,(J_+ - J_-) = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}. \tag{2.524}$$

Die hier auftretenden Matrizen

$$\overleftrightarrow{\sigma_x} := \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \tag{2.525}$$

$$\overleftrightarrow{\sigma_y} := \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \tag{2.526}$$

$$\overleftrightarrow{\sigma_z} := \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \tag{2.527}$$

nennt 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 Eigendrehmomentume 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 rein 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 $\mathbb{R}^3 \to \mathbb{C}$ aus. Die Wahrscheinlichkeitsdichte hängt nämlich nicht mehr nur vom Ort ab, sondern auch vom Spinzustand. Mit den Definitionen Glg.en (2.514) und (2.515) kann man für den Zustand eines solchen Teilchens jedoch schreiben

$$\left|\psi\left(\boldsymbol{r},t\right)\right\rangle = \varphi_+\left(\boldsymbol{r},t\right)\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + \varphi_-\left(\boldsymbol{r},t\right)\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \tag{2.528}$$

mit orts- und zeitabhängigen Anteilen $\varphi_+\left(\boldsymbol{r},t\right)$ und $\varphi_-\left(\boldsymbol{r},t\right)$. Solch eine Wellenfunktion nennt man *Spinor*. Dieser Zustand ist natürlich normiert:

$$\langle\psi|\psi\rangle = \int_{\mathbb{R}^3} \left(|\varphi_+\left(\boldsymbol{r}\right)|^2 + |\varphi_-\left(\boldsymbol{r}\right)|^2\right) d^3r \tag{2.529}$$

Man kann mit Glg. (2.117)

$$\hat{\boldsymbol{p}} \to \hat{\boldsymbol{p}} - \frac{q}{c}\hat{\boldsymbol{A}}, \tag{2.530}$$

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 $\boldsymbol{B}$ eine potentielle Energie

$$E_{\text{pot}} = -\boldsymbol{\mu}\cdot\boldsymbol{B}. \tag{2.531}$$

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*

$$\boldsymbol{s} \to \hat{\boldsymbol{s}}. \tag{2.532}$$

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

$$\hat{\boldsymbol{s}} = \frac{\hbar}{2}\hat{\boldsymbol{\sigma}} = \frac{\hbar}{2}\boldsymbol{\sigma}. \tag{2.533}$$

Hierbei wurde ein Vektor

$$\boldsymbol{\sigma} = \sigma_x\boldsymbol{e}_x + \sigma_y\boldsymbol{e}_y + \sigma_z\boldsymbol{e}_z \in \mathbb{C}^{2\times2\times3} \tag{2.534}$$

eingeführt. Ist φ das skalare Potential des elektromagnetischen Feldes, so lautet der gesuchte Hamilton-Operator

$$\hat{H} = \frac{1}{2m}\left(\hat{\boldsymbol{p}} - \frac{q}{c}\boldsymbol{A}\right)^2 + q\varphi - \hat{\boldsymbol{\mu}}\cdot\boldsymbol{B}. \tag{2.535}$$

Für das magnetische Moment gilt

$$\boldsymbol{\mu} = g\frac{q}{2mc}\boldsymbol{s} \tag{2.536}$$

mit einem klassisch nicht herleitbaren Faktor g, den man *Landé-Faktor* nennt. Für den Pauli-Hamilton-Operator folgt

$$\hat{H}_P = \frac{1}{2m}\left(\hat{\boldsymbol{p}} - \frac{q}{c}\boldsymbol{A}\right)^2 + q\varphi - g\frac{q\hbar}{4mc}\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{B}. \tag{2.537}$$

Die *Pauli-Gleichung* lautet damit

$$\hat{H}_P\left|\psi\left(\boldsymbol{r},t\right)\right\rangle = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\left|\psi\left(\boldsymbol{r},t\right)\right\rangle. \tag{2.538}$$

für einen Spinor $\left|\psi\left(\boldsymbol{r},t\right)\right\rangle$, s. Glg. (2.528).

2.3.11 Störungstheorie

2.3.11.1 Zeitunabhängiger Fall

Sei ein Eigenwertproblem

$$\hat{H}_0\left|\psi^{(0)}\right\rangle = E^{(0)}\left|\psi^{(0)}\right\rangle \tag{2.539}$$

gegeben mit einem einem Hamiltonian $\hat{H}_0$, orthonormalen und vollständigen Eigenfunktionen $\left|\psi_n^{(0)}\right\rangle$ und zugehörigen Eigenwerten $E_n^{(0)}$. Nun ersetzt man den Hamiltonian $\hat{H}_0$ durch einen neuen Hamiltonian $\hat{H}$, der gegeben ist durch

$$\hat{H} := \hat{H}_0 + \hat{v}_h \tag{2.540}$$

mit einem Störpotential $\hat{v}_h$. Man möchte Lösungen $\left|\psi\right\rangle$ der Eigenwertgleichung

$$\hat{H}\left|\psi\right\rangle = E\left|\psi\right\rangle \tag{2.541}$$

finden. Hierzu setzt man zunächst

$$\hat{H}\left(\lambda\right) := \hat{H}_0 + \lambda\hat{v}_h \tag{2.542}$$

mit $\lambda \in [0,1]$ an. Nun entwickelt man die Eigenzustände $\left|\psi\right\rangle$ und Eigenwerte E nach Potenzen von λ:

$$E\left(\lambda\right) = \sum_{i=0}^{\infty}\lambda^{(i)}E^{(i)} \tag{2.543}$$

$$\left|\psi\left(\lambda\right)\right\rangle = \sum_{i=0}^{\infty}\lambda^{(i)}\left|\psi^{(i)}\right\rangle \tag{2.544}$$

Dies setzt man in Glg. (2.541) ein:

$$\hat{H}\left(\lambda\right)\left|\psi\left(\lambda\right)\right\rangle = E\left(\lambda\right)\left|\psi\left(\lambda\right)\right\rangle \tag{2.545}$$

$$\Rightarrow \left(\hat{H}_0 + \lambda\hat{v}_h\right)\sum_{i=0}^{\infty}\lambda^{(i)}\left|\psi^{(i)}\right\rangle = \left(\sum_{i=0}^{\infty}\lambda^{(i)}E^{(i)}\right)\left(\sum_{i=0}^{\infty}\lambda^{(i)}\left|\psi^{(i)}\right\rangle\right) \tag{2.546}$$

Man sortiert Glg. (2.546) nun nach Potenzen von λ, für die $m-$te Ordnung gilt dann

$$\hat{H}_0\left|\psi^{(m)}\right\rangle + \hat{v}_h\left|\psi^{(m-1)}\right\rangle = \sum_{k=0}^{m}E^{(m-k)}\left|\psi^{(k)}\right\rangle. \tag{2.547}$$

Es existieren $C_{n,k}^{(1)} \in \mathbb{C}$ mit

$$\left|\psi_n^{(1)}\right\rangle = \sum_{k=1}^{\infty}C_{n,k}^{(1)}\left|\psi_k^{(0)}\right\rangle. \tag{2.548}$$

Wendet man hierauf den ungestörten Hamilton-Operator $\hat{H}_0$ an, erhält man

$$\hat{H}_0 \left|\psi_n^{(1)}\right\rangle = \sum_{k=1}^{\infty} C_{n,k}^{(1)} E_k^{(0)} \left|\psi_k^{(0)}\right\rangle . \tag{2.549}$$

Setzt man in Glg. (2.547) $m = 1$ sowie $\left|\psi\right\rangle = \left|\psi_n\right\rangle$ ein und multipliziert dies von links mit $\left\langle\psi_n^{(0)}\right|$, erhält man

$$\left\langle\psi_n^{(0)}\right|\hat{H}_0\left|\psi_n^{(1)}\right\rangle + \left\langle\psi_n^{(0)}\left|\hat{v}_h\right|\psi_n^{(0)}\right\rangle = E_n^{(1)} + \left\langle\psi_n^{(0)}\right|E_n^{(0)}\left|\psi_n^{(1)}\right\rangle . \tag{2.550}$$

Außerdem gilt

$$\left\langle\psi_n^{(0)}\right|\hat{H}_0\left|\psi_n^{(1)}\right\rangle = C_{n,n}^{(1)} E_n^{(0)} = \left\langle\psi_n^{(0)}\right|E_n^{(0)}\left|\psi_n^{(1)}\right\rangle . \tag{2.551}$$

Für die Energiekorrektur in erster Ordnung gilt somit

$$E_n^{(1)} = \left\langle\psi_n^{(0)}\left|\hat{v}_h\right|\psi_n^{(0)}\right\rangle . \tag{2.552}$$

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. (2.547) mit $m = 2$ von links mit $\left\langle\psi_k^{(0)}\right|$. Es entsteht

$$\begin{aligned}
\left\langle\psi_k^{(0)}\right|\hat{H}_0\left|\psi_n^{(1)}\right\rangle + \left\langle\psi_k^{(0)}\left|\hat{v}_h\right|\psi_n^{(0)}\right\rangle &= \left\langle\psi_k^{(0)}\right|E_n^{(0)}\left|\psi_n^{(1)}\right\rangle \\
\Leftrightarrow C_{n,k}^{(1)} E_k^{(0)} + \left\langle\psi_k^{(0)}\left|\hat{v}_h\right|\psi_n^{(0)}\right\rangle &= E_n^{(0)} C_{n,k}^{(1)} \\
\Leftrightarrow C_{n,k}^{(1)} &= \frac{\left\langle\psi_k^{(0)}\left|\hat{v}_h\right|\psi_n^{(0)}\right\rangle}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}} .
\end{aligned} \tag{2.553}$$

Dies funktioniert nur im Falle nicht entarteter Energieniveaus $E_n^{(0)}, E_k^{(0)}$. Für den Zustand $\left|\psi_n(\lambda)\right\rangle$ erhält man nun

$$\left|\psi_n(\lambda)\right\rangle = \left|\psi_n^{(0)}\right\rangle + \lambda \sum_{\substack{m=1,\\ m\neq n}}^{\infty} \frac{\left\langle\psi_m^{(0)}\left|\hat{v}_h\right|\psi_n^{(0)}\right\rangle}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} \left|\psi_m^{(0)}\right\rangle + C_{n,n}^{(1)} \left|\psi_n^{(0)}\right\rangle + \mathcal{O}\left(\lambda^2\right) . \tag{2.554}$$

Die Norm hiervon ist

$$\left\langle\psi_n(\lambda)\left|\psi_n(\lambda)\right.\right\rangle = 1 + C_{n,n}^{(1)\star} + C_{n,n}^{(1)} + \mathcal{O}\left(\lambda^2\right) \tag{2.555}$$

Also ist $C_{n,n}^{(1)} = ir$ mit $r \in \mathbb{R}$. Daher ist die Amplitude von $\left|\psi_n^{(0)}\right\rangle$ in $\left|\psi_n(\lambda)\right\rangle$ gegeben durch

$$1 + i\lambda r = \exp\left(i\lambda r\right) + \mathcal{O}\left(\lambda^2\right) . \tag{2.556}$$

Der Koeffizient $C_{n,n}^{(1)}$ führt also in erster Ordnung zu einer Phasenverschiebung von $\left|\psi_n^{(0)}\right\rangle$, diese Phasenverschiebung kann man in $\left|\psi_n^{(0)}\right\rangle$ absorbieren und

$$C_{n,n}^{(1)} = 0 \tag{2.557}$$

setzen. Man erhält also in erster Ordnung im Falle nicht entarteter Energieniveaus

$$E_n = E_n^{(0)} + E_n^{(1)} = E_n^{(0)} + \left\langle\psi_n^{(0)}\left|\hat{v}_h\right|\psi_n^{(0)}\right\rangle , \tag{2.558}$$

$$\left|\psi_n\right\rangle = \left|\psi_n^{(0)}\right\rangle + \left|\psi_n^{(1)}\right\rangle = \left|\psi_n^{(0)}\right\rangle + \sum_{\substack{m=1,\\ m\neq n}}^{\infty} \frac{\left\langle\psi_m^{(0)}\left|\hat{v}_h\right|\psi_n^{(0)}\right\rangle}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} \left|\psi_m^{(0)}\right\rangle . \tag{2.559}$$

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. (2.547) mit $m = 2$ zunächst $\left|\psi\right\rangle = \left|\psi_n\right\rangle$ ein und multipliziert dies von links mit $\left\langle\psi_n^{(0)}\right|$:

$$\left\langle\psi_n^{(0)}\left|\hat{H}_0\right|\psi_n^{(2)}\right\rangle + \left\langle\psi_n^{(0)}\left|\hat{v}_h\right|\psi_n^{(1)}\right\rangle = E_n^{(2)} + \left\langle\psi_n^{(0)}\left|E_n^{(1)}\right|\psi_n^{(1)}\right\rangle + \left\langle\psi_n^{(0)}\left|E_n^{(0)}\right|\psi_n^{(2)}\right\rangle \tag{2.560}$$

Für die $\left|\psi_n^{(2)}\right\rangle$ macht man nun den Ansatz

$$\left|\psi_n^{(2)}\right\rangle = \sum_{m=1}^{\infty} C_{n,m}^{(2)}\left|\psi_m^{(0)}\right\rangle. \tag{2.561}$$

Damit folgt

$$\left\langle\psi_n^{(0)}\left|\hat{H}_0\sum_{m=1}^{\infty} C_{n,m}^{(2)}\left|\psi_m^{(0)}\right\rangle\right.\right\rangle = \left\langle\psi_n^{(0)}\left|\sum_{m=1}^{\infty} C_{n,m}^{(2)}E_m^{(0)}\left|\psi_m^{(0)}\right\rangle\right.\right\rangle = C_{n,n}^{(2)}E_n^{(0)}. \tag{2.562}$$

Weiterhin gilt

$$\left\langle\psi_n^{(0)}\left|E_n^{(1)}\right|\psi_n^{(1)}\right\rangle = \left\langle\psi_n^{(0)}\left|E_n^{(1)}\right|\sum_{m=1}^{\infty} C_{n,m}^{(1)}|\psi_m^{(0)}\rangle\right\rangle = E_n^{(1)}C_{n,n}^{(1)} = 0. \tag{2.563}$$

Somit folgt

$$\begin{aligned} E_n^{(2)} &= \left\langle\psi_n^{(0)}\left|\hat{v}_h\right|\psi_n^{(1)}\right\rangle = \left\langle\psi_n^{(0)}\left|\hat{v}_h\right|\sum_{m=1}^{\infty} C_{n,m}^{(1)}|\psi_m^{(0)}\rangle\right\rangle = \sum_{m=1}^{\infty} C_{n,m}^{(1)}\left\langle\psi_n^{(0)}\left|\hat{v}_h\right|\psi_m^{(0)}\right\rangle \\ &= \sum_{\substack{m=1,\\ m\neq n}}^{\infty} \frac{\left\langle\psi_m^{(0)}\left|\hat{v}_h\right|\psi_n^{(0)}\right\rangle\left\langle\psi_n^{(0)}\left|\hat{v}_h\right|\psi_m^{(0)}\right\rangle}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} = \sum_{\substack{m=1,\\ m\neq n}}^{\infty} \frac{\left|\left\langle\psi_n^{(0)}\left|\hat{v}_h\right|\psi_m^{(0)}\right\rangle\right|^2}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}}. \end{aligned} \tag{2.564}$$

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 Energieeigenwerte betrachtet. Seien also $N \in \mathbb{N}$ mit $N \geq 2$ und die ersten N ungestörten Zustände $\left|\psi_1^{(0)}\right\rangle, \ldots, \left|\psi_N^{(0)}\right\rangle$ seien entartet, also

$$\hat{H}_0\left|\psi_m^{(0)}\right\rangle = E_0\left|\psi_m^{(0)}\right\rangle \tag{2.565}$$

für $1 \leq m \leq N$. Formel (2.559) 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 $\lambda \to 0$ von der Beimischung entarteter Zustände ausgehen, also macht man den Ansatz

$$\left|\psi(\lambda)\right\rangle = \sum_{l=1}^{N} C_l\left|\psi_l^{(0)}\right\rangle + \lambda\sum_{m=N+1}^{\infty} C_m^{(1)}\left|\psi_m^{(0)}\right\rangle + \mathcal{O}(\lambda^2), \tag{2.566}$$

$$E(\lambda) = E_0 + \lambda E^{(1)} + \mathcal{O}(\lambda^2). \tag{2.567}$$

Dies setzt man in die Schrödinger-Gleichung Glg. (2.545) ein:

$$\begin{aligned}
&\sum_{l=1}^{N} C_l \hat{H}_0 \left|\psi_l^{(0)}\right\rangle + \sum_{l=1}^{N} C_l \lambda \hat{v}_h \left|\psi_l^{(0)}\right\rangle + \lambda \sum_{m=N+1}^{\infty} C_m^{(1)} \hat{H}_0 \left|\psi_m^{(0)}\right\rangle + \mathcal{O}\left(\lambda^2\right) \\
= \quad & E_0 \sum_{l=1}^{N} C_l \left|\psi_l^{(0)}\right\rangle + \lambda E^{(1)} \sum_{l=1}^{N} C_l \left|\psi_l^{(0)}\right\rangle + \lambda E_0 \sum_{m=N+1}^{\infty} C_m^{(1)} \left|\psi_m^{(0)}\right\rangle + \mathcal{O}\left(\lambda^2\right)
\end{aligned} \tag{2.568}$$

In nullter Ordnung ist dies erfüllt. Im Folgenden wird nur die erste Ordnung betrachtet. Die $\left|\psi_l^{(0)}\right\rangle$, $1 \leq l \leq N$, seien orthonormalisiert. Sei $j \in \mathbb{N}$ mit $1 \leq j \leq N$ gegeben. Durch Multiplikation der Terme erster Ordnung in Glg. (2.568) von links mit $\left\langle\psi_j^{(0)}\right|$ erhält man

$$\sum_{l=1}^{N} C_l \left\langle\psi_j^{(0)} \left|\hat{v}_h\right| \psi_l^{(0)}\right\rangle = E^{(1)} C_j. \tag{2.569}$$

Die Lösung $\left(C, \ldots, C_N, E^{(1)}\right)$ 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

$$\overleftrightarrow{v}_h \boldsymbol{C} = E^{(1)} \boldsymbol{C} \tag{2.570}$$

mit den Matrixelementen

$$V_{j,l} := \left\langle\psi_j^{(0)} \left|\hat{v}_h\right| \psi_l^{(0)}\right\rangle \tag{2.571}$$

und dem Vektor $\boldsymbol{C} := (C, \ldots, C_N)^T$. Da $\hat{v}_h$ hermitesch ist, ist auch die Matrix $\overleftrightarrow{v}_h$ hermitesch Als Lösung erhält man daher N orthonormale Eigenvektoren $\boldsymbol{C}^k$ zu den Eigenwerten $E_k^{(1)}$. Die zugehörigen N Zustände sind

$$\left|\psi_k\right\rangle = \sum_{l=1}^{N} C_l^{(k)} \left|\psi_l^{(0)}\right\rangle \tag{2.572}$$

mit der jeweiligen Energie

$$E_k = E_0 + E_k^{(1)}. \tag{2.573}$$

Diese Zustände sind orthonormal. Seien nämlich $k, m \in \mathbb{N}$ mit $1 \leq k, m \leq N$ gegeben. Dann gilt

$$\left\langle\psi_k \middle| \psi_m\right\rangle = \sum_{l=1}^{\infty} C_l^{(k)\star} C_l^{(m)} = \left\langle \boldsymbol{C}^{(k)} \middle| \boldsymbol{C}^{(m)}\right\rangle = \delta_{m,n}. \tag{2.574}$$

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. (2.423) erinnert:

$$a_B = \frac{\hbar^2}{m_e e^2} \tag{2.575}$$

Für die Energie-Eigenwerte im H-Atom gilt mit Glg. (2.449)

$$E_n = -\frac{Z^2}{2n^2} E_{\text{at}} \tag{2.576}$$

Für E_{at} kann man nun weiter rechnen

$$E_{\text{at}} = \frac{\hbar^2}{m_e a_B^2} = \frac{1}{a_B}\frac{\hbar^2}{m_e a_B} = \frac{1}{a_B}\frac{\hbar^2}{m_e}\frac{m_e e^2}{\hbar^2} = \frac{e^2}{a_B}. \tag{2.577}$$

Für ein $(Z-1)$ –fach ionisiertes Atom ist die atomare Energieskala

$$\varepsilon_{\text{at}} = Z^2 E_{\text{at}} = Z^2 \frac{e^2}{a_B} = Z^2 e^2 \frac{m_e e^2}{\hbar^2} = Z^2 e^4 \frac{m_e}{\hbar^2}\frac{c^2}{c^2} = m_e c^2 \left(\frac{Ze^2}{\hbar c}\right)^2 = m_e c^2 (Za)^2 . \tag{2.578}$$

a ist hierbei die *Feinstrukturkonstante*, für diese gilt

$$a := \frac{e^2}{\hbar c} \overset{\text{SI}}{=} \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 \hbar c} \approx \frac{1}{137}. \tag{2.579}$$

Die Spin-Bahn-Kopplung entsteht nicht durch einen eventuellen magnetischen Kerndipol. Das Elektron bewege sich in einer halbklassischen Betrachtung mit einer momentanen Geschwindigkeit $\boldsymbol{v}$ um den Kern. Im momentanen Ruhesystem des Elektrons existiert nach Glg. (2.209) ein magnetisches Feld

$$\boldsymbol{B}' = -\gamma \frac{\boldsymbol{v}}{c} \times \boldsymbol{E}, \tag{2.580}$$

welches das Elektron zu spüren bekommt. Die Funktion

$$\boldsymbol{u}(\boldsymbol{v}') := \frac{\boldsymbol{v}'}{\sqrt{1 - v'^2}} \tag{2.581}$$

mit

$$\boldsymbol{v}' := \frac{\boldsymbol{v}}{c} \tag{2.582}$$

beschreibt die Stärke des relativistischen Effektes. Die lineare Taylor-Entwicklung dieser Funktion lautet

$$\boldsymbol{u} = \boldsymbol{v}' + \mathcal{O}\left(\boldsymbol{v}'^2\right), \tag{2.583}$$

sodass man für das relativistische B-Feld hier nähert

$$\boldsymbol{B}' = -\frac{\boldsymbol{v}}{c} \times \boldsymbol{E} + \mathcal{O}\left(\left(\frac{\boldsymbol{v}}{c}\right)^2\right). \tag{2.584}$$

Die Terme höherer Ordnung werden nicht mehr mitnotiert. Mit $g \approx 2$ gilt für das magnetische Moment des Elektrons mit Glg. (2.536)

$$\boldsymbol{\mu} = -\frac{e}{m_e c}\boldsymbol{s}. \tag{2.585}$$

Somit erhält man eine Energie

$$-\boldsymbol{\mu} \cdot \boldsymbol{B}' = \frac{e}{m_e c}\boldsymbol{s} \cdot \boldsymbol{B}' = -\frac{e}{m_e c^2}\boldsymbol{s} \cdot (\boldsymbol{v} \times \boldsymbol{E}). \tag{2.586}$$

Für das E-Feld gilt $\boldsymbol{E} = \frac{Ze\boldsymbol{r}}{r^3}$, mit der Definition $\boldsymbol{l} = \boldsymbol{r} \times \boldsymbol{p}$ erhält man die Spin-Bahn-Wechselwirkung

$$V = -\boldsymbol{\mu} \cdot \boldsymbol{B}' = -\frac{e}{m_e c^2}\boldsymbol{s} \cdot (\boldsymbol{v} \times \boldsymbol{E}) = \frac{Ze^2}{m_e^2 c^2}\frac{\boldsymbol{l} \cdot \boldsymbol{s}}{r^3}. \tag{2.587}$$

Eine relativistische quantenmechanische Betrachtung des beschleunigten Elektrons mittels der *Dirac-Gleichung* ergibt an dieser Stelle einen zusätzlichen Faktor $1/2$. Der gesuchte Störoperator lautet also

$$\hat{v}_h = \frac{Ze^2}{2m_e^2 c^2}\frac{\hat{\boldsymbol{l}} \cdot \hat{\boldsymbol{s}}}{\hat{r}^3}. \tag{2.588}$$

Mit dem Gesamtdrehmoment-Operator

$$\hat{\boldsymbol{j}} := \hat{\boldsymbol{l}} + \hat{\boldsymbol{s}} \tag{2.589}$$

kann man dies zu

$$\begin{aligned}\hat{v}_h &= \frac{Ze^2}{4m_e^2c^2}\frac{2\hat{\boldsymbol{l}}\cdot\hat{\boldsymbol{s}}}{\hat{r}^3} = \frac{Ze^2}{4m_e^2c^2}\frac{2\hat{\boldsymbol{l}}\cdot\hat{\boldsymbol{s}}+\hat{\boldsymbol{s}}^2-\hat{\boldsymbol{s}}^2}{\hat{r}^3} = \frac{Ze^2}{4m_e^2c^2}\frac{\left(2\hat{\boldsymbol{l}}+\hat{\boldsymbol{s}}\right)\cdot\hat{\boldsymbol{s}}-\hat{\boldsymbol{s}}^2}{\hat{r}^3} = \frac{Ze^2}{4m_e^2c^2}\frac{\left(\hat{\boldsymbol{j}}+\hat{\boldsymbol{l}}\right)\cdot\left(\hat{\boldsymbol{j}}-\hat{\boldsymbol{l}}\right)-\hat{\boldsymbol{s}}^2}{\hat{r}^3}\\ &= \frac{Ze^2}{4m_e^2c^2}\frac{\hat{\boldsymbol{j}}^2-\hat{\boldsymbol{l}}^2-\hat{\boldsymbol{s}}^2}{\hat{r}^3}\end{aligned} \tag{2.590}$$

umschreiben. Um hiermit weiterarbeiten zu können, koppelt man die Drehimpuls-Eigenzustände des H-Atoms zu

$$|n,l,m,s,s_z\rangle = |n,l\rangle\,|l,m,s,s_z\rangle = |n,l\rangle\,\left|j,l,s,m_j\right\rangle = \left|n,j,l,s,m_j\right\rangle. \tag{2.591}$$

Da die Drehimpuls-Eigenzustände orthogonal sind und $\hat{v}_h$ nur auf die Radialkoordinaten wirkt, gilt für die Energieaufspaltung

$$\left\langle n,j,l,s,m_j\,|\hat{v}_h|\,n,j',l',s,m_j'\right\rangle = \Delta E\delta_{j,j'}\delta_{l,l'}\delta_{m_j,m_j'} \tag{2.592}$$

mit

$$\Delta E = \frac{Ze^2\hbar^2}{4m_e^2c^2}\left\langle n,l\left|\frac{1}{\hat{r}^3}\right|n,l\right\rangle\left[j\left(j+1\right)-l\left(l+1\right)-s\left(s+1\right)\right]. \tag{2.593}$$

Es gilt für $l \neq 0$

$$\begin{aligned}\left\langle\frac{1}{\hat{r}^3}\right\rangle &= \int_{\mathbb{R}^3}\frac{1}{r^3}\left|\psi\right|^2 d^3r = \int_{r=0}^{\infty}\int_0^{2\pi}\int_0^{\pi}\frac{1}{r^3}\left|\psi\right|^2 r^2\sin\left(\vartheta\right)d\vartheta d\varphi dr\\ &= \int_{r=0}^{\infty}\int_{\varphi=0}^{2\pi}\int_{\vartheta=0}^{\pi}\frac{1}{r}R_{n,l}\left(r\right)^2\left|Y_{l,m}\left(\vartheta,\varphi\right)\right|^2\sin\left(\vartheta\right)d\vartheta d\varphi dr\\ &= \int_0^{\infty}\frac{1}{r}R_{n,l}\left(r\right)^2 dr = \frac{4Z^3}{a_B^3n^4}\frac{(n-l-1)!}{(n+l)!}\int_0^r\frac{1}{r}\left(\frac{2Zr}{na_B}\right)^{2l}\left[L_{n-l-1,2l+1}\left(\frac{2Zr}{na_B}\right)\right]^2\exp\left(-\frac{2Zr}{na_B}\right)dr\\ &= \frac{4Z^3}{a_B^3n^4}\frac{(n-l-1)!}{(n+l)!}\int_0^{\infty}r^{2l-1}\left[L_{n-l-1,2l+1}\left(r\right)\right]^2\exp\left(-r\right)dr.\end{aligned}$$

Man identifiziert

$$m := n-l-1 \geq 0 \Rightarrow n = m+l+1, \tag{2.594}$$

$$k := 2l+1 \geq 3. \tag{2.595}$$

Hieraus folgen die Transformationen

$$n := m+1+\frac{1}{2}\left(k-1\right) = m+\frac{1}{2}\left(k+1\right), \tag{2.596}$$

$$l := \frac{1}{2}\left(k-1\right). \tag{2.597}$$

Mit Glg. (C.140) folgt

$$\begin{aligned}&\int_0^{\infty}r^{2l-1}\left[L_{n-l-1,2l+1}\left(r\right)\right]^2\exp\left(-r\right)dr = \int_0^{\infty}r^{k-2}\left[L_{m,k}\left(r\right)\right]^2\exp\left(-r\right)dr\\ &= \frac{(m+k)!}{m!}\frac{2m+1+k}{(k-1)\,k\,(k+1)} = \frac{(m+k)!}{m!}\frac{2n}{(k-1)\,k\,(k+1)} = \frac{(n+l)!}{(n-l-1)!}\frac{n}{2l\left(2l+1\right)\left(l+1\right)}\\ &= \frac{(n+l)!}{(n-l-1)!}\frac{n}{4l\left(l+\frac{1}{2}\right)\left(l+1\right)}.\end{aligned} \tag{2.598}$$

Somit gilt

$$\left\langle \frac{1}{\hat{r}^3} \right\rangle = \frac{Z^3}{a_B^3 n^3 l \left(l+\frac{1}{2}\right)(l+1)} = \frac{Z^3 m_e^3 e^6}{\hbar^6 n^3 l \left(l+\frac{1}{2}\right)(l+1)}. \tag{2.599}$$

Für $l = 0$ ist

$$\left\langle \frac{1}{\hat{r}^3} \right\rangle \notin \mathbb{R}, \tag{2.600}$$

allerdings ist in diesem Fall die Spin-Bahn-Kopplung wegen $j = l = \frac{1}{2}$ sowieso Null. Somit erhält man mit

$$\frac{Ze^2\hbar^2}{4m_e^2c^2}\frac{Z^3m_e^3e^6}{\hbar^6n^3} = \frac{m_eZ^4e^8}{4\hbar^4n^3c^2} = \frac{m_ec^2}{4n^3}\frac{Z^4e^8}{\hbar^4c^4} \tag{2.601}$$

als Zusammenfassung

$$\Delta E = \begin{cases} 0, \ l = 0, \\ \frac{m_ec^2(Za)^4}{4n^3}\frac{j(j+1)-l(l+1)-s(s+1)}{l\left(l+\frac{1}{2}\right)(l+1)}, \ l \neq 0. \end{cases} \tag{2.602}$$

Relativistische Effekte haben also einen Einfluss auf die Eigenenergien im H-Atom und somit auch auf das Spektrum.

2.3.11.3 Zeitabhängiger Fall

Bisher wurden nur zeitlich konstante Störungen $\hat{V}$ betrachtet, nun wird eine Zeitabhängigkeit $\hat{V}(t)$ zugelassen. In die zeitabhängige Schrödinger-Gleichung

$$\hat{H}(t)\left|\psi(t)\right\rangle = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\left|\psi(t)\right\rangle \tag{2.603}$$

ist nun ein Störoperator

$$\hat{H}(t) = \hat{H}_0 + \hat{V}(t) \tag{2.604}$$

einzusetzen. Die Lösungen $\left(\left|\psi_n^{(0)}\right\rangle, E_n\right)$ des stationären Problems

$$\hat{H}_0\left|\psi_n^{(0)}\right\rangle = E_n\left|\psi_n^{(0)}\right\rangle \tag{2.605}$$

seien wieder bekannt. Die $\left|\psi_n^{(0)}\right\rangle$ können mit einem zeitabhängigen Anteil versehen werden, man kann mit einem Bezeichnungsmissbrauch schreiben

$$\left|\psi_n^{(0)}\right\rangle = \left|\psi_n^{(0)}\right\rangle \exp\left(-i\frac{E_n}{\hbar}t\right). \tag{2.606}$$

Weiter als bis zur ersten Ordnung wird in diesem Abschnitt nicht gegangen. Man setzt nun mit $\lambda \in [0, 1]$

$$\hat{H}(\lambda, t) = \hat{H}_0 + \lambda\hat{v}_h(t), \tag{2.607}$$

$$\left|\psi(\lambda, t)\right\rangle = \sum_{m=1}^{\infty} C_m^{(0)}\left|\psi_m^{(0)}\right\rangle \exp\left(-i\frac{E_m}{\hbar}t\right) + \lambda\sum_{m=1}^{\infty} C_m^{(1)}(t)\left|\psi_m^{(0)}\right\rangle \exp\left(-i\frac{E_m}{\hbar}t\right) + \mathcal{O}(\lambda^2). \tag{2.608}$$

Damit erhält man

$$\begin{aligned} i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\left|\psi(\lambda, t)\right\rangle = & \sum_{m=1}^{\infty} E_m C_m^{(0)}\left|\psi_m^{(0)}\right\rangle \exp\left(-i\frac{E_m}{\hbar}t\right) \\ & + \lambda\sum_{m=1}^{\infty}\left(i\hbar\frac{\partial C_m^{(1)}}{\partial t} + C_m^{(1)}E_m\right)\left|\psi_m^{(0)}\right\rangle \exp\left(-i\frac{E_m}{\hbar}t\right) + \mathcal{O}(\lambda^2). \end{aligned} \tag{2.609}$$

Setzt man dies in Glg. (2.603) ein, erhält man

$$\begin{aligned}
&\hat{H}_0 \sum_{m=1}^{\infty} C_m^{(0)} \left|\psi_m^{(0)}\right\rangle \exp\left(-i\frac{E_m}{\hbar}t\right) + \lambda \hat{H}_0 \sum_{m=1}^{\infty} C_m^{(1)}(t) \left|\psi_m^{(0)}\right\rangle \exp\left(-i\frac{E_m}{\hbar}t\right) \\
&+\lambda \hat{v}_h(t) \sum_{m=1}^{\infty} C_m^{(0)} \left|\psi_m^{(0)}\right\rangle \exp\left(-i\frac{E_m}{\hbar}t\right) + \mathcal{O}(\lambda^2) = \sum_{m=1}^{\infty} C_m^{(0)} E_m \left|\psi_m^{(0)}\right\rangle \exp\left(-i\frac{E_m}{\hbar}t\right) \\
&+\lambda \sum_{m=1}^{\infty} \left(i\hbar \frac{\partial C_m^{(1)}}{\partial t} + C_m^{(1)} E_m\right) \left|\psi_m^{(0)}\right\rangle \exp\left(-i\frac{E_m}{\hbar}t\right) + \mathcal{O}(\lambda^2). \qquad (2.610)
\end{aligned}$$

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 $\langle\psi_k^{(0)}|$. Man erhält

$$\begin{aligned}
&C_k^{(1)}(t) E_k \exp\left(-i\frac{E_k}{\hbar}t\right) + \sum_{m=1}^{\infty} C_m^{(0)} \langle\psi_k^{(0)}|\hat{v}_h(t)|\psi_m^{(0)}\rangle \exp\left(-i\frac{E_m}{\hbar}t\right) = \left(i\hbar\frac{\partial C_k^{(1)}}{\partial t} + C_k^{(1)} E_k\right) \exp\left(-i\frac{E_k}{\hbar}t\right) \\
\Leftrightarrow \quad &\frac{\partial C_k^{(1)}}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar} \sum_{m=1}^{\infty} C_m^{(0)} \langle\psi_k^{(0)}|\hat{v}_h(t)|\psi_m^{(0)}\rangle \exp\left(i\frac{E_k - E_m}{\hbar}t\right). \qquad (2.611)
\end{aligned}$$

Also erhält man für die Beimischung der Zustände

$$C_k^{(1)}(t') = C_k^{(1)}(t_0) - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^{t'} \sum_{m=1}^{\infty} C_m^{(0)} \left\langle\psi_k^{(0)}|\hat{v}_h(t)|\psi_m^{(0)}\right\rangle \exp\left(i\frac{E_k - E_m}{\hbar}t\right) dt. \qquad (2.612)$$

Ist das System zum Zeitpunkt t_0 im Zustand n, so ergeben sich

$$\begin{aligned}
C_n^{(0)} &= 1, \\
C_{m\neq n}^{(0)} &= 0 \qquad (2.613)
\end{aligned}$$

und somit

$$C_k^{(1)}(t') = -\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^{t'} \left\langle\psi_k^{(0)}|\hat{v}_h(t)|\psi_n^{(0)}\right\rangle \exp\left(i\frac{E_k - E_n}{\hbar}t\right) dt. \qquad (2.614)$$

Hieraus lässt sich die zeitabhängige Lösung

$$\left|\psi(t)\right\rangle \approx \left|\psi_n^{(0)}\right\rangle \exp\left(-i\frac{E_n}{\hbar}t\right) + \sum_{k=1}^{\infty} C_k^{(1)}(t) \left|\psi_k^{(0)}\right\rangle \exp\left(-i\frac{E_k}{\hbar}t\right) \qquad (2.615)$$

konstruieren. Die Wahrscheinlichkeit, den Zustand $\left|\psi_m^{(0)}\right\rangle$ anzutreffen, ist gegeben durch

$$p_m(t) = \left|\delta_{mn} + C_m^{(1)}(t)\right|^2 \qquad (2.616)$$

Um die durch elektromagnetische Wellen induzierte Absorption und Emission zu verstehen, benötigt man Kenntnisse über die Wirkung eines periodischen Störoperators

$$\hat{V}(t) = \hat{V}_0 \exp(-i\omega t) + \hat{V}_0^{\star} \exp(i\omega t), \qquad (2.617)$$

die Addition des adjungierten Terms garantiert Hermitezität und somit reelle Messgrößen. Setzt man dies in Glg. (2.614) ein, folgt

$$\begin{aligned}
i\hbar C_k^{(1)}(t) &= \left\langle\psi_k^{(0)}\middle|\hat{V}_0\middle|\psi_n^{(0)}\right\rangle \int_0^{\exp} \left(i\left(\omega_{k,n} - \omega\right)t'\right) dt' \\
&\quad + \left\langle\psi_k^{(0)}\middle|\hat{V}_0^{\star}\middle|\psi_n^{(0)}\right\rangle \int_0^{\exp} \left(i\left(\omega_{k,n} + \omega\right)t'\right) dt'. \qquad (2.618)
\end{aligned}$$

dabei wurden $t_0 = 0$ gesetzt und

$$\omega_{k,n} := \omega_k - \omega_n \tag{2.619}$$

definiert. Definiere weiter

$$\Omega_\pm := \omega_{k,n} \pm \omega, \tag{2.620}$$

dann ist

$$\begin{aligned}
\int_0^{\exp} (i\Omega_\pm t')\, dt' &= \frac{\exp(i\Omega_\pm t) - 1}{i\Omega_\pm} \\
\Rightarrow \left| \int_0^{\exp} (i\Omega_\pm t')\, dt' \right|^2 &= \left| \frac{\exp(i\Omega_\pm t) - 1}{i\Omega_\pm} \right|^2 = \frac{1}{\Omega_\pm^2} \left[(\cos(\Omega_\pm t) - 1)^2 + \sin^2(\Omega_\pm t) \right] \\
&= \frac{1}{\Omega_\pm^2} \left[\cos^2(\Omega_\pm t) + 1 - 2\cos(\Omega_\pm t) + \sin^2(\Omega_\pm t) \right] = \frac{2}{\Omega_\pm^2} \left[1 - \cos(\Omega_\pm t) \right] \\
&= \frac{2}{\Omega_\pm^2} \left[1 - \cos^2\left(\frac{\Omega_\pm t}{2}\right) + \sin^2\left(\frac{\Omega_\pm t}{2}\right) \right] = \frac{4\sin^2\left(\frac{\Omega_\pm t}{2}\right)}{\Omega_\pm^2}.
\end{aligned} \tag{2.621}$$

Dies liefert nur einen wesentlichen Beitrag, wenn $\Omega_\pm$ klein ist, wegen $\Omega_+ = \Omega_- + 2\omega$ trägt daher im Regelfall nur eines der beiden Integrale in Glg. (2.618) zum Ergebnis bei. Mit $\hat{V}- := \hat{V}_0$ und $\hat{V}+ := \hat{V}_0^\star$ erhält man

$$R_{n\to k} = \frac{\left| C_k^{(1)}(t) \right|^2}{=} \frac{\left| \left\langle \psi_k^{(0)} \middle| \hat{V}_\pm \middle| \psi_n^{(0)} \right\rangle \right|^2}{\hbar^2} \frac{4\sin^2\left(\frac{\Omega_\pm t}{2}\right)}{\Omega_\pm^2 t}. \tag{2.622}$$

hier bei ist $R_{n\to k}$ 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

$$f(\Omega) := \frac{4\sin^2\left(\frac{\Omega t}{2}\right)}{\Omega^2 t}, \tag{2.623}$$

dann gilt mit Glg. (A.97)

$$\lim_{t\to\infty} f(\Omega) = 2\pi\delta(\Omega). \tag{2.624}$$

Dies darf man im Fall $t \gg 1/\Omega$ verwenden, es folgt

$$R_{n\to k} = \frac{2\pi}{\hbar} \left| \left\langle \psi_k^{(0)} \middle| \hat{V}_\pm \middle| \psi_n^{(0)} \right\rangle \right|^2 \delta(E_k - E_n \pm \hbar\omega). \tag{2.625}$$

Für $E_k > E_n$ ist das Minuszeichen zu verwenden. Im Falle einer zeitunabhängigen Störung $\omega = 0$ folgt

$$R_{n\to k} = \frac{2\pi}{\hbar} \left| \left\langle \psi_k^{(0)} \middle| \hat{V}_\pm \middle| \psi_n^{(0)} \right\rangle \right|^2 \delta(E_k - E_n). \tag{2.626}$$

2.3.11.4 Übergänge im H-Atom

Nehme ein Vektorpotential der Form

$$\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r}, t) = A_0 \boldsymbol{e} \cos(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r} - \omega t) \tag{2.627}$$

an mit $\omega = ck$ und $\boldsymbol{e}\cdot\boldsymbol{k} = 0$, hierbei ist $\boldsymbol{e}$ der normierte Polarisationsvektor. Dann folgt

$$\boldsymbol{B} = \nabla \times \boldsymbol{A} \overset{\text{Glg. (B.52)}}{=} -A_0 \boldsymbol{e} \times \boldsymbol{k} \cos(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r} - \omega t) = A_0 \boldsymbol{k} \times \boldsymbol{e} \cos(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r} - \omega t). \tag{2.628}$$

Hierdurch wird also eine elektromagnetische Welle beschrieben. Für den Hamilton-Operator folgt

$$\hat{H} = \frac{1}{2m_e}\left(-i\hbar\nabla + \frac{e}{c}\boldsymbol{A}\right)^2 - \frac{e^2}{r} \overset{\text{Glg. (B.53)}}{=} \frac{\hat{\boldsymbol{p}}^2}{2m_e} - \frac{e^2}{r} + \frac{e}{m_e c}\hat{\boldsymbol{A}}\cdot\hat{\boldsymbol{p}} = \hat{H}_0 + \hat{v}_h(t) \tag{2.629}$$

mit dem Störoperator

$$\hat{v}_h(t) = \frac{e}{m_e c}\hat{\boldsymbol{A}} \cdot \hat{\boldsymbol{p}}. \tag{2.630}$$

Die im Vektorprodukt quadratischen Terme wurden vernachlässigt. Mit

$$\cos = \frac{\exp(+) + \exp(-)}{2} \tag{2.631}$$

kann man schreiben

$$\hat{V}(t) = \hat{V}_0 \exp(-i\omega t) + \hat{V}_0^+ \exp(i\omega t), \tag{2.632}$$

hierbei wurde

$$\hat{V}_0 = \frac{eA_0}{2m_e c}\exp(i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r})\,\boldsymbol{e}\cdot\hat{\boldsymbol{p}} \tag{2.633}$$

eingesetzt. Mit der *Langwellennäherung*

$$\exp(i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}) = 1 + i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r} + \ldots = 1 + \mathcal{O}(\langle r\rangle/\lambda) \approx 1 \tag{2.634}$$

erhält man

$$\hat{V}_0 \approx \frac{eA_0}{2m_e c}\boldsymbol{e}\cdot\hat{\boldsymbol{p}}. \tag{2.635}$$

Dies ist hier gerechtfertigt, da man mit $\langle r\rangle \sim a_B$ rechnen kann

$$\frac{\langle r\rangle}{\lambda} \sim \frac{a_B}{\lambda} = \frac{a_B\omega}{2\pi c} = \frac{a_B\Delta E}{2\pi\hbar c} \sim \frac{a_B E_{\text{at}}}{20\pi\hbar c} = \frac{\hbar}{m_e a_B 20\pi c} = \frac{e^2}{20\hbar\pi c} \to \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 20\hbar\pi c} \sim 10^{-4}. \tag{2.636}$$

Dabei wurde $\Delta E \sim \frac{E_{\text{at}}}{10}$ eingesetzt. Mit Glg. (2.626) erhält man

$$R_{a\to b} = \frac{\pi e^2 A_0^2}{2m_e^2 c^2\hbar}\left|\langle b|\boldsymbol{e}\cdot\hat{\boldsymbol{p}}|a\rangle\right|^2\left[\delta(E_b - E_a + \hbar\omega) + \delta(E_b - E_a - \hbar\omega)\right]. \tag{2.637}$$

Die Übergangsraten sind also proportional zu A_0^2, was wiederum proportional zur Energiedichte des elektromagnetischen Feldes ist. Die Übergangsraten sind also proportional zum Betrag des Matrixelementes

$$M_{b,a} = \langle b|\boldsymbol{e}\cdot\hat{\boldsymbol{p}}|a\rangle. \tag{2.638}$$

Dies muss noch etwas umformuliert werden. Zunächst rechnet man

$$\left[\hat{H}_0, \hat{\boldsymbol{r}}\right] = \hat{H}_0\hat{\boldsymbol{r}} - \hat{\boldsymbol{r}}\hat{H}_0 = -\frac{\hbar^2}{2m_e}\nabla\nabla\cdot\hat{\boldsymbol{r}} + \hat{\boldsymbol{r}}\frac{\hbar^2}{2m_e}\Delta. \tag{2.639}$$

Es gilt

$$\begin{aligned} \nabla\cdot(\boldsymbol{r}\psi) &= 3\psi + \boldsymbol{r}\cdot\nabla\psi \\ \Rightarrow \nabla^2(\boldsymbol{r}\psi) &= 6\nabla\psi + \boldsymbol{r}\Delta\psi. \end{aligned} \tag{2.640}$$

Somit folgt

$$\left[\hat{H}_0, \hat{\boldsymbol{r}}\right] = -\frac{\hbar^2}{2m_e}6\nabla\psi = \frac{3\hbar}{im_e}\hat{\boldsymbol{p}} \Rightarrow \hat{\boldsymbol{p}} = \frac{im_e}{3\hbar}\left[\hat{H}_0, \hat{\boldsymbol{r}}\right]. \tag{2.641}$$

Somit kann man schreiben

$$M_{b,a} = im_e\frac{E_b - E_a}{3\hbar}\langle b|\boldsymbol{e}\cdot\hat{\boldsymbol{r}}|a\rangle. \tag{2.642}$$

Die Eigenzustände im H-Atom sind aus Glg. (2.459) bekannt, es gilt also

$$M_{b,a} \quad \propto \quad \langle n, l, m \,|\boldsymbol{e} \cdot \hat{\boldsymbol{r}}|\, n, l, m \rangle \,. \tag{2.643}$$

Auf den Spin wird hier verzichtet. Der Radialanteil liefert keine Auswahlregeln für Δn, daher ist hier nur

$$M_{b,a} \quad \propto \quad \int Y^{\star}_{l_b,m_b} \boldsymbol{e} \cdot \hat{\boldsymbol{r}} Y_{l_a,m_a} d\Omega. \tag{2.644}$$

relevant. Man schreibt

$$\boldsymbol{e} \cdot \boldsymbol{r} \quad = \quad r\left(\varepsilon_x \sin(\theta) \cos\left(\varphi\right) + \varepsilon_y \sin(\theta) \sin\left(\varphi\right) + \varepsilon_z \cos(\theta)\right). \tag{2.645}$$

Aus den Glg.en (C.165) - (C.166) folgt

$$\cos(\theta)\, Y_{l,m} \quad = \quad \alpha Y_{l-1,m} + \beta Y_{l+1,m}, \tag{2.646}$$

$$\sin(\theta)\, Y_{l,m} \quad = \quad \gamma e^{-i\varphi} Y_{l-1,m+1} + \delta e^{-i\varphi} Y_{l+1,m+1} \tag{2.647}$$

mit hier nicht relevanten Koeffizienten $\alpha, \beta, \gamma, \delta$. Somit hat man

$$\Delta l \quad = \quad l_b - l_a = \pm 1, \tag{2.648}$$

$$\Delta m \quad = \quad 0, \pm 1. \tag{2.649}$$

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

$$\psi = \psi\left(x_i\right) \tag{2.650}$$

beschrieben mit $1 \leq i \leq N$ und $x_i = (\boldsymbol{r}_i, \sigma_i)$, wobei $\boldsymbol{r}_i$ 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 $\mathbb{R}^{3N} \to \mathbb{C}$ vorstellen.[1] Definiere nun für $i, j \in \mathbb{N}$ mit $1 \leq i, j \leq N$ den *Permutationsoperator* $\hat{P}_{i,j}$ durch

$$\hat{P}_{i,j}\psi\left(\ldots, x_i, \ldots, x_j, \ldots\right) := \psi\left(\ldots, x_j, \ldots, x_i, \ldots\right). \tag{2.651}$$

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:

$$\hat{P}_{i,j}\hat{H} = \hat{H}. \tag{2.652}$$

Hieraus folgt

$$\left[\hat{P}_{i,j}, \hat{H}\right] = 0, \tag{2.653}$$

und das bedeutet die Existenz eines $\lambda \in \mathbb{C}$ mit

$$\hat{P}_{i,j}\psi\left(x_k\right) = \lambda\psi\left(x_k\right) \tag{2.654}$$

für Eigenfunktionen $\psi\left(x_k\right)$ des Hamilton-Operators, welches von i, j abhängen kann, was hier in der Notation vernachlässigt wurde. Es folgt ohnehin durch nochmalige Anwendung desselben Operators

$$\lambda^2 = 1, \tag{2.655}$$

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,

[1] Man kann sich leicht klarmachen, dass es nicht möglich ist, eine solche Funktion für ein realistisches System zu tabellieren.

also

$$\psi\left(\dots, x_i, \dots, x_j, \dots\right) = \psi\left(\dots, x_j, \dots, x_i, \dots\right) \tag{2.656}$$

gilt. Wendet man hierauf nun $\hat{P}_{i,j}$ an, folgt

$$-\psi\left(\dots, x_i, \dots, x_j, \dots\right) = \psi\left(\dots, x_i, \dots, x_j, \dots\right), \tag{2.657}$$

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

$$N_{\text{points}} = \left(10^3 \cdot 2\right)^N = 2^N \cdot 10^{3N} \approx 10^{33} \tag{2.658}$$

Datenpunkte. Es handelt sich um jeweils zwei komplexe Zahlen, also braucht man ca.

$$S = 16 \cdot 10^{33} \approx 10^{22} \text{ Terrabyte} \tag{2.659}$$

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 $1 \leq i \leq N$

$$\frac{dn_i}{dt} = \sum_{j=1}^{N} U_{i,j} - U_{j,i}. \tag{2.660}$$

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 $\overleftrightarrow{v}$ 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

$$r = \left(q_1, \dots, q_f; p_1, \dots, p_f\right) \tag{2.661}$$

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,

$$r = (n_i)\,. \tag{2.662}$$

Ein *Makrozustand* M wird durch die Angabe der Wahrscheinlichkeiten P_r für die Mikrozustände r definiert,

$$M := (P_r)\,. \tag{2.663}$$

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

$$P_r := \lim_{N\to\infty} \frac{N_r}{N} \tag{2.664}$$

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

$$\hat{\varrho}\,(t) := \frac{1}{N}\sum_{j=1}^{N} |j\rangle\,\langle j|\,. \tag{2.665}$$

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 $\left(\left|\psi_k\right\rangle\right)$ 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 $\left|\psi_l\right\rangle$ anzutreffen, folgt

$$P_l = \frac{N_l}{N} = \frac{1}{N}\sum_{j=1}^{N} \left|\langle\psi_l|j\rangle\right|^2 = \frac{1}{N}\sum_{j=1}^{N} \langle\psi_l|j\rangle\,\langle j|\psi_l\rangle = \langle\psi_l\left|\hat{\varrho}\right|\psi_l\rangle\,. \tag{2.666}$$

Hierbei wurde N_r als die Anzahl der Systeme interpretiert, die bei einer quantenmechanischen Messung im Zustand $\left|\psi_r\right\rangle$ angetroffen werden. Der Makrozustand (P_r) lässt sich also aus dem Dichteoperator ermitteln, daher heißt der Dichteoperator auch *statistischer Operator*. Hieraus folgt weiter

$$\mathrm{tr}\left(\hat{\varrho}\right) \quad = \quad 1. \tag{2.667}$$

Für einen Erwartungswert $\left\langle\hat{A}\right\rangle$ folgt in dem Fall, dass $\hat{A}$ hermitesch ist

$$\begin{aligned}\left\langle\hat{A}\right\rangle &= \frac{1}{N}\sum_{j=1}^{N}\left\langle j\left|\hat{A}\right|j\right\rangle = \frac{1}{N}\sum_{j=1}^{N}\sum_{k=1}^{\infty}\langle j|\psi_k\rangle\left\langle\psi_k\left|\hat{A}\right|j\right\rangle = \frac{1}{N}\sum_{j=1}^{N}\sum_{k=1}^{\infty}\left\langle\psi_k\left|\hat{A}\right|j\right\rangle\langle j|\psi_k\rangle \\ &= \sum_{k=1}^{\infty}\left\langle\psi_k\left|\frac{1}{N}\sum_{j=1}^{N}\hat{A}\right|j\right\rangle\left\langle j\middle|\psi_k\right\rangle = \sum_{k=1}^{\infty}\left\langle\psi_k\left|\hat{A}\hat{\varrho}\right|\psi_k\right\rangle = \mathrm{tr}\left(\hat{A}\hat{\varrho}\right).\end{aligned} \tag{2.668}$$

Seien $\left|\psi_l\right\rangle, \left|\psi_m\right\rangle$ zwei Zustände, dann gilt

$$\begin{aligned}\langle\psi_l|\hat{\varrho}\psi_m\rangle &= \frac{1}{N}\langle\psi_l|\sum_{j=1}^{N}|j\rangle\,\langle j|\psi_m\rangle = \frac{1}{N}\sum_{j=1}^{N}\langle\psi_l|j\rangle\,\langle j|\psi_m\rangle = \frac{1}{N}\left(\sum_{j=1}^{N}\langle\psi_m|j\rangle\,\langle j|\psi_l\rangle\right)^{\star} \\ &= \frac{1}{N}\left(\langle\psi_m|\sum_{j=1}^{N}|j\rangle\,\langle j|\psi_l\rangle\right)^{\star} = \langle\psi_m|\hat{\varrho}\psi_l\rangle^{\star} = \langle\hat{\varrho}\psi_l|\psi_m\rangle\,.\end{aligned} \tag{2.669}$$

Der Dichteoperator ist also hermitesch. Die letzte Eigenschaft des Dichteoperators, die hier festgehalten werden

soll ist

$$\begin{aligned}\operatorname{tr}\left(\hat{\varrho}^2\right) &= \langle\hat{\varrho}\rangle = \frac{1}{N}\sum_{j=1}^{N}\langle j|\hat{\varrho}|j\rangle = \frac{1}{N}\sum_{j=1}^{N}\langle j|\frac{1}{N}\sum_{j'=1}^{N}|j'\rangle\langle j'|j\rangle \\ &= \frac{1}{N^2}\sum_{j,j'=1}^{N}|\langle j|j'\rangle|^2 \leq 1\frac{1}{N^2}\sum_{j,j'=1}^{N}1 = 1. \end{aligned} \tag{2.670}$$

Es ist also genau dann $\operatorname{tr}\left(\hat{\varrho}^2\right) = 1$, 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

$$E = \operatorname{tr}\left(\hat{H}\hat{\varrho}\right). \tag{2.671}$$

Mit der zeitabhängigen SG folgt

$$i\hbar\frac{\partial\hat{\varrho}}{\partial t} = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}\hat{H}|j\rangle\langle j| + |j\rangle\, i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\langle j| \tag{2.672}$$

Mit

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\langle j| = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|j\rangle^+ = -\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|j\rangle\right)^+ = -\left(\hat{H}|j\rangle\right)^+ = -\langle j|\hat{H} \tag{2.673}$$

erhält man

$$i\hbar\frac{\partial\hat{\varrho}}{\partial t} = \left[\hat{H},\hat{\varrho}\right]. \tag{2.674}$$

Dies ist die *von Neumann-Gleichung*.

Ein abgeschlossenes System sei einem konstanten Störoperator $\hat{v}_h$ ausgesetzt, dann folgt mit Glg. (2.626) für die Übergangsrate $R_{r,r'}$ zwischen zwei Mikrozuständen $|\psi_r\rangle, |\psi_{r'}\rangle$

$$R_{r,r'} = \frac{2\pi}{\hbar}\left|\langle\psi_r|\hat{v}_h|\psi_{r'}\rangle\right|^2 = R_{r',r}. \tag{2.675}$$

Für die Zeitableitung der Wahrscheinlichkeiten $P_r(t)$ folgt somit

$$\frac{dP_r(t)}{dt} = -\sum_{r'}R_{r,r'}P_r + \sum_{r'}R_{r',r}P_{r'} = \sum_{r'}R_{r,r'}\left(P_{r'} - P_r\right). \tag{2.676}$$

Glg. (2.676) nennt man *Mastergleichung*. Definiere

$$H(t) := \sum_{r=1}^{\infty}P_r\ln\left(P_r\right). \tag{2.677}$$

Dann gilt

$$\begin{aligned}\frac{dH}{dt} &= \sum_{r}\left(\dot{P}_r\ln\left(P_r\right) + \dot{P}_r\right) = \frac{1}{2}\left[\sum_{r}\dot{P}_r\ln\left(eP_r\right) + \sum_{r'}\dot{P}_{r'}\ln\left(eP_{r'}\right)\right] \\ &= \frac{1}{2}\sum_{r,r'}R_{r,r'}\left(P_{r'} - P_r\right)\left[\ln\left(eP_r\right) - \ln\left(eP_{r'}\right)\right] = \frac{1}{2}\sum_{r,r'}R_{r,r'}P_r\left(1 - \frac{P_{r'}}{P_r}\right)\ln\left(\frac{P_{r'}}{P_r}\right) \end{aligned} \tag{2.678}$$

Es gelten $R_{r,r'}P_r \geq 0$ sowie

$$(1 - x)\ln(x) \leq 0. \tag{2.679}$$

Somit gilt

$$\frac{dH}{dt} \leq 0. \tag{2.680}$$

Glg. (2.680) bezeichnet man als *H-Theorem*. Als *Gleichgewichtszustand* ist der Zustand mit konstanten P_r definiert, also mit $\dot{H} = 0$ oder $H =$ minimal. Weiter definiert man die Entropie S durch

$$S := -k_B H \tag{2.681}$$

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. (2.678) gilt im Gleichgewicht

$$P_r = P_{r'} \tag{2.682}$$

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

$$\Omega(E, x) := \sum_{r: E - \delta E \leq E_r < E} 1. \tag{2.683}$$

Hierbei bezeichnet x alle Parameter außer der Energie, die das System makrokopisch festlegen, insbesondere das Volumen. Da alle zugänglichen Mikrozustände gleich wahrscheinlich sind, gilt

$$P_r = \frac{1}{\Omega(E, x)} \cdot \begin{cases} 1, & E - \delta E \leq E_r < E, \\ 0, & \text{sonst} \end{cases} \tag{2.684}$$

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

$$S(E, x) = -k_B \sum_{r=1}^{\infty} \frac{1}{\Omega(E, x)} \ln\left(\frac{1}{\Omega(E, x)}\right) = k_B \ln\left[\Omega(E, x)\right]. \tag{2.685}$$

Für die Energie eines Systems kann man mit Bezug auf eine Orthonormalbasis $\left(\left|\psi_k\right\rangle\right)$ aus Eigenzuständen des Hamilton-Operators schreiben

$$E = \sum_{k=1}^{\infty} P_k E_k(x). \tag{2.686}$$

Für die Änderung der Energie folgt in linearer Ordnung

Erster Hauptsatz der Thermodynamik

$$\Leftrightarrow dE = \underbrace{E\sum_{k=1}^{\infty} dP_k}_{=\text{ Wärme } dQ} + \underbrace{\sum_{k=1}^{\infty} P_k \frac{\partial E(x)}{\partial x} dx}_{=-\text{Arbeit } =-dW}. \tag{2.687}$$

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:

$$dE = dQ_{\text{qs}} - dW_{\text{qs}} \tag{2.688}$$

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

$$X_i := -\sum_{k=1}^{\infty} P_k \frac{\partial E_k(x)}{\partial x_i}. \tag{2.689}$$

Im Gleichgewicht wird dies zu

$$X_i = -\frac{\partial E(x)}{\partial x_i}. \tag{2.690}$$

Bei einem quasistatischen Prozess gilt also

$$dW_{\text{qs}} = -\sum_i \frac{\partial E(x)}{\partial x_i} dx_i = \sum_i X_i dx_i. \tag{2.691}$$

Der Druck p ist die verallgemeinerte Kraft des Volumens:

$$p(E,x) := -\sum_{k=1}^{\infty} P_k \frac{\partial E_k(x)}{\partial V} \tag{2.692}$$

Im Fall $x = V$, wenn also der einzige äußere Parameter das Volumen ist, folgt

$$dE = dQ_{\text{qs}} - pdV \tag{2.693}$$

Die *Temperatur* T wird durch

$$\frac{1}{T} := \frac{\partial S(E,x)}{\partial E} \tag{2.694}$$

definiert, weiterhin legt man

$$\beta := \frac{1}{k_B T} \tag{2.695}$$

als Abkürzung fest. Glg. (2.689) ist unhandlich, da eine Mittelung über unendlich viele quantenmechanische Zustände erfolgen muss. Um eine alternative Formel herzuleiten, geht man von der mikrokanonischen Zustandssumme

$$\Omega(E,x) = \Omega(E,x_1,x_i) = \sum_{r:E-\delta E \leq E_r < E} 1 \tag{2.696}$$

aus, hierbei steht x_i für alle äußeren Parameter außer x_1, wobei x_1 willkürlich ausgewählt ist. Es gilt

$$\frac{\partial \ln\left[\Omega\left(E,x\right)\right]}{\partial x_1} = \frac{\ln\left[\Omega\left(E,x_1+dx_1,x_i\right)\right]-\ln\left[\Omega\left(E,x_1,x_i\right)\right]}{dx_1}. \tag{2.697}$$

Nun rechnet man

$$\Omega\left(E,x_1+dx_1,x_i\right) = \sum_{r:E-\delta E\leq E_r(x_1+dx_1,x_i)<E} 1 = \sum_{r:E-\delta E\leq E_r(x)+dE_r<E} 1 \tag{2.698}$$

mit

$$dE_r = \frac{\partial E_r}{\partial x_1}dx_1. \tag{2.699}$$

Man kann

$$dE_r = \overline{dE_r} \tag{2.700}$$

setzen, wobei die Mittelung über alle Mikrozustände des Gleichgewichtszustandes erfolgt:

$$\Omega\left(E,x_1+dx_1,x_i\right) = = \sum_{r:E-\overline{dE_r}-\delta E\leq E_r(x)<E-\overline{dE_r}} 1 = \Omega\left(E-\overline{dE_r},x\right) \tag{2.701}$$

Wegen

$$X_i = -\overline{\frac{\partial E}{\partial x_i}} \tag{2.702}$$

ist

$$\overline{dE_r} = -X_1 x_1. \tag{2.703}$$

Somit gilt

$$\begin{aligned}\frac{\partial \ln\left[\Omega\left(E,x\right)\right]}{\partial x_1} &= -\frac{\ln\left[\Omega\left(E-\overline{dE_r},x\right)\right]-\ln\left[\Omega\left(E,x\right)\right]}{\overline{dE_r}/X_1} = \frac{\partial \ln\left[\Omega\left(E,x\right)\right]}{\partial E}X_1 = \beta X_1 \\ \Rightarrow X_i &= T\frac{\partial S\left(E,x\right)}{\partial x_i}.\end{aligned} \tag{2.704}$$

Für den Druck folgt

$$p = T\frac{\partial S\left(E,x\right)}{\partial V} \tag{2.705}$$

Für die Änderung der Entropie gilt

$$dS = \frac{\partial S\left(E,x\right)}{\partial E}dE + \sum_i \frac{\partial S\left(E,x\right)}{\partial x_i}dx_i = \frac{dE}{T} + \sum_i \frac{X_i}{T}dx_i \tag{2.706}$$

$$\Leftrightarrow dS = \frac{1}{T}\left(dQ - dW + dW_{\text{qs}}\right) = \frac{dQ_{\text{qs}}}{T} \tag{2.707}$$

Sind zwei Systeme A, B mit den mikrokanonischen Zustandssummen $\Omega_A\left(E_A,x_A\right)$ und $\Omega_E\left(E_B,x_B\right)$ im Gleichgewicht, so gilt für die Energie E des Gesamtsystems

$$E = E_A + E_B. \tag{2.708}$$

Für die Zustandssumme $\Omega\left(E,x\right)$ des Gesamtsystems folgt

$$\Omega\left(E,x\right) = \Omega_A\left(E_A,x_A\right)\Omega_B\left(E_B,x_B\right). \tag{2.709}$$

Die Zustandssummen der Subsysteme müssen multipliziert werden, da alle Kombinationen von Mikrozuständen auftreten können. Für die Entropie S des Gesamtsystems folgt

$$S(E,x) = k_B \ln\left[\Omega_A(E_A,x_A)\right] + k_B \ln\left[\Omega_B(E_B,x_B)\right] = S_A(E_A,x_A) + S_B(E-E_A,x_B)\,. \tag{2.710}$$

Die Entropie ist also additiv. Im Gleichgewicht ist sie maximal:

$$\frac{\partial S}{\partial E_A} = 0 \Rightarrow \frac{\partial S_A}{\partial E_A} + \frac{\partial S_B}{\partial E_A} = \frac{\partial S_A}{\partial E_A} - \frac{\partial S_B}{\partial E_B} = 0 \Rightarrow T_A = T_B \tag{2.711}$$

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

$$\nabla S = 0 \Rightarrow \frac{\partial S}{\partial x_{i,A}} = 0 \Rightarrow \frac{\partial S_A}{\partial x_{i,A}} + \frac{\partial S_B}{\partial x_{i,A}} = \frac{\partial S_A}{\partial x_{i,A}} - \frac{\partial S_B}{\partial x_{i,B}} = 0. \tag{2.712}$$

Hieraus folgt unter der Annahme $T_A = T_B$ die Gleichheit der generalisierten Kräfte

$$\boxed{X_{i,A} = X_{i,B}.} \tag{2.713}$$

Eine Gleichung der Form

$$p = p(T,V,N) \tag{2.714}$$

nennt man *thermische Zustandsgleichung*, während Gleichungen der Form

$$E = E(T,V,N) \tag{2.715}$$

als *kalorische Zustandsgleichungen* bezeichnet werden. Es sei an dieser Stelle auf die in der Thermodynamik übliche Notation

$$\frac{\partial f(x,y,z)}{\partial x} = \left(\frac{\partial f}{\partial x}\right)_{y,z} \tag{2.716}$$

für partielle Ableitungen hingewiesen. Die *Wärmekapazität* eines Stoffes ist definiert durch

$$C^{(p)} := \left(\frac{dQ_{\mathrm{qs}}}{dT}\right)_p \tag{2.717}$$

bzw.

$$C^{(V)} := \left(\frac{dQ_{\mathrm{qs}}}{dT}\right)_V, \tag{2.718}$$

je nachdem, ob bei dem Prozess der Druck oder das Volumen konstantgehalten wird. Mit Glg. (2.707) folgt

$$C^{(p)} = T\left(\frac{\partial S}{\partial T}\right)_p, \tag{2.719}$$

$$C^{(V)} = T\left(\frac{\partial S}{\partial T}\right)_V. \tag{2.720}$$

Die *spezifische Wärmekapazität* eines Systems mit der Masse m ist definiert durch

$$c^{(p)} := \frac{1}{m} C^{(p)} \tag{2.721}$$

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

$$E = E_A + E_B = \text{const.} \tag{2.722}$$

Für die mikrokanonische Zustandssummen Ω des Gesamtsystems gilt

$$\Omega = \Omega\left(E, x\right). \tag{2.723}$$

Das Gesamtsystem ist gleich wahrscheinlich in jedem seiner zugänglichen Mikrozustände anzutreffen. Die Anzahl der Zustände $n\left(E_A\right)$ mit einer festen Energie E_A des Systems A ist gegeben durch

$$n\left(E_A\right) = \Omega_A\left(E_A, x_A\right)\Omega_B\left(E_B, x_B\right), \tag{2.724}$$

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

$$P\left(E_A\right) = \frac{n_A}{\Omega\left(E, x\right)} = \frac{\Omega_A\left(E_A, x_A\right)\Omega_B\left(E_B, x_B\right)}{\Omega\left(E, x\right)}, \tag{2.725}$$

das System A bei einer Energie E_A vorzufinden, dividiert durch die Anzahl dieser gleich wahrscheinlichen Zustände:

$$P_r = \frac{P\left(E_A\right)}{\Omega_A\left(E_A, x_A\right)} = \frac{\Omega_B\left(E - E_A, x - x_A\right)}{\Omega\left(E, x\right)} \tag{2.726}$$

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:

$$\ln\left[\Omega_B\left(E - E_A, x - x_A\right)\right] = \ln\left[\Omega_B\left(E, x - x_A\right)\right] - \beta E_A + \mathcal{O}\left(E_A^2\right) \tag{2.727}$$

Dabei ist

$$\beta = \frac{1}{k_B T_K} \tag{2.728}$$

mit der Temperatur des Wärmebades zu bilden, die aber gleich der Temperatur T des Gesamtsystems ist, da sich dieses im Gleichgewicht befindet (s. Glg. (2.711)). Unter Vernachlässigung der Terme höherer Ordnung gilt

$$P_r = \frac{\Omega_B\left(E, x - x_A\right)}{\Omega\left(E, x\right)} e^{-\beta E_r} = \frac{1}{Z} e^{-\beta E_r}. \tag{2.729}$$

$Z = \frac{\Omega(E, x - x_A)}{\Omega_B(E, x)}$ ist die kanonische Zustandssumme, diese fungiert als Normierungskonstante und stellt

$$\sum_r P_r = 1 \tag{2.730}$$

sicher:

$$\boxed{Z = \sum_r e^{-\beta E_r}} \tag{2.731}$$

Im *großkanonischen Ensemble* ist nicht nur Wärme- , sondern auch Teilchenaustausch mit dem System B möglich. Dann gilt zusätzlich

$$N = N_A + N_B = \text{const.} \tag{2.732}$$

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

$$n(E_A, N_A) = \Omega_A(E_A, N_A, x_A)\,\Omega_B(E_B, N_B, x_B)\,. \tag{2.733}$$

Die Wahrscheinlichkeit $P(E_A, N_A)$, im System A einen Zustand r mit der Energie $E_r = E_A$ umd der Teilchenzahl $N_r = N_A$ anzutreffen, ist gegeben durch die Wahrscheinlichkeit

$$P(E_A, N_A) = \frac{n(E_A, N_A)}{\Omega(E, x)} = \frac{\Omega_A(E_A, N_A, x_A)\,\Omega_B(E_B, N_B, x_B)}{\Omega(E, x)}, \tag{2.734}$$

das System A bei einer Energie E_A und Teilchenzahl N_A vorzufinden, dividiert durch die Anzahl dieser gleich wahrscheinlichen Zustände:

$$P_r = \frac{P(E_A, N_A)}{\Omega_A(E_A, N_A, x_A)} = \frac{\Omega_B(E - E_A, N - N_A, x_B)}{\Omega(E, x)} \tag{2.735}$$

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:

$$\begin{aligned} \ln\left[\Omega_B(E - E_A, N - N_A, x - x_A)\right] &= \ln\left[\Omega_B(E, N, x - x_A)\right] - \beta E_A - \frac{1}{k_B}\frac{\partial S}{\partial N} N_A \\ &\quad + \mathcal{O}\left(E_A^2, N_A^2, E_A N_A\right). \end{aligned} \tag{2.736}$$

Man definiert die negative generalisierte Kraft der Teilchenzahl durch das *chemische Potential*

$$\boxed{\mu := -\frac{\partial E}{\partial N} = -T\frac{\partial S(E, N.x)}{\partial N}.} \tag{2.737}$$

Unter Vernachlässigung der Terme höherer Ordnung gilt somit

$$P_r = \frac{\Omega_B(E, N, x - x_A)}{\Omega(E, x)} e^{-\beta\left(E_r - \mu N_r\right)} = \frac{1}{Y} e^{-\beta\left(E_r - \mu N_r\right)} \tag{2.738}$$

$Y = \frac{\Omega(E,x)}{\Omega_B(E,N,x-x_A)}$ ist die großkanonische Zustandssumme, diese fungiert als Normierungskonstante und stellt

$$\sum_r P_r = 1 \tag{2.739}$$

sicher:

$$\boxed{Y = \sum_r e^{-\beta\left(E_r - \mu N_r\right)}} \tag{2.740}$$

Nun soll noch der Erste Hauptsatz auf den Fall $dN \neq 0$ verallgemeinert werden. Mit den Glg.en (2.688) und (2.691) folgt

$$dE = dQ_{\text{qs}} - dW_{\text{qs}} = dQ_{\text{qs}} - \sum_i X_i dx_i = dQ_{\text{qs}} - \frac{\partial E}{\partial V} dV - \frac{\partial E}{\partial N} dN = dQ_{\text{qs}} - p dV + \mu dN. \tag{2.741}$$

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:

$$F := E - ST \quad \text{(freie Energie)} \tag{2.742}$$
$$H := E + pV \quad \text{(Enthalpie)} \tag{2.743}$$
$$G := E - ST + pV \quad \text{(Gibbs-Potential, freie Enthalpie)} \tag{2.744}$$
$$J := E - ST - \mu N \quad \text{(großkanonisches Potential)} \tag{2.745}$$

Für die Differenziale folgt mit $dE = dQ - pdV + \mu dN$

$$dF = -SdT - pdV + \mu dN, \tag{2.746}$$
$$dH = TdS + Vdp + \mu dN, \tag{2.747}$$
$$dG = -SdT + Vdp + \mu dN, \tag{2.748}$$
$$dJ = -SdT - pdV - Nd\mu. \tag{2.749}$$

Hieraus lassen sich folgende Aussagen ablesen:

$$\left(\frac{\partial E}{\partial S}\right)_{V,N} = T \tag{2.750}$$
$$\left(\frac{\partial E}{\partial V}\right)_{S,N} = -p \tag{2.751}$$
$$\left(\frac{\partial E}{\partial N}\right)_{S,V} = \mu \tag{2.752}$$
$$\left(\frac{\partial F}{\partial T}\right)_{V,N} = -S \tag{2.753}$$

$$\left(\frac{\partial F}{\partial V}\right)_{T,N} = -p \tag{2.754}$$
$$\left(\frac{\partial F}{\partial N}\right)_{T,V} = \mu \tag{2.755}$$
$$\left(\frac{\partial H}{\partial S}\right)_{p,N} = T \tag{2.756}$$

$$\left(\frac{\partial H}{\partial p}\right)_{S,N} = V \tag{2.757}$$
$$\left(\frac{\partial H}{\partial N}\right)_{S,p} = \mu \tag{2.758}$$
$$\left(\frac{\partial G}{\partial T}\right)_{p,N} = -S \tag{2.759}$$

$$\left(\frac{\partial G}{\partial p}\right)_{T,N} = V \tag{2.760}$$
$$\left(\frac{\partial G}{\partial N}\right)_{T,p} = \mu \tag{2.761}$$

$$\left(\frac{\partial J}{\partial T}\right)_{V,\mu} = -S \tag{2.762}$$
$$\left(\frac{\partial J}{\partial V}\right)_{T,\mu} = -p \tag{2.763}$$

$$\left(\frac{\partial J}{\partial \mu}\right)_{T,V} = -N \tag{2.764}$$

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:

$$\left(\frac{\partial^2 E}{\partial V \partial S}\right)_N = \left(\frac{\partial^2 E}{\partial S \partial V}\right)_N \Rightarrow \left(\frac{\partial T}{\partial V}\right)_{S,N} = -\left(\frac{\partial p}{\partial S}\right)_{V,N} \tag{2.765}$$

$$\left(\frac{\partial^2 E}{\partial N \partial S}\right)_V = \left(\frac{\partial^2 E}{\partial S \partial N}\right)_V \Rightarrow \left(\frac{\partial T}{\partial N}\right)_{S,V} = \left(\frac{\partial \mu}{\partial S}\right)_{N,V} \tag{2.766}$$

$$\left(\frac{\partial^2 E}{\partial N \partial V}\right)_S = \left(\frac{\partial^2 E}{\partial V \partial N}\right)_S \Rightarrow -\left(\frac{\partial p}{\partial N}\right)_{V,S} = \left(\frac{\partial \mu}{\partial V}\right)_{N,S} \tag{2.767}$$

$$\left(\frac{\partial^2 F}{\partial V \partial T}\right)_N = \left(\frac{\partial^2 F}{\partial T \partial V}\right)_N \Rightarrow \left(\frac{\partial S}{\partial V}\right)_{T,N} = \left(\frac{\partial p}{\partial T}\right)_{V,N} \tag{2.768}$$

$$\left(\frac{\partial^2 F}{\partial N \partial T}\right)_V = \left(\frac{\partial^2 F}{\partial T \partial N}\right)_V \Rightarrow -\left(\frac{\partial S}{\partial N}\right)_{T,V} = \left(\frac{\partial \mu}{\partial T}\right)_{N,V} \tag{2.769}$$

$$\left(\frac{\partial^2 F}{\partial N \partial V}\right)_T = \left(\frac{\partial^2 F}{\partial V \partial N}\right)_T \Rightarrow -\left(\frac{\partial p}{\partial N}\right)_{V,T} = \left(\frac{\partial \mu}{\partial V}\right)_{N,T} \tag{2.770}$$

$$\left(\frac{\partial^2 H}{\partial p \partial S}\right)_N = \left(\frac{\partial^2 H}{\partial S \partial p}\right)_N \Rightarrow \left(\frac{\partial T}{\partial p}\right)_{S,N} = \left(\frac{\partial V}{\partial S}\right)_{p,N} \tag{2.771}$$

$$\left(\frac{\partial^2 H}{\partial N \partial S}\right)_p = \left(\frac{\partial^2 H}{\partial S \partial N}\right)_p \Rightarrow \left(\frac{\partial T}{\partial N}\right)_{S,p} = \left(\frac{\partial \mu}{\partial S}\right)_{N,p} \tag{2.772}$$

$$\left(\frac{\partial^2 H}{\partial N \partial p}\right)_S = \left(\frac{\partial^2 H}{\partial p \partial N}\right)_S \Rightarrow \frac{V}{N} = \left(\frac{\partial V}{\partial N}\right)_{p,S} = \left(\frac{\partial \mu}{\partial p}\right)_{N,S} \tag{2.773}$$

$$\left(\frac{\partial^2 G}{\partial p \partial T}\right)_N = \left(\frac{\partial^2 G}{\partial T \partial p}\right)_N \Rightarrow -\left(\frac{\partial S}{\partial p}\right)_{T,N} = \left(\frac{\partial V}{\partial T}\right)_{p,N} \tag{2.774}$$

$$\left(\frac{\partial^2 G}{\partial N \partial T}\right)_p = \left(\frac{\partial^2 G}{\partial T \partial N}\right)_p \Rightarrow -\frac{S}{N} = -\left(\frac{\partial S}{\partial N}\right)_{T,p} = \left(\frac{\partial \mu}{\partial T}\right)_{N,p} \tag{2.775}$$

$$\left(\frac{\partial^2 G}{\partial N \partial p}\right)_T = \left(\frac{\partial^2 G}{\partial p \partial N}\right)_T \Rightarrow \left(\frac{\partial V}{\partial N}\right)_{p,T} = \left(\frac{\partial \mu}{\partial p}\right)_{N,T} \tag{2.776}$$

$$\left(\frac{\partial^2 J}{\partial T \partial V}\right)_\mu = \left(\frac{\partial^2 J}{\partial V \partial T}\right)_\mu \Rightarrow \left(\frac{\partial p}{\partial T}\right)_{\mu,V} = \left(\frac{\partial S}{\partial V}\right)_{\mu,T} \tag{2.777}$$

$$\left(\frac{\partial^2 J}{\partial T \partial \mu}\right)_V = \left(\frac{\partial^2 J}{\partial \mu \partial T}\right)_V \Rightarrow \left(\frac{\partial N}{\partial T}\right)_{\mu,V} = \left(\frac{\partial S}{\partial \mu}\right)_{T,V} \tag{2.778}$$

$$\left(\frac{\partial^2 J}{\partial V \partial \mu}\right)_T = \left(\frac{\partial^2 J}{\partial \mu \partial V}\right)_T \Rightarrow \left(\frac{\partial N}{\partial V}\right)_{\mu,T} = \left(\frac{\partial p}{\partial \mu}\right)_{T,V} \tag{2.779}$$

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 System ausdrücken können. Zunächst wird das kanonische Ensemble betrachtet. In diesem Fall sind (T, V, N) oder alternativ (β, V, N) festgelegt. Es gilt

$$d\ln\left[Z\left(\beta, V, N\right)\right] = \frac{\partial \ln(Z)}{\partial \beta} d\beta + \frac{\partial \ln(Z)}{\partial V} dV + \frac{\partial \ln(Z)}{\partial N} dN. \tag{2.780}$$

Nun werden die partiellen Ableitungen der Zustandssumme Glg. (2.731) berechnet:

$$\frac{\partial \ln(Z)}{\partial \beta} = -\frac{1}{Z}\sum_r E_r \exp\left(-\beta E_r\right) = -E \tag{2.781}$$

$$\frac{\partial \ln(Z)}{\partial V} = -\frac{\beta}{Z}\sum_r \frac{\partial E_r(V,N)}{\partial V}\exp\left(-\beta E_r\right) = -\beta\overline{\frac{\partial E_r}{\partial V}} = \beta p \tag{2.782}$$

$$\frac{\partial \ln(Z)}{\partial N} = -\frac{\beta}{Z}\sum_r \frac{\partial E_r(V,N)}{\partial N}\exp\left(-\beta E_r\right) = -\beta\overline{\frac{\partial E_r}{\partial N}} = -\beta\mu \tag{2.783}$$

Es gilt somit

$$\begin{aligned} d\ln\left(Z\left(\beta, V, N\right)\right) &= -Ed\beta + \beta p dV - \beta\mu dN \\ \Rightarrow d\left(\ln(Z) + \beta E\right) &= \beta\left(dE + pdV - \mu dN\right) = \frac{1}{k_B}\left(\frac{dE}{T} + \frac{p}{T}dV - \frac{\mu}{T}dN\right) \end{aligned} \tag{2.784}$$

Durch Vergleich mit Glg. (2.706) erhält man

$$k_B d\left[\ln(Z) + \beta E\right] = dS \Rightarrow S = k_B\left[\ln(Z) + \beta E\right] + C. \tag{2.785}$$

Die Konstante C ergibt sich zu Null, was hier nicht gezeigt werden soll, damit folgt

$$\boxed{F = E - TS = -k_B T \ln\left(Z\left(T, V, \mu\right)\right).} \tag{2.786}$$

Im großkanonischen Ensemble sind (T, V, μ) festgelegt, man erhält das Differenzial

$$d\ln\left[Y\left(\beta, V, \mu\right)\right] = \frac{\partial \ln(Y)}{\partial \beta} d\beta + \frac{\partial \ln(Y)}{\partial V} dV + \frac{\partial \ln(Y)}{\partial \mu} d\mu. \tag{2.787}$$

Für die partiellen Ableitungen berechnet man mit der Zustandssumme Glg. (2.740)

$$\frac{\partial \ln(Y)}{\partial \beta} = -\frac{1}{Y}\sum_r \left(E_r - \mu N_r\right)\exp\left(-\beta\left(E_r - \mu N_r\right)\right) = -E + \mu N, \tag{2.788}$$

$$\frac{\partial \ln(Y)}{\partial V} = -\frac{\beta}{Y}\sum_r \frac{\partial E_r(V,N)}{\partial V}\exp\left(-\beta\left(E_r - \mu N_r\right)\right) = -\beta\overline{\frac{\partial E_r}{\partial V}} = \beta p, \tag{2.789}$$

$$\frac{\partial \ln(>)}{\partial \mu} = \frac{\beta}{Y}\sum_r N_r \exp\left(-\beta\left(E_r - \mu N_r\right)\right) = \beta\overline{N_r} = \beta N. \tag{2.790}$$

Es ist somit

$$\begin{aligned} d\ln\left[Y\left(\beta, V, \mu\right)\right] &= \left(-E + \mu N\right)d\beta + \beta p dV + \beta N d\mu \\ \Leftrightarrow d\left[\ln(Y) + \beta E - \beta\mu N\right] &= \beta\left(dE + pdV - \mu dN\right) = \frac{dS}{k_B}. \end{aligned} \tag{2.791}$$

Damit gilt

$$S = k_B \left[\ln(Y) + \beta E - \beta\mu N\right] \Leftrightarrow k_B T \ln(Y) = TS - E + \mu N. \tag{2.792}$$

Eine hier mögliche Konstante ist ebenfalls Null. Durch Vergleich mit Glg. (2.745) folgt

$$\boxed{J = -k_B T \ln\left(Y\left(T, V, \mu\right)\right). \tag{2.793}}$$

Durch die Glg.en (2.786) und (2.793) 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

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^{N} -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_i + V(\boldsymbol{r}_i) = \sum_{i=1}^{N} \hat{H}_i, \tag{2.794}$$

es handelt sich um eine Überlagerung von Ein-Teilchen-Hamilton-Operatoren

$$\hat{H}_i = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_i + V(\boldsymbol{r}_i). \tag{2.795}$$

$V(\boldsymbol{r}_i)$ ist das bekannte Wandpotential

$$V(\boldsymbol{r}_i) = \begin{cases} 0, & \boldsymbol{r}_i \in V, \\ \infty, & \text{sonst}, \end{cases} \tag{2.796}$$

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 Ein-Teilchen-Lösung lautet

$$\psi(\boldsymbol{r}_i) \propto \sin\left(k_{3i-2}x\right)\sin\left(k_{3i-1}y\right)\sin\left(k_{3i}z\right). \tag{2.797}$$

Hierbei gilt für $k_{3i-2}, k_{3i-1}, k_{3i}$ die Randbedingung

$$\frac{Lp_i}{\hbar} = k_i L = n_i \pi \tag{2.798}$$

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

$$E = \frac{1}{2m}\sum_{i=1}^{3N} p_i^2. \tag{2.799}$$

Um die mikrokanonische Zustandssume des idealen Gases zu bestimmen, geht man von $\delta E = E$ aus:

$$\Omega(E, V, N) = \sum_{E_r < E} 1 = \sum_{\substack{n_1=1,2,\ldots,\\ E_r<E}} \cdots \sum_{\substack{n_{3N}=1,2,\ldots,\\ E_r<E}} 1 \approx \frac{1}{2^{3N}} \int_{E_r<E} \cdots \int_{E_r<E} dn_1 \ldots dn_{3N}. \tag{2.800}$$

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

$$\Omega(E, V, N) = \frac{V^N}{(2\hbar\pi)^{3N}} \int_{\sum p_i^2 < 2mE} \cdots \int_{\sum p_i^2 < 2mE} dp_1 \ldots dp_{3N}. \tag{2.801}$$

Das verbleibende $3N-$dimensionale Integral ist das Volumen einer $3N-$dimensionalen Kugel mit Radius $\sqrt{2mE}$, sodass man Glg. (B.148) einsetzen kann:

$$\Omega(E,V,N) = \frac{V^N}{(2\pi\hbar)^{3N}}\frac{2\pi^{3N/2}}{(3N/2)!}(2m)^{3N/2}E^{3N/2} = 2\left[\frac{2\pi m}{(2\pi\hbar)^2}\right]^{3N/2}\frac{E^{3N/2}}{(3N/2)!}V^N. \tag{2.802}$$

Mit der Stirling-Formel Glg. (A.125) erhält man

$$\begin{aligned}\Omega(E,V,N) &\approx \sqrt{\frac{2}{\pi}}\left[\frac{2\pi m}{(2\pi\hbar)^2}\right]^{3N/2}e^{3N/2}\left(\frac{2}{3N}\right)^{\frac{3N}{2}+\frac{1}{2}}E^{3N/2}V^N \\ &= \frac{2}{\sqrt{3\pi N}}\left[\frac{4\pi me}{3(2\pi\hbar)^2}\right]^{3N/2}V^N\left(\frac{E}{N}\right)^{3N/2}.\end{aligned} \tag{2.803}$$

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

$$\Omega \to \frac{\Omega}{N!} \tag{2.804}$$

ersetzen muss. Es gilt damit

$$\begin{aligned}\Omega(E,V,N) &= \sqrt{\frac{2}{3\pi^2}}\frac{1}{N}\left[\frac{4\pi me^{5/3}}{3(2\pi\hbar)^2}\right]^{3N/2}\left(\frac{V}{N}\right)^N\left(\frac{E}{N}\right)^{3N/2} \\ &= \sqrt{\frac{2}{3\pi^2}}\frac{1}{N}\left[\frac{me^{5/3}}{3\pi\hbar^2}\right]^{3N/2}\left(\frac{V}{N}\right)^N\left(\frac{E}{N}\right)^{3N/2}.\end{aligned} \tag{2.805}$$

Für die Entropie folgt

$$\begin{aligned}\frac{S(E,V,N)}{k_B} &= \frac{1}{2}\ln\left(\frac{2}{3\pi^2}\right) - \ln(N) + \frac{3N}{2}\ln(c) + N\ln\left(\frac{V}{N}\right) + \frac{3N}{2}\ln\left(\frac{E}{N}\right) \\ &\approx \frac{3N}{2}\ln(c) + N\ln\left(\frac{V}{N}\right) + \frac{3N}{2}\ln\left(\frac{E}{N}\right) - \ln(N) \\ &\approx \frac{3N}{2}\ln(c) + N\ln\left(\frac{V}{N}\right) + \frac{3N}{2}\ln\left(\frac{E}{N}\right)\end{aligned}$$

$$\boxed{\Leftrightarrow S(E,V,N) = k_BN\left[\frac{3}{2}\ln(c) + \ln\left(\frac{V}{N}\right) + \frac{3}{2}\ln\left(\frac{E}{N}\right)\right]} \tag{2.806}$$

mit

$$c := \frac{me^{5/3}}{3\pi\hbar^2}. \tag{2.807}$$

Glg. (2.806) bezeichnet man auch als *Sackur-Tetrode-Gleichung*. Man erhält die *kalorische Zustandsgleichung idealer Gase*

$$\frac{1}{k_BT} = \frac{\partial\ln(\Omega(E,V,N))}{\partial E} = \frac{3}{2}\frac{N}{E} \Rightarrow E = \frac{3}{2}Nk_BT. \tag{2.808}$$

Weiterhin gilt

$$\frac{p}{T} = \frac{\partial S(E,V,N)}{\partial V} = k_BN\frac{1}{V}. \tag{2.809}$$

Dies ergibt die *thermische Zustandsgleichung idealer Gase*

$$\boxed{pV = Nk_BT.} \tag{2.810}$$

Für die isochore Wärmekapazität des idealen Gases folgt mit Glg. (2.808)

$$C^{(V)} = \frac{3}{2}k_BN. \tag{2.811}$$

Somit kann man für die Energie E notieren

$$E = C^{(V)}T. \tag{2.812}$$

Für die isobare spezifische Wärmekapazität gilt mit Glg. (2.719)

$$C^{(p)} = T\left(\frac{\partial S}{\partial T}\right)_p = k_BTN\frac{\partial}{\partial T}\left(\ln\left(\frac{k_BT}{p}\right) + \frac{3}{2}\ln\left(\frac{3}{2}Nk_BT\right)\right) = k_BTN\left(\frac{1}{T} + \frac{3}{2}\frac{1}{T}\right) = \frac{5}{2}Nk_B. \tag{2.813}$$

Für die Enthalpie H des idealen Gases folgt

$$H = E + pV = \frac{5}{2}Nk_BT = C^{(p)}T. \tag{2.814}$$

Für das Gibbs-Potential G des idealen Gases erhält man

$$G = E - ST + pV = H - ST = C^{(p)}T - ST. \tag{2.815}$$

Weiterhin gilt

$$c^{(p)} - c^{(v)} = \frac{N}{m}k_B = \frac{N}{mN_A}R = R_s. \tag{2.816}$$

Für das chemische Potential gilt mit den Glg.en (2.744) und (2.761)

$$\mu = \frac{E - TS + pV}{N} = \frac{C^{(v)}T}{N} - \frac{ST}{N} + k_BT = T\left(\frac{C^{(v)}}{N} - \frac{S}{N} + k_B\right), \tag{2.817}$$

wobei verwendet wurde, dass das Gibbs-Potential eine extensive Größe ist. Eine äquivalente Formulierung von Glg. (2.810) ist

$$p = \frac{Nk_BT}{V} = \frac{nN_Ak_BT}{V} = \frac{nRT}{V} = \frac{mRT}{VM} = \rho R_sT \tag{2.818}$$

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:

$$p = \sum_{i=1}^{N} p_i = \sum_{i=1}^{N} \rho_i R_i T = \frac{TR}{v}\sum_{i=1}^{N}\frac{m_i}{M_i} = TR\rho\sum_{i=1}^{N}\frac{m_i}{m}\frac{1}{M_i}. \tag{2.819}$$

Mit der Definition

$$M := \frac{1}{\sum_{i=1}^{N}\frac{m_i}{m}\frac{1}{M_i}} \tag{2.820}$$

wird

$$p = \rho\frac{R}{M}T = \rho R_sT \tag{2.821}$$

auch für ein Gasgemisch. Die mittlere molare Masse nach Glg. (2.820) kann man einfach ausrechnen, indem man die Molmassen der Bestandteile mit ihren Volumenanteilen gewichtet:

$$M = \frac{1}{\sum_{i=1}^{N} \frac{m_i}{m}\frac{n_i}{m_i}} = \frac{\sum_{i=1}^{N} n_i M_i}{\sum_{i=1}^{N} n_i} = \sum_{i=1}^{N} \frac{n_i}{n} M_i, \tag{2.822}$$

hierbei ist n_i die Stoffmenge der $i-$ten Komponente und n die Gesamtstoffmenge. In Termen der Massendichten kann man notieren

$$M = \frac{m}{n} = \frac{m}{\sum_i \frac{m_i}{M_i}} = \frac{\varrho}{\sum_i \frac{\varrho_i}{M_i}} = \frac{1}{\frac{1}{\varrho}\sum_i \frac{\varrho_i}{M_i}}. \tag{2.823}$$

Für die molare Masse feuchter Luft M_h gilt

$$M_h = \frac{1}{\frac{\varrho_d}{M_d \varrho_h} + \frac{\varrho_v}{\varrho_h}\frac{1}{M_v}}. \tag{2.824}$$

Man hat also

$$\frac{1}{M_h} = \frac{1}{M_d}\left(1 - \frac{\varrho_v}{\varrho_h}\right) + \frac{\varrho_v}{\varrho_h}\frac{1}{M_v}. \tag{2.825}$$

Die individuelle Gaskonstante feuchter Luft ist also

$$R_h = R_d\left[1 - \frac{\varrho_v}{\varrho_h} + \frac{\varrho_v}{\varrho_h}\frac{M_d}{M_v}\right]. \tag{2.826}$$

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

$$\begin{aligned} R_h \varrho T &= R_d \varrho T_v \Rightarrow T_v = \frac{R_h}{R_d} T = T\left(1 - \frac{\varrho_v}{\varrho_h} + \frac{\varrho_v}{\varrho_h}\frac{M_d}{M_v}\right) \\ &= T\left[1 + \frac{\varrho_v}{\varrho_h}\left(\frac{1}{\varepsilon} - 1\right)\right]. \end{aligned} \tag{2.827}$$

Die Differenz

$$\Delta T_v := T_v - T = T\frac{\varrho_v}{\varrho_h}\left(\frac{1}{\varepsilon} - 1\right) \tag{2.828}$$

bezeichnet man als *virtuellen Temperaturzuschlag*.

Nun sollen noch die *Feuchtemaße* 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

$$U := \frac{p_v}{p_v^{(S)}} \tag{2.829}$$

mit p_v als Partialdruck des Wasserdampfes und $p_v^{(S)}$ als Sättigungsdampfdruck definiert. Man legt weiter die *spezifische Feuchte* q durch

$$q := \frac{\varrho_v}{\varrho} \tag{2.830}$$

fest. Das *Mischungsverhältnis* r wird durch

$$r := \frac{\varrho_v}{\varrho_d} \tag{2.831}$$

definiert. Ein hochgestelltes S an den Symbolen bedeutet, dass von Sättigung ausgegangen wird. Einige nützliche

Umrechnungen lauten

$$\begin{aligned}
q &= \frac{p_v R_h T}{R_v T p} = \frac{p_v R_h}{p R_v} = \frac{p_v}{p}\frac{R_d}{R_v}\left[1 - \frac{\varrho_v}{\varrho_h} + \frac{\varrho_v}{\varrho_h}\frac{M_d}{M_v}\right] \\
&= \frac{p_v}{p}\left(\varepsilon\left(1-q\right)+q\right) = \frac{p_v}{p}\left(q\left(1-\varepsilon'\right)+\varepsilon'\right) \\
\Rightarrow q\left(1 + \left(\varepsilon' - 1\right)\frac{p_v}{p}\right) &= \varepsilon'\frac{p_v}{p} \Rightarrow q = \frac{\varepsilon'}{\frac{p}{p_v} + \varepsilon' - 1}, \qquad (2.832) \\
r &= \frac{\varrho_v}{\varrho_d} = \frac{p_v R_d T}{R_v T p_d} = \frac{p_v}{p_d}\varepsilon', \\
r &= \frac{\varrho_v}{\varrho - \varrho_v} = \frac{q}{1-q} = \frac{\frac{\varepsilon'}{\frac{p}{p_v}+\varepsilon'-1}}{1 - \frac{\varepsilon'}{\frac{p}{p_v}+\varepsilon'-1}} = \frac{1}{\frac{p}{p_v\varepsilon'} + 1 - \frac{1}{\varepsilon'} - 1} = \frac{\varepsilon'}{\frac{p}{p_v} - 1}. \qquad (2.833)
\end{aligned}$$

Häufige Näherungen sind

$$\begin{aligned}
q &\approx \frac{\varepsilon'}{\frac{p}{p_v} - 1} = r, \qquad (2.834) \\
q &\approx \varepsilon'\frac{p_v}{p}, \qquad (2.835) \\
r &\approx \varepsilon'\frac{p_v}{p}. \qquad (2.836)
\end{aligned}$$

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 $\hbar \to 0$ durchführt.

N Teilchen seien in einem kubischen Volumen $V = L^3$ eingeschlossen. Für jede Wellenvektor-Komponente der Ein-Teilchen-Wellenfunktionen gilt

$$k_n L = n\pi \Leftrightarrow k_n = \frac{n\pi}{L} \qquad (2.837)$$

mit $n \in \mathbb{N}$ und $n \geq 1$. Integriert man über den gesamten $k-$Raum, kann man die Summen durch Integrale ersetzen:

$$\sum_{\boldsymbol{k}} \ldots = \frac{V^N}{\left(2\pi\right)^{3N}} \int \ldots \int \ldots dk_1 \ldots dk_{3N} \qquad (2.838)$$

Den Faktor $1/2$ vor jedem Integral erhält man durch Einbeziehung negativer $k-$Werte bei der Integration. Im Impulsraum erhält man

$$\sum_{\boldsymbol{k}} \ldots = \frac{V^N}{\left(2\pi\hbar\right)^{3N}} \int \ldots d^{3N}p. \qquad (2.839)$$

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

$$\psi_n\left(x\right) = \sqrt{\frac{2}{L}}\sin\left(n\frac{\pi}{L}x\right), \qquad (2.840)$$

hierbei sei $n \in \mathbb{N}$ mit $n \geq 1$, die Energie-Eigenwerte sind durch

$$E_n = \frac{\hbar^2 n^2 \pi^2}{2mL^2} \qquad (2.841)$$

gegeben. Für das Phasenraumvolumen $V(E)$ eines Zustandes mit der Energie E gilt

$$V(E) = \int_0^L \int_{p^2/2m \leq E} dpdx = L2\sqrt{2mE}. \tag{2.842}$$

Für eine gegebene Energie $E \gg 1$ ist die Anzahl der Zustände $N(E)$ mit Eigenenergien $E_n \leq E$ näherungsweise gegeben durch

$$N(E) \approx \frac{L}{\pi\hbar}\sqrt{2mE}. \tag{2.843}$$

Man erhält also

$$\frac{V(E)}{N(E)} = \frac{2L\sqrt{2mE}}{\sqrt{2mE}}\frac{\pi\hbar}{L} = 2\pi\hbar. \tag{2.844}$$

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

$$\sum_r \ldots = \frac{1}{(2\pi\hbar)^f}\int \ldots dxdp. \tag{2.845}$$

Es ergibt sich ein Mittelungsoperator

$$\sum_r P_r \ldots = \frac{1}{(2\pi\hbar)^f}\int \varrho'(x,p)\ldots dxdp \tag{2.846}$$

mit den Wahrscheinlichkeiten P_r der Mikrozustände und einer modifizierten Wahrscheinlichkeitsdichte $\varrho'(x,p)$.

2.4.5.1 Maxwell-Verteilung

Setzt man in Glg. (2.846) die kanonische Zustandssumme

$$P_r = \frac{1}{Z}\exp\left(-\frac{E_r}{k_BT}\right) \tag{2.847}$$

ein, erhält man

$$\frac{1}{Z}\sum_r \exp\left(-\frac{E_r}{k_BT}\right)\ldots \quad = \quad \frac{1}{Z(2\pi\hbar)^f}\int \exp\left(-\frac{E(x,p)}{k_BT}\right)\ldots dxdp \tag{2.848}$$

Hängt die Integration nur vom Impuls ab, folgt

$$\frac{1}{Z}\sum_r \exp\left(-\frac{E_r}{k_BT}\right)\ldots \quad = \quad \frac{V}{Z(2\pi\hbar)^f}\int \exp\left(-\frac{E(p)}{k_BT}\right)\ldots dp \tag{2.849}$$

Man interpretiert

$$\varrho(p) = \frac{V}{Z(2\pi\hbar)^f}\exp\left(-\frac{E(p)}{k_BT}\right) \tag{2.850}$$

als Wahrscheinlichkeitsdichte. Nun betrachtet man genau ein Teilchen und nimmt kartesische Impulse an, sodass gilt

$$\varrho(p) = \frac{4\pi V}{z(2\pi\hbar)^3}\exp\left(-\frac{p^2}{2mk_BT}\right)p^2 \tag{2.851}$$

Für die kanonische Zustandssumme z dieses einzelnen Teilchens folgt

$$z(T,V) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} V \int_0^\infty 4\pi \exp\left(-\frac{p^2}{2mk_BT}\right) p^2 dp = \frac{V}{2\pi^2\hbar^3} \int_0^\infty \exp\left(-\frac{p^2}{2mk_BT}\right) p^2 dp. \tag{2.852}$$

Mit Glg. (A.113) folgt

$$z(T,V) = \frac{V}{8\pi^2\hbar^3} \sqrt{\pi (2mk_BT)^3} = \frac{V}{\hbar^3} \left(\frac{mk_BT}{2\pi}\right)^{3/2}. \tag{2.853}$$

Damit folgt

$$\varrho(p) = \frac{\hbar^3}{v_h} \left(\frac{2\pi}{mk_BT}\right)^{3/2} \frac{4\pi V}{(2\pi\hbar)^3} \exp\left(-\frac{p^2}{2mk_BT}\right) p^2 = \sqrt{\frac{2}{m^3\pi k_B^3 T^3}} \exp\left(-\frac{p^2}{2mk_BT}\right) p^2. \tag{2.854}$$

Die Geschwindigkeits-Verteilung lautet somit

$$\boxed{\varrho(v) = \sqrt{\frac{2m^3}{\pi k_B^3 T^3}} \exp\left(-\frac{mv^2}{2k_BT}\right) v^2.} \tag{2.855}$$

Dies ist die *Maxwell-Verteilung*. Das Maximum $v_{\max}$ erhält man aus der Bedingung

$$0 = 2ve^{-\frac{mv^2}{2k_BT}} - \frac{mv^3}{k_BT} e^{-\frac{mv^2}{2k_BT}} \Leftrightarrow v_{\max} = \sqrt{\frac{2k_BT}{m}}. \tag{2.856}$$

Setzt man für m die molare Masse trockener Luft sowie 20° C ein, erhält man $v_{\max} \approx 4 \cdot 10^2$ m/s. Der Erwartungswert dieser Verteilung ist

$$\overline{v} = \sqrt{\frac{2m^3}{\pi k_B^3 T^3}} \int_0^\infty e^{-\frac{mv^2}{2k_BT}} v^3 dv. \tag{2.857}$$

Mit $C = \frac{m}{2k_BT}$ in Glg. (A.114) folgt

$$\overline{v} = \sqrt{\frac{2m^3}{\pi k_B^3 T^3}} \frac{2k_B^2 T^2}{m^2} = \sqrt{\frac{8k_BT}{\pi m}}. \tag{2.858}$$

Die entsprechende vektorielle Wahrscheinlichkeitsdichte $\varrho(\boldsymbol{v})$ ist

$$\varrho(\boldsymbol{v}) = \left(\frac{m}{2\pi k_BT}\right)^{3/2} \exp\left(-\frac{mv^2}{2k_BT}\right). \tag{2.859}$$

Wichtig ist außerdem der Erwartungswert der Relativgeschwindigkeit zweier Teilchen gleicher Masse. Für diese gilt

$$\boldsymbol{v}_{\text{rel}} = \boldsymbol{v}_2 - \boldsymbol{v}_1. \tag{2.860}$$

Für die Wahrscheinlichkeitsdichte $\varrho(\boldsymbol{v}_1, \boldsymbol{v}_2)$ zweier Teilchengeschwindigkeiten $\boldsymbol{v}_1, \boldsymbol{v}_2$ gilt

$$\varrho(\boldsymbol{v}_1, \boldsymbol{v}_2) = \left(\frac{m}{2\pi k_BT}\right)^3 \exp\left(-\frac{m(v_1^2 + v_2^2)}{2k_BT}\right). \tag{2.861}$$

Hieraus erhält man mit den Abkürzungen

$$a := \left(\frac{m}{2\pi k_BT}\right)^{3/2}, \tag{2.862}$$

$$b := \frac{m}{2k_BT} \tag{2.863}$$

die Relation

$$\begin{aligned}
\rho\left(\boldsymbol{v}_{\mathrm{rel}}\right) &= a^2 \int \exp\left[-b\left(v_1^2+v_1^2+v_{\mathrm{rel}}^2+2v_{1,x}v_{rel,x}+2v_{1,y}v_{rel,y}+2v_{1,z}v_{rel,z}\right)\right] dv_1^3 \\
&= a^2 e^{-bv_{\mathrm{rel}}^2} \int \exp\left[-2b\left(v_1^2+v_{1,x}v_{rel,x}+v_{1,y}v_{rel,y}+v_{1,z}v_{rel,z}\right)\right] dv_1^3 \\
&= a^2 e^{-bv_{\mathrm{rel}}^2} \int \exp\left[-2b\left(\left(v_{1,x}+\frac{v_{rel,x}}{2}\right)^2+\ldots-\frac{v_{\mathrm{rel}}^2}{4}\right)\right] dv_1^3 \\
&= a^2 e^{-\frac{b}{2}v_{\mathrm{rel}}^2} \int e^{-2bv_1^2} dv_1^3 = ae^{-\frac{b}{2}v_{\mathrm{rel}}^2} \int ae^{-b\left(\sqrt{2}v_1\right)^2} dv_1^3 = ae^{-\frac{b}{2}v_{\mathrm{rel}}^2} \frac{1}{2^{3/2}}.
\end{aligned} \tag{2.864}$$

Der letzte Schritt folgt aus der Normierung der Verteilung Glg. (2.859). Somit gilt für die Wahrscheinlichkeitsdichte des Betrags der Relativgeschwindigkeit

$$\rho\left(v_{\mathrm{rel}}\right) = \frac{4\pi a}{2^{3/2}} e^{-\frac{b}{2}v_{\mathrm{rel}}^2} v_{\mathrm{rel}}^2. \tag{2.865}$$

Für den Erwartungswert folgt

$$\overline{v_{\mathrm{rel}}} = \int_0^\infty \frac{4\pi a}{2^{3/2}} e^{-\frac{b}{2}v_{\mathrm{rel}}^2} v_{\mathrm{rel}}^3 dv_{\mathrm{rel}} = \sqrt{2}\int_0^\infty 4\pi a e^{-bv_{\mathrm{rel}}^2} v_{\mathrm{rel}}^3 dv_{\mathrm{rel}} = \sqrt{2}\overline{v}. \tag{2.866}$$

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

$$j\sigma := \frac{dN_{\mathrm{str}}}{dt}, \tag{2.867}$$

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

$$\sigma = \pi d^2. \tag{2.868}$$

Ein Teilchen lege den Weg l zurück, dabei stößt es an N Teilchen:

$$N = n\sigma l \tag{2.869}$$

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

$$1 = n\sigma\overline{v_{\mathrm{rel}}}\tau \overset{(2.866)}{\Leftrightarrow} \tau = \frac{1}{\sqrt{2}n\sigma\overline{v}}. \tag{2.870}$$

Für die mittlere freie Weglänge λ folgt

$$\lambda = \frac{1}{\sqrt{2}n\sigma}. \tag{2.871}$$

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 hänge 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 $z = z_0$

$$j_z = \frac{\text{Transport}}{\text{Zeit x Fläche}} = \frac{1}{6}\left(\left(n\overline{v}q\right)\left(z_0-\lambda\right)-\left(n\overline{v}q\right)\left(z_0+\lambda\right)\right) \approx \frac{1}{6}\frac{\partial\left(n\overline{v}q\right)}{\partial z}\left(-2\lambda\right) = -\frac{\lambda}{3}\frac{\partial\left(n\overline{v}q\right)}{\partial z}. \tag{2.872}$$

Dies kann man notieren als

$$j_z = -C\frac{\partial q}{\partial z}, \tag{2.873}$$

wenn man annimmt, dass q nicht mit anderen Größen korreliert. Für $q = 1$ und homogenes v erhält man *Diffusion*,

$$C \to D \approx \frac{\overline{v}\lambda}{3}, \tag{2.874}$$

D ist die *Diffusionskonstante*. Mit der Kontinuitätsgleichung

$$\frac{\partial n}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial z}(j_z) \tag{2.875}$$

folgt die *Diffusionsgleichung*

$$\frac{\partial n}{\partial t} = D\frac{\partial^2 n}{\partial z^2}. \tag{2.876}$$

bzw. in 3D

$$\frac{\partial n}{\partial t} = D\Delta n. \tag{2.877}$$

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 $u \ll \overline{v}$ gelten.

$$\begin{aligned} j_z &= \frac{\text{Impuls}}{\text{Zeit x Fläche}} = \frac{1}{6}\left((n\overline{v}mu)(z_0 - \lambda) - (n\overline{v}mu)(z_0 + \lambda)\right) \approx \frac{1}{6}\frac{\partial(n\overline{v}mu)}{\partial z}(-2\lambda) \\ &= -\frac{\lambda, mn\overline{v}}{3}\frac{\partial u}{\partial z}, \end{aligned} \tag{2.878}$$

wobei $\overline{v}$ 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

$$\frac{F}{A} = \eta\frac{\partial u}{\partial z} \tag{2.879}$$

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

$$\eta \approx \frac{n\lambda\overline{v}m}{3}. \tag{2.880}$$

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

$$\begin{aligned} j_z &= \frac{\text{Wärme}}{\text{Zeit x Fläche}} = \frac{1}{6}\left((n\overline{v}cT)(z_0 - \lambda) - (n\overline{v}cT)(z_0 + \lambda)\right) \approx \frac{1}{6}\frac{\partial(n\overline{v}cT)}{\partial z}(-2\lambda) \\ &= -\frac{\lambda cn\overline{v}}{3}\frac{\partial T}{\partial z}, \end{aligned} \tag{2.881}$$

Hieraus folgt

$$\frac{\partial T}{\partial t} \approx -\frac{\lambda\overline{v}}{3}\frac{\partial T}{\partial z}. \tag{2.882}$$

Die Größe

$$\varkappa \approx \frac{\lambda\overline{v}}{3} \tag{2.883}$$

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:

$$\begin{aligned} \frac{\partial (ncT)}{\partial t} + \nabla \cdot \boldsymbol{j}_{\text{Wärme}} &= 0 \\ \Leftrightarrow \frac{\partial T}{\partial T} &= \varkappa \Delta T \end{aligned} \tag{2.884}$$

Dies ist die *Wärmeleitungsgleichung*.

2.4.6 Clausius-Clapeyron-Gleichung

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 befinde sich im thermodynamischem Gleichgewicht, sodass (p, T) in beiden Systemen gleich ist. Die Subsysteme sind offen, es findet also Teilchenaustausch statt. Die Gleichgewichtsbedingung nach Glg. (2.713) lautet dann

$$\mu_1 (T, p) = \mu_2 (T, p) , \tag{2.885}$$

wobei μ das chemische Potential bezeichnet. Man interessiert sich nun für denjenigen Druck $p_S (T)$, bei dem beide Phasen koexistieren. Dies bedeutet

$$\mu_1 (T, p_S (T)) = \mu_2 (T, p_S (T)) . \tag{2.886}$$

Dies ist eine implizite Gleichung an die unbekannte Funktion $p_S (T)$. Man differenziert die Gleichung total nach T:

$$\frac{\partial \mu_1 (T, p)}{\partial T} + \frac{\partial \mu_1 (T, p)}{\partial p} \frac{dp_S (T)}{dT} = \frac{\partial \mu_2 (T, p)}{\partial T} + \frac{\partial \mu_2 (T, p)}{\partial p} \frac{dp_S (T)}{dT} \tag{2.887}$$

Nun setzt man die Glg.en (2.773) und (2.775) ein:

$$-\frac{S_1}{N_1} + \frac{V_1}{N_1} \frac{dp_S}{dT} = -\frac{S_2}{N_2} + \frac{V_2}{N_2} \frac{dp_S}{dT} \tag{2.888}$$

Es gilt für eine Zustandsgröße Z

$$\frac{Z_i}{N_i} = \frac{Z_i}{m_i} \frac{m_i}{N_i} = z_i M_i \tag{2.889}$$

mit der Masse m_i und der spezifischen Größe

$$z_i := \frac{Z_i}{m_i} . \tag{2.890}$$

Damit folgt mit den Definitionen $\Delta s := s_2 - s_1$ und $\Delta v := v_2 - v_1$

$$\Delta s = \Delta v \frac{dp_S}{dT} . \tag{2.891}$$

Man kann noch die spezifische Phasenübergangswärme

$$c := T \Delta s \tag{2.892}$$

verwenden:

$$\boxed{\frac{dp_S}{dT} = \frac{c}{T \Delta v}} \tag{2.893}$$

Dies ist die *Clausius-Clapeyron-Gleichung*. Diese Gleichung ist exakt lösbar für einfache Funktionen $c = c(T)$. Für das Volumen pro Teilchen v gilt

$$v = \frac{V}{N} = \frac{V}{nN_A} = \frac{VM}{MnN_A} = \frac{M}{N_A \varrho}, \tag{2.894}$$

dies ist mit der Dichte $\varrho = \varrho_l$ beispielsweise auf eine Flüssigkeit anwendbar. Für ein ideales Gas gilt

$$v = \frac{R_s T}{p} = \frac{R_s T}{p_S}, \tag{2.895}$$

somit folgt

$$T\Delta v = \frac{R_s T^2}{p_S} - \frac{MT}{N_A \varrho_l} \Rightarrow \frac{1}{T\Delta v} = \frac{p_S N_A \varrho_l}{N_A \varrho_l R_s T^2 - p_S MT}. \tag{2.896}$$

Somit kann man im Fall einer Flüssigkeit und eines idealen Gases notieren

$$\frac{dp_S}{dT} = \frac{c p_S N_A \varrho_l}{N_A \varrho_l R_s T^2 - p_S MT}. \tag{2.897}$$

Eine in der Meteorologie wird häufig die Näherung

$$T\Delta v \approx \frac{R_s T^2}{p_S} \tag{2.898}$$

gemacht, damit folgt

$$\frac{1}{p_S}\frac{dp_S}{dT} = \frac{c}{R_s T^2}. \tag{2.899}$$

Im Falle einer temperaturunabhängigen Phasenübergangsenthalpie c kann man dies analytisch lösen, in diesem Fall gilt

$$p_S = p_S(T) = k \exp\left(-\frac{T_0}{T}\right), \tag{2.900}$$

denn damit folgt

$$\frac{dp_S}{dt} = \frac{T_0}{T^2} p_S. \tag{2.901}$$

Dies impliziert

$$T_0 = \frac{c}{R_s}, \tag{2.902}$$

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 [9] empfohlenen Formeln. Über flüssigem Wasser gilt für $T \in [-45, 60]^\circ$ C

$$e(t) = 6,112 \exp\left(\frac{17,62t}{243,12 + t}\right), \tag{2.903}$$

über Eis gilt für$T \in [-65, 0]^\circ$ C

$$e(t) = 6,112 \exp\left(\frac{22,46t}{272,62 + t}\right), \tag{2.904}$$

wobei t die Temperatur in °C und e den jeweiligen Sättigungsdampfdruck in hPa bezeichnet.

2.4.7 Kapillarität

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

$$(x, y)^T \mapsto (x(1 + d\varepsilon), y)^T \tag{2.905}$$

interpretieren. Dabei nimmt die Energie des Systems um

$$dU = A\sigma d\varepsilon \tag{2.906}$$

zu, hierbei ist die Proportionalitätskonstante σ die *mechanische Oberflächenspannung*. Es gilt

$$\sigma = \frac{1}{A}\frac{dU}{d\varepsilon}. \tag{2.907}$$

Man stellt sich nun eine Zylinderscheibe mit einem Radius r und einem Öffnungswinkel φ vor, die auf dem $\mathbb{R}^2$ liegt:

$$Z := \left\{(x, y, z)^T \in \mathbb{R}^3 \,\middle|\, |x| \leq r\sin(\varphi) \wedge 0 \leq z \leq \sqrt{r^2 - x^2} - r(1 - \cos(\varphi))\right\} \tag{2.908}$$

Auf ein Flächenelement $dA = r2\sin(\varphi)\, dy$ wirkt in z-Richtung die Kraft

$$F_z = -2dy\sigma\sin(\varphi). \tag{2.909}$$

Das Vorzeichen von r ist in diesem Fall negativ, der sich durch F_z aufbauende *Kapillardruck* p_r ist positiv. Somit gilt

$$\boxed{p_r = -\frac{\sigma}{r}.} \tag{2.910}$$

Mit Glg. (B.45) folgt im Fall einer Oberflächenauslenkung η

$$\boxed{p_k \approx -\sigma\frac{\partial^2\eta}{\partial x^2}.} \tag{2.911}$$

Bisher wurde nur die Krümmung in einer Raumrichtung betrachtet. Berücksichtigt man beide, ergibt sich

$$\boxed{p_r = -\frac{2\sigma}{r}.} \tag{2.912}$$

2.4.7.1 Kelvin-Gleichung

Bisher wurde angenommen, dass die Phasengrenze eben ist bzw. dass die Oberflächenspannung Null ist. Im allgemeinen ist die Gleichgewichtsbedingung Glg. (2.885) vom Radius R der Grenzfläche abhängig:

$$\mu_1(R, T, V) = \mu_2(R, T, V) \tag{2.913}$$

Hierbei wurde die Abhängigkeit von p durch eine Abhängigkeit von V ersetzt. Im weiteren Verlauf der Herleitung wird nur R als Argument mitgeführt, da T und V als konstant angesehen werden. Für die Teilchendichte $n = N/V$ gilt nach Glg. (2.779)

$$n = \left(\frac{\partial p}{\partial \mu}\right)_{T,V} \overset{T,\, V\,\text{const.}}{\Rightarrow} d\mu = \frac{dp}{n}. \tag{2.914}$$

Glg. (2.913) impliziert

$$\begin{aligned} \mu_1(R) - \mu_1(\infty) &= \mu_2(R) - \mu_2(\infty) \\ \Leftrightarrow \int_\infty^R \frac{d\mu_1(r)}{dr} dr &= \int_\infty^R \frac{d\mu_2(r)}{dr} dr. \end{aligned} \tag{2.915}$$

Dies subsituiert man nun auf $p_i = p_i(r_i)$:

$$\begin{aligned} \int_{p_1(\infty)}^{p_1(R)} \frac{d\mu_1(r_1(p_1))}{dr_1} \frac{dr_1}{dp_1} dr_1 &= \int_{p_2(\infty)}^{p_2(R)} \frac{d\mu_2(r_2(p_2))}{dr_2} \frac{dr_2}{dp_2} dr_2 \\ \Leftrightarrow \int_{p_1(\infty)}^{p_1(R)} \frac{d\mu_1(p_1)}{dp_1} dp_1 &= \int_{p_2(\infty)}^{p_2(R)} \frac{d\mu_2(p_2)}{dp_2} dp_2 \end{aligned} \tag{2.916}$$

Es gilt

$$p_1(\infty) = p_2(\infty) = p_S. \tag{2.917}$$

1 bezeichne wieder die flüssige Phase und 2 die Gasphase. Man definiert

$$p_R := p_2(R). \tag{2.918}$$

Mit Glg. (2.912) folgt

$$p_1(R) = p_R + \frac{2\gamma}{R}. \tag{2.919}$$

Somit erhält man

$$\int_{p_S}^{p_R + \frac{2\gamma}{R}} \frac{d\mu_1(p_1)}{dp_1} dp_1 = \int_{p_S}^{p_R} \frac{d\mu_2(p_2)}{dp_2} dp_2. \tag{2.920}$$

Setzt man hier Glg. (2.914) ein, folgt

$$\int_{p_S}^{p_R + \frac{2\gamma}{R}} \frac{1}{n_1(p_1)} dp_1 = \int_{p_S}^{p_R} \frac{1}{n_2(p_2)} dp_2. \tag{2.921}$$

Nimmt man die flüssige Phase als inkompressibel an, ist $n_1 = n_l > 0$ konstant unabhängig von p. Mit der Zustandsgleichung idealer Gase $p_2 = n_2 k_B T$ folgt

$$\begin{aligned} \frac{p_R + \frac{2\gamma}{R} - p_S}{n_l} &= k_B T \int_{p_S}^{p_R} \frac{1}{p_2} dp_2 = k_B T \ln\left(\frac{p_R}{p_S}\right) \\ \Leftrightarrow \frac{N_A}{M} k_B T \ln\left(\frac{p_R}{p_S}\right) &= \frac{N_A}{M} \frac{p_R + \frac{2\gamma}{R} - p_S}{n_l}, \end{aligned} \tag{2.922}$$

wobei M die molare Masse des betrachteten Stoffes ist. Unter der Annahme

$$\frac{2\gamma}{R} \gg p_R - p_S \tag{2.923}$$

folgt hieraus die *Kelvin-Gleichung*

$$\boxed{\ln\left(\frac{p_R}{p_S}\right) = \frac{2\gamma}{R_s T R \varrho_l}.} \tag{2.924}$$

Die Größe

$$\Delta U := \frac{p_R}{p_S} - 1 = \exp\left(\frac{2\gamma}{R_s T R \varrho_l}\right) - 1 \geq 0 \tag{2.925}$$

Abbildung 2.1: Differenz zwischen der Sättigungsfeuchte über einer gekrümmten Oberfläche und über einer ebenen Oberfläche am Beispiel von Wasser.

ist die Sättigungsfeuchte über einer gekrümmten Oberfläche in Relation zur Sättigungsfeuchte über einer ebenen Oberfläche. Abb. 2.1 veranschaulicht dies am Beispiel von H_2O.

2.4.8 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, $\boldsymbol{k} = k\boldsymbol{e}_z$, folgt im Fall stehender Wellen für das elektrische Feld

$$\boldsymbol{E}(z,t) = \left(E_{0,x}\boldsymbol{e}_x + E_{0,y}\boldsymbol{e}_y\right)\sin(kz)\sin(\omega t)\,. \tag{2.926}$$

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

$$k_i L = i\pi \Leftrightarrow k_i = \frac{\pi}{L} i \tag{2.927}$$

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:

$$\sum_{k_i} \ldots = \frac{L}{\pi}\int_0^\infty \ldots dk = \frac{L}{2\pi}\int_{-\infty}^\infty \ldots dk. \tag{2.928}$$

Für eine Summe über alle Moden im Hohlraum gilt

$$\sum_{m=1}^{2}\sum_{\boldsymbol{k}} \ldots = \frac{2V}{(2\pi)^3}\int \ldots d^3k. \tag{2.929}$$

m läuft dabei über die zwei möglichen Polarisationsrichtungen. Für die Energien $E = E(\boldsymbol{k}, m)$ gilt nach Glg. (2.219)

$$E(\boldsymbol{k}, m) = \hbar\omega(k) = \hbar ck. \tag{2.930}$$

Ein Mikrozustand r des Systems ist durch die Angabe der Besetzungszahlen

$$r = (n_{\boldsymbol{k},m}) \tag{2.931}$$

gegeben, also die Anzahl der Anregungen für jede Schwingungsmode, eine Anregung ist ein Photon. Für die Energie $E_r(V)$ des Mikrozustandes ergibt sich

$$E_r(V) = \sum_{m,\boldsymbol{k}} \hbar\omega(k)\, n_{\boldsymbol{k},m} = \hbar c \sum_{\boldsymbol{k},m} k n_{\boldsymbol{k},m}. \tag{2.932}$$

Nun sind die mittleren Besetzungszahlen $\overline{n}_{\boldsymbol{k},m}$ zu ermitteln. Hierfür geht man aus von der großkanonischen Zustandssumme eines Systems ohne Polaristionsfreiheitsgrad, also $m = 1$:

$$\begin{aligned} Y &= \sum_r \exp\left[-\beta\left(E_r - \mu N_r\right)\right] = \sum_{n_{\boldsymbol{p}_1}=0}^{\infty} \exp\left[-\beta\left(E_{p_1} - \mu\right) n_{\boldsymbol{p}_1}\right] \cdot \sum_{n_{\boldsymbol{p}_2}=0}^{\infty} \exp\left[-\beta\left(E_{p_2} - \mu\right) n_{\boldsymbol{p}_2}\right] \cdot \ldots \\ &\overset{(A.7)}{=} \prod_{\boldsymbol{p}} \frac{1}{1 - \exp\left(-\beta\left(E_p - \mu\right)\right)}. \end{aligned} \tag{2.933}$$

Es folgt

$$\begin{aligned} \overline{n}_{\boldsymbol{p}_i} &= \frac{1}{Y} \sum_r n_{\boldsymbol{p}_i} \exp\left[-\beta\left(E_r - \mu N_r\right)\right] = \frac{1}{Y} \sum_{n_{\boldsymbol{p}_1}=0}^{\infty} \cdots \sum_{n_{\boldsymbol{p}_i}=0}^{\infty} \ldots n_{\boldsymbol{p}_i} \exp\left[-\beta\left(E_{\boldsymbol{p}_i} - \mu\right) n_{\boldsymbol{p}_i}\right] \ldots \\ &= \frac{1}{Y} \sum_{n_{\boldsymbol{p}_1}=0}^{\infty} \cdots \left(\frac{1}{\beta} \frac{\partial}{\partial \mu} \sum_{n_{\boldsymbol{p}_i}=0}^{\infty} \exp\left[-\beta\left(E_{\boldsymbol{p}_i} - \mu\right) n_{\boldsymbol{p}_i}\right] \right) \ldots = \frac{1}{Y} \sum_{n_{\boldsymbol{p}_1}=0}^{\infty} \cdots \left(\frac{1}{\beta} \frac{\partial}{\partial \mu} \frac{1}{1 - \exp\left[-\beta\left(E_{\boldsymbol{p}_i} - \mu\right)\right]} \right) \ldots \\ &= \frac{1}{Y} \sum_{n_{\boldsymbol{p}_1}=0}^{\infty} \cdots \left(\frac{\exp\left[-\beta\left(E_{\boldsymbol{p}_i} - \mu\right)\right]}{\left(1 - \exp\left[-\beta\left(E_{\boldsymbol{p}_i} - \mu\right)\right]\right)^2} \right) \ldots = \frac{\exp\left[-\beta\left(E_{\boldsymbol{p}_i} - \mu\right)\right]}{1 - \exp\left[-\beta\left(E_{\boldsymbol{p}_i} - \mu\right)\right]}. \end{aligned} \tag{2.934}$$

Dies ist die *Bose-Verteilung*, sie gilt für Teilchen mit ganzzahligem Spin:

$$\boxed{\overline{n}_{\boldsymbol{p}} = \frac{1}{e^{\beta\left(E_{\boldsymbol{p}} - \mu\right)} - 1}} \tag{2.935}$$

Die Energieeigenwerte $E_r(V)$ hängen nicht von der Phononenanzahl N ab, daher gilt

$$\mu = \overline{\frac{\partial E_r(V)}{\partial N}} = 0, \tag{2.936}$$

das chemische Potential verschwindet. Somit gilt

$$\overline{n}_{\boldsymbol{k},m} = \frac{1}{\exp\left(\beta E_k\right) - 1}. \tag{2.937}$$

Es folgt

$$\begin{aligned} E(T,V) = \overline{E_r(T,V)} &= \sum_{m,\boldsymbol{k}} E_k \overline{n_k} = \frac{2V}{(2\pi)^3} \int \frac{\hbar c k}{\exp\left(\beta\hbar c k\right) - 1} d^3k = \frac{2V}{(2\pi)^3} 4\pi \int_0^\infty \frac{\hbar c k^3}{\exp\left(\beta\hbar c k\right) - 1} dk \\ &= V \int_0^\infty \underbrace{\frac{\hbar}{c^3\pi^2} \frac{\omega^3}{\exp\left(\beta\hbar\omega\right) - 1}}_{=u(\omega)} d\omega. \end{aligned} \tag{2.938}$$

$$\boxed{u(\omega) = \frac{\hbar}{\pi^2 c^3} \frac{\omega^3}{\exp\left(\frac{\hbar\omega}{k_B T}\right) - 1}.} \tag{2.939}$$

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

$$J(\omega) = \frac{u(\omega)}{4\pi} c = \frac{\hbar}{4\pi^3 c^2} \frac{\omega^3}{\exp\left(\frac{\hbar\omega}{k_B T}\right) - 1}. \tag{2.940}$$

Die spektrale Intensität $I(\omega)$ einer strahlenden Oberfläche berechnet berechnet sich daraus zu

$$I(\omega) = \int_{\vartheta=0}^{\pi/2} \int_{\varphi=0}^{2\pi} J(\omega) \cos(\vartheta) \sin(\vartheta)\, d\vartheta d\varphi = 2\pi \frac{1}{2} J(\omega) = \frac{\hbar}{4\pi^2 c^2} \frac{\omega^3}{\exp\left(\frac{\hbar\omega}{k_B T}\right) - 1}. \tag{2.941}$$

Integriert man dies über das gesamte Spektrum, folgt für die abgestrahlte Leistungsdichte

$$\frac{P}{A} = \int_0^\infty I(\omega)\, d\omega = \frac{\hbar}{4\pi^2 c^2} \int_0^\infty \frac{\omega^3}{\exp\left(\frac{\hbar\omega}{k_B T}\right) - 1} d\omega = \frac{k_B^4 T^4}{4\pi^2 c^2 \hbar^3} \int_0^\infty \frac{x^3}{e^x - 1} d^x \tag{2.942}$$

Mit Glg. (A.107) folgt

$$P = P(T) = \frac{k_B^4 \pi^2}{60 c^2 \hbar^3} T^4. \tag{2.943}$$

Dies ist das *Stefan-Boltzmann-Gesetz*, man definiert

$$\sigma := \frac{k_B^4 \pi^2}{60 c^2 \hbar^3} \tag{2.944}$$

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

$$\varepsilon = \varepsilon(\omega, T, \vartheta, \varphi) \tag{2.945}$$

abweichende spektrale Strahldichte:

$$J_{\text{real}}(\omega, T, \vartheta, \varphi) = \varepsilon(\omega, T, \vartheta, \varphi) J(\omega, T). \tag{2.946}$$

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

$$\frac{dP_{\text{abs}}}{dA} = \int_{\omega=0}^\infty \int_{\vartheta=0}^{\pi/2} \int_{\varphi=0}^{2\pi} a(\omega, T, \vartheta, \varphi) J(\omega, T) \cos(\vartheta) \sin(\vartheta)\, d\varphi d\vartheta d\omega, \tag{2.947}$$

hierbei wurde der Absorptionskoeffizient $a(\omega, T, \vartheta, \varphi)$ eingeführt. Da von einem thermodynamischen Gleichgewicht ausgegangen wird, gilt für die emittierte Leistungsdichte

$$\frac{dP_{\text{emt}}}{dA} = \int_{\omega=0}^\infty \int_{\vartheta=0}^{\pi/2} \int_{\varphi=0}^{2\pi} \varepsilon(\omega, T, \vartheta, \varphi) J(\omega, T) \cos(\vartheta) \sin(\vartheta)\, d\varphi d\vartheta d\omega = \frac{dP_{\text{abs}}}{dA}. \tag{2.948}$$

Daraus folgt

$$\int_{\omega=0}^{\infty}\int_{\vartheta=0}^{\pi/2}\int_{\varphi=0}^{2\pi}\left(\varepsilon\left(\omega,T,\vartheta,\varphi\right)-a\left(\omega,T,\vartheta,\varphi\right)\right)J\left(\omega,T\right)\cos\left(\vartheta\right)\sin\left(\vartheta\right)d\varphi d\vartheta d\omega=0. \tag{2.949}$$

Da die spektrale Energiedichte des Hohlraums konstant ist, gilt sogar

$$\int_{\vartheta=0}^{\pi/2}\int_{\varphi=0}^{2\pi}\left[\varepsilon\left(\omega,T,\vartheta,\varphi\right)-a\left(\omega,T,\vartheta,\varphi\right)\right]\sin\left(\vartheta\right)\cos\left(\vartheta\right)d\varphi d\vartheta=0. \tag{2.950}$$

Definiert man

$$\varepsilon\left(\omega,T\right):=\int_{\vartheta=0}^{\pi/2}\int_{\varphi=0}^{2\pi}\varepsilon\left(\omega,T,\vartheta,\varphi\right)\sin\left(\vartheta\right)\cos\left(\vartheta\right)d\varphi d\vartheta. \tag{2.951}$$

und analog für den Absorptionskoeffizienten, folgt

$$\varepsilon\left(\omega,T\right)=a\left(\omega,T\right). \tag{2.952}$$

Nun betrachtet man spezifisch die durch ϑ und φ vorgegebene Richtung. Hier geht von dA die spektral Strahldichte

$$\begin{aligned}&J_{\text{out}}\left(\omega,T\right)=J\left(\omega,T\right)\\=\;&J\left(\omega,T\right)\left(\varepsilon\left(\omega,T,\vartheta,\varphi\right)+\int_{\varphi'=0}^{2\pi}\int_{\vartheta'=0}^{\pi/2}s\left(\vartheta',\varphi',\vartheta,\varphi,\omega,T\right)\cos\left(\vartheta'\right)\sin\left(\vartheta'\right)d\vartheta' d\varphi'\right)\end{aligned} \tag{2.953}$$

aus. Der Klammerausdruck ergibt sich zu Eins. Dabei wurde der *Streuquerschnitt* $s\left(\vartheta',\varphi',\vartheta,\varphi,\omega,T\right)$ definiert. Er beschreibt, in welchem Maße Strahlung, die aus der Richtung $\left(\vartheta',\varphi'\right)$ einfällt, in die Richtung $\left(\vartheta,\varphi\right)$ umgelenkt wird, ohne zwischendurch absorbiert und wieder emittiert zu werden. Für die einfallende spektrale Strahldichte gilt

$$\begin{aligned}&J_{\text{in}}\left(\omega,T\right)=J\left(\omega,T\right)\\=\;&J\left(\omega,T\right)\left(a\left(\omega,T,\vartheta,\varphi\right)+\int_{\varphi'=0}^{2\pi}\int_{\vartheta'=0}^{\pi/2}s\left(\vartheta,\varphi,\vartheta',\varphi',\omega,T\right)\cos\left(\vartheta'\right)\sin\left(\vartheta'\right)d\vartheta' d\varphi'\right)\end{aligned} \tag{2.954}$$

Der Klammerausdruck muss sich wieder zu Eins ergeben. Da die Maxwell-Gleichungen genau wie die Schrödinger-Gleichung invariant gegen Zeitumkehr sind, gilt

$$s\left(\vartheta,\varphi,\vartheta',\varphi',\omega,T\right)=s\left(\vartheta',\varphi',\vartheta,\varphi,\omega,T\right). \tag{2.955}$$

Daraus folgt

$$\varepsilon\left(\omega,T,\vartheta,\varphi\right)=a\left(\omega,T,\vartheta,\varphi\right) \tag{2.956}$$

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

$$\varepsilon\leq 1. \tag{2.957}$$

Körper mit $\varepsilon\left(\vartheta,\varphi,\omega\right)=1$ 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 von einem kontinuierlichen Materiebild ausgegangen werden kann. 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

3.1.1 Gasphase

Feuchte Luft ist eine Mischung aus trockener Luft und Wasserdampf. Die Anzahl der berücksichtigen *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 $\varrho_d : A \to \mathbb{R}$ wird definiert durch

$$\varrho_d := \frac{1}{\Delta V} \sum_{i=1}^{N_d} m_i^{(d)}. \tag{3.1}$$

  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* $\boldsymbol{v} : A \to \mathbb{R}^3$ wird definiert durch

$$\boldsymbol{v} := \frac{1}{\sum_{j=1}^{N_g} m_j^{(g)}} \sum_{i=1}^{N_g} m_i^{(g)} \boldsymbol{v}_i^{(g)}, \tag{3.2}$$

  wobei $\boldsymbol{v}_i^{(g)}$ die Geschwindigkeit des $i-$ten Moleküls des gasförmigen Anteils der Luft in ΔV ist.

- Die Temperatur $T : A \to \mathbb{R}$ der feuchten Luft.
- $p : A \to \mathbb{R}$ sei der Druck.

3.1.2 Zweiter Kontinuumsübergang

Die Herleitung der Navier-Stokes-Gleichungen beruht auf einer kontinuierlichen Vorstellung von Materie, welche durch einen Kontinuumsübergang motiviert wurde. Der Kontinuumsübergang ist eine heuristische Idee, die auf der Annahme beruht, dass Materie irgendwann kontinuierlich wird, wenn man nur so weit herauszoomt, dass die Grobkörnigkeit der Materie in Form von Atomen und Molekülen verschwimmt. Mathematisch bedeutet dies, anstatt eine Anzahl von Bahnkurven stetig differenzierbare Felder zur Beschreibung des Systems zu verwenden.

Mit einem ähnlichen Problem ist man konfrontiert, wenn man Phasenübergänge und Kondensate in die Beschreibung mit aufnimmt. Man könnte nun die Kondensate durch Bahnkurven beschreiben, während man die

Gasphase weiterhin als Fluid auffasst. Dies hat jedoch die zwei Nachteile: Zunächst muss man für so eine Formulierung die technische Frage beantworten, ab welcher Größe etwas also Kondensat aufgefasst wird; außerdem ist der Rechenaufwand hierfür enorm. Stattdessen macht man den sogenannten *Zweiten Phasenübergang*, welcher auch die Massendichten und sonstigen Eigenschaften der Kondensate als stetig differenzierbare Funktionen auffasst. Dies ist natürlich nicht exakt in einem Sinne in dem die Maxwell-Gleichungen exakt sind, das prinzipielle Problem ist jedoch schon in den Navier-Stokes-Gleichungen selbst angelegt.

Folgende Zustandsgrößen werden für die Kondensate, die von nun an auch als *Tracer* bezeichnet werden, zusätzlich eingeführt:

- Die Dichten der Tracerklassen $\varrho_i : A \to \mathbb{R}$ werden analog zu ϱ_d definiert.
- Die $Q_i : A \to \mathbb{R}$ seien die Ladungsdichten der Tracer.
- Die Massenstromdichte $\boldsymbol{j}_i : A \to \mathbb{R}^3$ der $i-$ten Tracerklasse wird definiert durch

$$\boldsymbol{j}_i := \varrho_i \sum_{k=1}^{N_i} \boldsymbol{v}_k^{(i)}, \tag{3.3}$$

  wobei $\boldsymbol{v}_k^{(i)}$ die Geschwindigkeit des $k-$ten Teilchens der entsprechenden Tracerklasse in ΔV ist.
- Die Temperatur $T_i : A \to \mathbb{R}$ sei diejenige der $i-$ten Tracerklasse, alle Teilchen einer Klasse sollen die gleiche Temperatur haben. DIe gasförmigen Tracer haben die Temperatur der feucten Luft.
- Weiterhin betrachtet man das Feld der spektralen Strahldichte $L_\lambda : A \times [0, \infty) \times [0, \pi] \times [0, 2\pi) \to \mathbb{R}$.
- Das *elektrische Feld* $\boldsymbol{E}$ sowie die *magnetische Flussdichte* $\boldsymbol{B}$ müssen benefalls 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 Kondensatklasse habe die *mikroskopische Dichte* ϱ_i', damit ist beispielsweise die Dichte des Wassers $\sim 10^3$ kgm^{-3} gemeint in Abgrenzung zur über ein Teilchen gemittelten Dichte. Die ϱ_i' werden als Konstanten angenommen, die nicht von äußeren Bedingungen abhängen, für sie gilt

$$\varrho_i' = \frac{m_i}{V_i}, \tag{3.4}$$

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

$$\varrho = \frac{m_g + \sum_{i \in \{\text{Kondensatklassen}\}} m_i}{V_g + \sum_{i \in \{\text{Kondensatklassen}\}} V_i}. \tag{3.5}$$

Für die Dichte des Anteils ϱ_i gilt allgemein

$$\varrho_i = \frac{m_i}{v_h} = \frac{m_i}{V_g + \sum_{i \in \{\text{Kondensatklassen}\}} V_i}. \tag{3.6}$$

Für die Dichte ϱ_g der gasförmigen Luft gilt

$$\varrho_g = \frac{m_g}{v_h} = \frac{m_g}{V_g + \sum_{i \in \{\text{Kondensatklassen}\}} V_i}. \tag{3.7}$$

Für die mikroskopischen Dichten der gasförmigen Luft erhält man

$$\begin{aligned}\varrho_g' &= \frac{m_g}{V_g} = \frac{m_g}{V - \sum_{i\in\{\text{Kondensatklassen}\}} V_i} = \frac{1}{\frac{V}{m_g} - \sum_{i\in\{\text{Kondensatklassen}\}} \frac{V_i}{m_g}} \\ &= \frac{1}{\frac{1}{\varrho_g} - \sum_{i\in\{\text{Kondensatklassen}\}} \frac{V_i}{m_i}\frac{m_i}{m_g}} = \frac{\varrho_g}{1 - \sum_{i\in\{\text{Kondensatklassen}\}} \frac{\varrho_i}{\varrho_i'}}. \end{aligned} \tag{3.8}$$

Die mikroskopische Dichte des Wasserdampfes ϱ_v' bezeichnet man auch als *mikroskopische Feuchte*. Für sie gilt analog

$$\varrho_v' = \frac{m_v}{V_g} = \frac{\varrho_v}{1 - \sum_{i\in\{\text{Kondensatklassen}\}} \frac{\varrho_i}{\varrho_i'}}. \tag{3.9}$$

Für die Zustandsgleichung von Luft gilt somit

$$\boxed{p = T_g R_g \varrho_g'.} \tag{3.10}$$

3.1.2.1 Deskriptiver Informationsverlust

In der statistischen Physik geht man bei der Beschreibung vom Mikrozustand zum Makrozustand über und sieht diese Beschreibung als statistisch vollständig an. In ähnlicher Weise kann man sich fragen, ob die in den vorangegangenen beiden Abschnitten entwickelte Beschreibung vollständig ist. Sie wäre dies (unter Annahme des Zweiten Kontinuumsübergangs) nur dann, wenn man unendlich viele Tracerklassen einführt und in jeder Teilchenklase wiederum eine kontinuierliche Temperaturverteilung annimmt. Bis auf die einschränkende Annahme, dass alle Teilchen einer Tracerklasse die gleiche Temperatur haben, hat die obige Beschreibung also das Potential eine unter gewissen Annahmen vollständige Beschreibung zu sein.

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

$$q = \frac{m(t)}{tV}. \tag{3.11}$$

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

$$q' = \frac{m'(t)}{tV'(t)}. \tag{3.12}$$

Im Fall $t \to 0$ geht $V' \to V$. Daher gilt

$$\begin{aligned}\lim_{t\to 0}(q - q') &= \lim_{t\to 0}\left[\frac{m(t)}{Vt} - \frac{m'(t)}{V'(t)\,t}\right] = \lim_{t\to 0}\frac{m(t)}{Vt} - \lim_{t\to 0}\frac{m'(t)}{V'(t)\,t} \\ &= \frac{1}{V}\lim_{t\to 0}\frac{m(t)}{t} - \lim_{t\to 0}\frac{1}{V'(t)}\lim_{t\to 0}\frac{m'(t)}{t} \\ &= \frac{1}{V}\lim_{t\to 0}\frac{m(t)}{t} - \frac{1}{v_h}\lim_{t\to 0}\frac{m'(t)}{t} = \frac{1}{v_h}\lim_{t\to 0}\frac{m(t) - m'(t)}{t} \end{aligned} \tag{3.13}$$

nach den Rechenregeln für Funktionsgrenzwerte. Mit der wahren orts- und zeitabhängigen Kondensationsrate $q_r(\boldsymbol{r}, t)$ kann man

$$m(t) = \int_0^t \int_V q_r(\boldsymbol{r}, t)\, d^3r dt' \tag{3.14}$$

sowie

$$m'(t) = \int_0^t \int_{V'(t)} q_r(\boldsymbol{r}, t)\, d^3r dt' \tag{3.15}$$

notieren. Damit erhält man

$$\begin{aligned} m(t) - m'(t) &= \int_0^t \int_V q_r(\boldsymbol{r}, t)\, d^3r dt' - \int_0^t \int_{V'(t)} q_r(\boldsymbol{r}, t)\, d^3r dt' \\ &= \int_0^t \left[\int_V q_r(\boldsymbol{r}, t)\, d^3r - \int_{V'(t)} q_r(\boldsymbol{r}, t)\, d^3r \right] dt'. \end{aligned} \tag{3.16}$$

Nach dem Hauptsatz der Differenzial- und Integralrechnung folgt

$$\lim_{t \to 0} \frac{m(t) - m'(t)}{t} = \frac{1}{V} \lim_{t \to 0} \left[\int_V q_r(\boldsymbol{r}, t)\, d^3r - \int_{V'(t)} q_r(\boldsymbol{r}, t)\, d^3r \right] = 0. \tag{3.17}$$

Also ist $q - q' = 0$ für den Grenzfall $t \to 0$. 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 $\boldsymbol{j}$ die entsprechende Flussdichte. Dann gilt mit dem Gaußchen Satz und einer Quelldichte Q

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \int_\Omega \varrho d^3r &= -\int_{\partial\Omega} \boldsymbol{j} \cdot d\boldsymbol{n} + \int_\Omega Q d^3r = -\int_\Omega \nabla \cdot \boldsymbol{j} - Q d^3r \\ \Rightarrow \int_\Omega \frac{\partial \varrho}{\partial t} + \nabla \cdot \boldsymbol{j} - Q d^3r &= 0. \end{aligned} \tag{3.18}$$

Da der Integrand stetig ist, ist selbiger bereits homogen und konstant gleich Null. Gilt nämlich $\left| \frac{\partial \varrho}{\partial t} + \nabla \cdot \boldsymbol{j} - Q \right| > \varepsilon > 0$ an einer Stelle $\boldsymbol{r}_0 \in \Omega$, so exisitiert eine offene Umgebung $\omega \subseteq \Omega$ mit $\boldsymbol{r}_0 \in \omega$ und $\int_\omega \frac{\partial \varrho}{\partial t} + \nabla \cdot \boldsymbol{j} - Q d^3r \neq 0$ im Widerspruch zu Glg. (3.18). Es gilt somit

$$\frac{\partial \varrho}{\partial t} + \nabla \cdot \boldsymbol{j} = Q. \tag{3.19}$$

In Termen des spezifischen Volumens a kannman dies als

$$\begin{aligned} -\frac{1}{a^2} \frac{\partial a}{\partial t} - \frac{1}{a^2} \boldsymbol{v} \cdot \nabla a + \frac{1}{a} \nabla \cdot \boldsymbol{v} &= 0 \\ \frac{\partial a}{\partial t} &= a \nabla \cdot \boldsymbol{v} - \boldsymbol{v} \cdot \nabla a. \end{aligned} \tag{3.20}$$

notieren. Dies notiert man nun separat für alle Komponenten der Luft:

$$\frac{\partial \varrho_d}{\partial t} + \nabla \cdot \boldsymbol{j}_d = Q_d \tag{3.21}$$
$$\frac{\partial \varrho_v}{\partial t} + \nabla \cdot \boldsymbol{j}_v = Q_v \tag{3.22}$$
$$\frac{\partial \varrho_i}{\partial t} + \nabla \cdot \boldsymbol{j}_i = Q_i \tag{3.23}$$

Dabei gelten

$$\boldsymbol{j}_d = \varrho_d \boldsymbol{v} - D_d \nabla \varrho_d, \tag{3.24}$$
$$\boldsymbol{j}_v = \varrho_v \boldsymbol{v} - D_v \nabla \varrho_v. \tag{3.25}$$

Die D_d, D_v sind die Diffusionskoeffizienten für trockene bzw. feuchte Luft. Man kann zunächst

$$Q_d = 0 \tag{3.26}$$

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

$$Q_d = D_d \Delta \varrho_d \tag{3.27}$$

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 $\sigma_{j,k} = \pi \left(r_j + r_k\right)^2$. Die gemittelte Relativgeschwindigkeit zwischen den Teilchen der Klassen j und k sei $\overline{v_{\text{rel}}}\left(j,k\right)$. Dann durchfliegt ein Partikel der Klasse j in der Zeit t relativ zu den Partikeln der Klasse k ein Volumen $\sigma_{j,k}\overline{v_{\text{rel}}}\left(j,k\right)t$. 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

$$n_k \sigma_{j,k} \overline{v_{\text{rel}}}\left(j,k\right) \tau_{j,k} \overset{!}{=} 1. \tag{3.28}$$

Alle Teilchen der Gruppe j nehmen an Stoßprozessen teil, deshalb ist die Gesamt-Stoßrate von Teilchen j mit Partikeln k gegeben durch

$$\frac{n_j}{\tau_{j,k}} = n_j n_k \sigma_{j,k} \overline{v_{\text{rel}}}\left(j,k\right). \tag{3.29}$$

Ist $\tilde{m}_i$ die Masse der Teilchen der Gruppe $i = R_{j,k}$, so ergibt sich eine entsprechende Quellstärke

$$\tilde{m}_i \sigma_{j,k} n_j n_k \overline{v_{\text{rel}}}\left(j,k\right) P_{j,k}. \tag{3.30}$$

Weiterhin muss auch ein negativer Anteil der Quellstärke berücksichtigt werden, der dadurch zustande kommt, dass Teilchen ihrer ursprünglichen Kondensatklasse verlorengehen, wenn sie sich mit anderen Teilchen verbinden. Dies führt zu

$$Q_i^{(\text{Kollisionen})} = \tilde{m}_i \sum_j \sum_{k \leq j} \sigma_{j,k} n_j n_k \overline{v_{\text{rel}}}\left(j,k\right) P_{j,k} \left(\delta_{i,R_{j,k}} - \delta_{j,i} - \delta_{k,i}\right). \tag{3.31}$$

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 Teilchendichte n_j durch Zerfälle gilt

$$dn_j = -n_j \lambda_j dt \Leftrightarrow \frac{dn_j}{dt} = -\lambda_j n_j, \tag{3.32}$$

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

$$1 = \sum_k \sum_{l \leq k} Z_{j,k,l}, \tag{3.33}$$

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 Kondensatklasse i wieder positive und negative Terme beachtet werden, sodass gilt

$$Q_i^{(\text{Zerfälle})} = \tilde{m}_i \sum_j \sum_k \sum_{l \leq k} \lambda_j n_j Z_{j,k,l} \left(\delta_{i,k} + \delta_{i,l} - \delta_{j,i} \right). \tag{3.34}$$

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

$$Q_v^{(\pm\text{Entstehung})} = \sum_j \tilde{q}'_{j,v} - \tilde{q}'_{v,j}, \tag{3.35}$$

$$Q_i^{(\pm\text{Entstehung})} = \tilde{q}'_{v,i} - \tilde{q}'_{i,v}. \tag{3.36}$$

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

$$\varrho_{g(i)}(t)\,\Delta V + m_i = \varrho_{g(i)}(t + \Delta t)\,\Delta V. \tag{3.37}$$

Hierbei ist $g(i)$ diejenige Kondensatklasse, die aus i durch Wachstum entsteht. Damit folgt

$$\frac{\partial \varrho_{g(i)}}{\partial t} = \frac{1}{\Delta V} \frac{dm_i}{dt} =: \tilde{q}''_{v,i}. \tag{3.38}$$

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

$$\frac{\partial \varrho_{d(i)}}{\partial t} =: \tilde{q}''_{i,v}, \tag{3.39}$$

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

$$Q_i^{(\text{Umwandlung})} = \sum_j \tilde{q}'''_{j,i} - \tilde{q}'''_{i,j}. \tag{3.40}$$

Die Quellstärken stellen sich zusammenfassend folgendermaßen dar:

$$
\begin{aligned}
Q_d &= D_d \Delta \varrho_d && (3.41)\\
Q_v &= \sum_i \left(\widetilde{q}'_{i,v} - \widetilde{q}'_{v,i} + \widetilde{q}''_{i,v} - \widetilde{q}''_{v,i} \right) + D_v \Delta \varrho_v && (3.42)\\
Q_i &= \tilde{m}_i \sum_j \sum_{k \leq j} \sigma_{j,k} n_j n_k \overline{v_{\mathrm{rel}}}\,(j,k)\, P_{j,k} \left(\delta_{i,R_{j,k}} - \delta_{j,i} - \delta_{k,i} \right) + \widetilde{q}'_{v,i} - \widetilde{q}'_{i,v} \\
&\quad + \tilde{m}_i \sum_j \sum_k \sum_{l \leq k} \lambda_j n_j Z_{j,k,l} \left(\delta_{i,k} + \delta_{i,l} - \delta_{j,i} \right) + \left(\widetilde{q}''_{g(i),v} + \widetilde{q}''_{v,d(i)} \right) + \sum_j \widetilde{q}'''_{j,i} - \widetilde{q}'''_{i,j} && (3.43)
\end{aligned}
$$

Die genaue Berechnung der $P_{j,k}, \lambda_j$ 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 $\boldsymbol{j}_i$ angegeben werden. v_i sei die Gleichgewichts-Sinkgeschwindigkeit der Partikel i, dann kann man von

$$\boldsymbol{j}_i = \varrho_i \boldsymbol{v} - \boldsymbol{k} \varrho_i v_i \tag{3.44}$$

ausgehen. Für den Niederschlag P_i der Kondensatklasse i gilt

$$P_i = -j_i \left(z_{\mathrm{SFC}} \right), \tag{3.45}$$

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. (2.830)), da sie im Falle einer mit dem Windfeld advehierten Komponente i eine Erhaltungsgröße ist:

$$\frac{Dq}{Dt} = -\frac{q}{\varrho} \frac{D\varrho}{Dt} + \frac{1}{\varrho} \frac{D\varrho_i}{Dt} = q \nabla \cdot \boldsymbol{v} - q \nabla \cdot \boldsymbol{v} = 0 \tag{3.46}$$

Die Quellterme von q sind diejenigen von ϱ_i dividert durch die Dichte des Mediums ϱ.

3.4 Impulsgleichung

Der Impuls $\boldsymbol{p}$ eines Teilchens ΔV mit N_h Gasmolekülen und N_c Kondensatkernen ist durch

$$\boldsymbol{p} = \sum_{i=1}^{N_h+N_c} m_i \boldsymbol{v}_i \overset{\text{Glg. (3.2)}}{=} \boldsymbol{v} \sum_{j=1}^{N_h} m_j + \sum_{j=N_h+1}^{N_h+N_c} m_j \left(\boldsymbol{v} + \Delta \boldsymbol{v}_j \right), \tag{3.47}$$

Hierbei ist $\Delta \boldsymbol{v}_j$ die als dichteunabhängig angenommene Sinkgeschwindigeit der entsprechenden Kondensatklasse. Man kann in Inertialsystemen das Zweite Newton'sche Axiom notieren:

$$\frac{D\boldsymbol{p}}{Dt} = \varrho \Delta V \frac{D}{Dt} \boldsymbol{v} = \boldsymbol{F}_{\mathrm{int}} + \boldsymbol{F}_{\mathrm{ext}} \tag{3.48}$$

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

$$\boldsymbol{F}_{\mathrm{int}} = \sum_{i,j=1}^{N} \boldsymbol{F}_{i,j} = \sum_{i=1}^{N} \sum_{j=i+1}^{N} \boldsymbol{F}_{i,j} + \boldsymbol{F}_{j,i} \overset{\text{Newton III}}{=} 0. \tag{3.49}$$

Hierbei ist $\boldsymbol{F}_{i,j}$ die Kraft auf das $i-$te Teilchen aufgrund des $j-$ten Teilchens. Für $\boldsymbol{F}_{\mathrm{ext}}$ kommen zwei Arten von Kräften in Frage:

- Kraftfelder ferner Ladungs- und Massenverteilungen
- Wechselwirkungen mit Nachbarteilchen

Unter den ersten Punkt fällt gewöhnlich nur das Schwerefeld. Für die Gewichtskraft $\boldsymbol{F}_g$ gilt

$$\boldsymbol{F}_g = \sum_{i=1}^{N} m_i \boldsymbol{g} = \varrho \Delta V \boldsymbol{g}. \tag{3.50}$$

Für die Kraft, die aufgrund des Drucks auf die offene Kugel $\Omega := B_r(\boldsymbol{r}_0)$ mit Radius r mit $\Delta V = \frac{4}{3}\pi r^3$ und Mittelpunkt $\boldsymbol{r}_0$ wirkt, gilt

$$\boldsymbol{F}_p = -\int_{\partial \Delta V} p d\boldsymbol{A}. \tag{3.51}$$

Man geht hier von einem kugelförmigen Teilchen aus, dann folgt

$$\boldsymbol{F}_p = -\int_{\partial \Delta V} p r^2 \boldsymbol{n} d\omega \approx -\int_{\partial \Delta V} \left(p\left(\boldsymbol{r}_0\right) + \boldsymbol{r} \cdot \nabla p\right) r^2 \boldsymbol{n} d\omega \tag{3.52}$$

mit $d\omega$ als Raumwinkelelement. Für die Ausführtung der Integration richtet man ∇p o. B. d. A. an der z-Achse aus, sodass gilt

$$\nabla p = |\nabla p| \boldsymbol{e}_z. \tag{3.53}$$

Daraus folgt mit $p_0 := p(\boldsymbol{r}_0)$

$$\begin{aligned}
\boldsymbol{F}_p &= -\int_{\partial \Delta V} \left(p_0 + \boldsymbol{r} \cdot \nabla p\right) r \boldsymbol{r} d\omega = -r \int_{\partial \Delta V} \left(\boldsymbol{r} \cdot \nabla p\right) \boldsymbol{r} d\omega = -r^2 |\nabla p| \int_{\partial \Delta V} \cos\left\{\nabla p, \boldsymbol{r}\right\} \boldsymbol{r} d\omega \\
&= -r^3 |\nabla p| \int_{\vartheta=0}^{\pi} \int_{\varphi=0}^{2\pi} \cos(\vartheta) \sin(\vartheta) \begin{pmatrix} \sin(\vartheta)\cos(\varphi) \\ \sin(\vartheta)\sin(\varphi) \\ \cos(\vartheta) \end{pmatrix} d\varphi d\vartheta \\
&= -r^3 \nabla p 2\pi \int_0^{\pi} \cos^2(\vartheta) \sin(\vartheta) d\vartheta = r^3 \nabla p 2\pi \left[\frac{1}{3}\cos^3(\vartheta)\right]_0^{\pi} = -\frac{4}{3}\pi r^3 \nabla p = -\Delta V \nabla p.
\end{aligned} \tag{3.54}$$

Diese Kraft bezeichnet man als *Druckgradientkraft*. Man erhält

$$\varrho \Delta V \frac{D}{Dt} \boldsymbol{v} = \varrho \Delta V \boldsymbol{g} - \Delta V \nabla p, \tag{3.55}$$

stellt man dies nach der Beschleunigung des Teilchens $\frac{D\boldsymbol{v}}{Dt}$ um, erhält man

$$\frac{D\boldsymbol{v}}{Dt} = -\frac{1}{\varrho} \nabla p + \boldsymbol{g}. \tag{3.56}$$

Diese Gleichung bezeichnet man als *Euler-Gleichung*.

Bei einer alternativen Herleitung betrachtet man eine makroskopische offene Menge $\Omega \subseteq \mathbb{R}^3$, der Impuls $\boldsymbol{p}$ in dieser Menge ergibt sich zu

$$\boldsymbol{p} = \int_{\Omega} \varrho \boldsymbol{v} d^3 r. \tag{3.57}$$

An dieser Stelle führt man den *Impulsflussdichtetensor* Π durch

$$\Pi_{i,j} := \varrho U_i U_j \tag{3.58}$$

für $1 \leq i, j \leq 3$ ein. Für $1 \leq i \leq 3$ ist

$$\Pi \cdot \boldsymbol{e}_i = \sum_{j=1}^{3} \varrho v_j v_i \boldsymbol{e}_j = v_i \varrho \boldsymbol{v} \tag{3.59}$$

der Fluss der Impulsdichte in $\boldsymbol{e}_i$–Richtung. Für einen allgemeinen Einheitsvektor $\boldsymbol{e}$ ist $\Pi \cdot \boldsymbol{e}$ der Fluss der Impuls-

dichte in $\boldsymbol{e}-$Richtung. Somit gilt mit den Feststellungen des Absch.s 3.2

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \boldsymbol{p}}{\partial t} &= \int_\Omega \frac{\partial\left(\varrho \boldsymbol{v}\right)}{\partial t} d^3r = \int_\Omega -\nabla p + \varrho \boldsymbol{g} d^3r - \int_{\partial\Omega} \Pi \cdot d\boldsymbol{n} \\
&\Rightarrow \int_\Omega \frac{\partial\left(\varrho \boldsymbol{v}\right)}{\partial t} d^3r = \int_\Omega -\nabla p + \varrho \boldsymbol{g} - \nabla \cdot \Pi d^3r \\
&\Rightarrow \int_\Omega \frac{\partial\left(\varrho \boldsymbol{v}\right)}{\partial t} + \nabla p + \nabla \cdot \Pi - \varrho \boldsymbol{g} d^3r = 0. \qquad (3.60)
\end{aligned}$$

Somit gilt bereits

$$\frac{\partial\left(\varrho \boldsymbol{v}\right)}{\partial t} + \nabla p + \nabla \cdot \Pi - \varrho \boldsymbol{g} = 0. \qquad (3.61)$$

Für die Divergenz von Π folgt

$$\begin{aligned}
(\nabla \cdot \Pi)_i &= \sum_{j=1}^{3} \frac{\partial}{\partial x_j}\left(\varrho v_i v_j\right) = \sum_{j=1}^{3} v_i v_j \frac{\partial \varrho}{\partial x_j} + \varrho v_j \frac{\partial v_i}{\partial x_j} + \varrho v_i \frac{\partial v_j}{\partial x_j} \\
&= v_i \boldsymbol{v} \cdot \nabla \varrho + \varrho\left(\boldsymbol{v} \cdot \nabla\right) v_i + \varrho v_i \nabla \cdot \boldsymbol{v}, \qquad (3.62)
\end{aligned}$$

also gilt

$$\nabla \cdot \Pi = \boldsymbol{v}\left(\boldsymbol{v} \cdot \nabla \varrho + \varrho \nabla \cdot \boldsymbol{v}\right) + \left(\varrho \boldsymbol{v} \cdot \nabla\right) \boldsymbol{v}. \qquad (3.63)$$

Somit folgt

$$\varrho \frac{\partial \boldsymbol{v}}{\partial t} + \boldsymbol{v} \frac{\partial \varrho}{\partial t} + \nabla p + \boldsymbol{v}\left(\boldsymbol{v} \cdot \nabla \varrho + \varrho \nabla \cdot \boldsymbol{v}\right) + \left(\varrho \boldsymbol{v} \cdot \nabla\right) \boldsymbol{v} - \varrho \boldsymbol{g} = 0. \qquad (3.64)$$

Mit der Kontinuitätsgleichung erhält man schlussendlich

$$\frac{\partial \boldsymbol{v}}{\partial t} + \left(\boldsymbol{v} \cdot \nabla\right) \boldsymbol{v} = -\frac{1}{\varrho} \nabla p + \boldsymbol{g}. \qquad (3.65)$$

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 $(\boldsymbol{e}_1, \boldsymbol{e}_2, \boldsymbol{e}_3)$ die Basis der ruhenden Koordinaten bezeichnet (vgl. Absch. D.1). Wenn man Beschleunigungen in diesem KS misst, kann man sie über das Zweite Newton'sche Axiom mit den wirkenden Kräften verknüpften. 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

$$\begin{aligned}
\boldsymbol{e}_x(t) &= \begin{pmatrix} \cos(\omega t) \\ \sin(\omega t) \\ 0 \end{pmatrix}, \qquad (3.66) \\
\boldsymbol{e}_y(t) &= \begin{pmatrix} -\sin(\omega t) \\ \cos(\omega t) \\ 0 \end{pmatrix}, \qquad (3.67) \\
\boldsymbol{e}_z(t) &= \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \qquad (3.68)
\end{aligned}$$

mit der Winkelgeschwindigkeit der Erdrotation $\boldsymbol{\omega} = (0, 0, \omega)^T$. Sei ein Teilchen mit dem Ortsvektor $\boldsymbol{r} = \boldsymbol{r}(t) = x(t)\boldsymbol{e}_x(t) + y(t)\boldsymbol{e}_y(t) + z(t)\boldsymbol{e}_z(t)$ gegeben. Dann gilt für die Geschwindigkeit

$$\boldsymbol{v} = \dot{\boldsymbol{r}} = \dot{x}\boldsymbol{e}_x + \dot{y}\boldsymbol{e}_y + \dot{z}\boldsymbol{e}_z + x\dot{\boldsymbol{e}}_x + y\dot{\boldsymbol{e}}_y + z\dot{\boldsymbol{e}}_z. \qquad (3.69)$$

Für die Zeitableitungen der Basisvektoren gilt

$$\dot{\boldsymbol{e}}_x = \omega \begin{pmatrix} -\sin(\omega t) \\ \cos(\omega t) \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \omega \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} \cos(\omega t) \\ \sin(\omega t) \\ 0 \end{pmatrix} = \boldsymbol{\omega} \times \boldsymbol{e}_x, \tag{3.70}$$

$$\dot{\boldsymbol{e}}_y = \omega \begin{pmatrix} -\cos(\omega t) \\ -\sin(\omega t) \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \omega \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} -\sin(\omega t) \\ \cos(\omega t) \\ 0 \end{pmatrix} = \boldsymbol{\omega} \times \boldsymbol{e}_y, \tag{3.71}$$

$$\dot{\boldsymbol{e}}_z = 0 = \boldsymbol{\omega} \times \boldsymbol{e}_z. \tag{3.72}$$

Damit schreibt sich der Geschwindigkeitsvektor als

$$\boldsymbol{v} = \boldsymbol{v}' + x\boldsymbol{\omega} \times \boldsymbol{e}_x + y\boldsymbol{\omega} \times \boldsymbol{e}_y + z\boldsymbol{\omega} \times \boldsymbol{e}_z = \boldsymbol{v}' + \boldsymbol{\omega} \times \boldsymbol{r}, \tag{3.73}$$

dabei wurde für die im gestrichenen System gemessene Geschwindigkeit verkürzend $\boldsymbol{v}' = \dot{x}\boldsymbol{e}_x + \dot{y}\boldsymbol{e}_y + \dot{z}\boldsymbol{e}_z$ geschrieben und die Linearität des Vektorprodukts Glg.en (A.154) - (A.155) ausgenutzt. Das Zweite Newton'sche Axiom ist eine Aussage über die Beschleunigung $\frac{D\boldsymbol{v}}{Dt}$, also leitet man die obige Gleichung noch einmal zeitlich ab:

$$\frac{D\boldsymbol{v}}{Dt} = \left(\frac{D\boldsymbol{v}'}{Dt}\right)' + \boldsymbol{\omega} \times \boldsymbol{v}' + \boldsymbol{\omega} \times (\boldsymbol{v}' + \boldsymbol{\omega} \times \boldsymbol{r}) = \left(\frac{D\boldsymbol{v}'}{Dt}\right)' + 2\boldsymbol{\omega} \times \boldsymbol{v}' + \boldsymbol{\omega} \times (\boldsymbol{\omega} \times \boldsymbol{r}), \tag{3.74}$$

dabei ist $\left(\frac{D\boldsymbol{v}'}{Dt}\right)'$ die im rotierenden System gemessene Beschleunigung. Man interessiert sich für die Beschleunigung in globalen Koordinaten, also für den Vektor $\left(\frac{D\boldsymbol{v}'}{Dt}\right)'$.

$$\boxed{\left(\frac{D\boldsymbol{v}'}{Dt}\right)' = \frac{D\boldsymbol{v}}{Dt} - 2\boldsymbol{\omega} \times \boldsymbol{v}' - \boldsymbol{\omega} \times (\boldsymbol{\omega} \times \boldsymbol{r})} \tag{3.75}$$

Der ortsabhängige Term $-\boldsymbol{\omega} \times (\boldsymbol{\omega} \times \boldsymbol{r})$ ist die Zentrifugalbeschleunigung, der geschwindigkeitsabhängige Term $-2\boldsymbol{\omega} \times \boldsymbol{v}'$ ist die Coriolis-Beschleunigung. Für die IS-Beschleunigung $\frac{D\boldsymbol{v}}{Dt}$ 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 Stress-Tensor

Als *stress* bezeichnet man alle Kräfte, die ein Fluid auf sich selber ausübt. O. B. d. A. stelle man sich einen Würfel vor, dessen Seiten parallel zu den Koordinatenflächen eines kartesichen Koordinatensystems seien. Der Stress wird duch den *Stress-Tensor*

$$\overleftrightarrow{T} = \begin{pmatrix} T_{x,x} & T_{x,y} & T_{x,z} \\ T_{y,x} & T_{y,y} & T_{y,z} \\ T_{z,x} & T_{z,y} & T_{z,z} \end{pmatrix} \tag{3.76}$$

beschrieben. Die Elemente dieses Tensors haben die Dimension eine Drucks (Kraft pro Fläche). Die $i-$te Zeile von $\overleftrightarrow{T}$ beschreibt Kräfte, die auf die Flächen des Würfels (anti)parallel zur $i-$Achse wirken. Die Eintrag in $j-$ten Spalte bezeichnet die in $j-$Richtung auf diese Fläche wirkende Kraft, falls die Normale der betrachteten Fläche parallel zur $i-$Achse ist, ansonsten sind die Vorzeichen vertauscht. Dies bewirkt, dass komprimierende Kräfte immer negativ sind.

Zunächst wird der Fall eines ruhenden Fluides betrachtet. In diesem Fall muss der Stress isotrop sein. Er entspricht dem Druck p, für den Stress-Tensor gilt in diesem Fall also

$$T_{i,j} = -p\delta_{i,j}. \tag{3.77}$$

Das Vorzeichen ergibt sich aus der Konvention, dass komprimierende Kräfte immer negativ sind. Man notiert nun die Zerlegung

$$\overleftrightarrow{T} = -p + \overleftrightarrow{\tau}. \tag{3.78}$$

Man stelle sich ein Fluidteilchen $\left[-\frac{\Delta}{2}, \frac{\Delta}{2}\right]^3$ mit $\Delta > 0$ vor. Die z-Komponente D_z des auf dieses Teilchen wirkenden

Drehmomentes $\boldsymbol{D}$ ist proportional zu

$$\begin{aligned} D_z &\propto T_{1,2} + \frac{\Delta}{2}\frac{\partial T_{1,2}}{\partial x} + T_{1,2} - \frac{\Delta}{2}\frac{\partial T_{1,2}}{\partial x} - \left(T_{2,1} + \frac{\Delta}{2}\frac{\partial T_{2,1}}{\partial y} + T_{2,1} - \frac{\Delta}{2}\frac{\partial T_{2,1}}{\partial y}\right) \\ &= 2T_{1,2} - 2T_{2,1}, \end{aligned} \tag{3.79}$$

wobei die Werte von $\overleftrightarrow{T}$ im Mittelpunkt des Koordinatensystems ausgewertet werden. Unter der Annahme eines verschwindenden Drehmomentes gilt

$$T_{1,2} = T_{2,1}. \tag{3.80}$$

Diese Annahme ist vergleichbar mit dem Konzept der quasistatischen Zunstandsänderung in der statistischen Physik. Durch Änderung der Ausrichtung des Koordinatensystems gilt dies auch für alle anderen nichtdiagonalen Indizes, $\overleftrightarrow{T}$ ist also symmetrisch. Somit muss auch der Tensor $\overleftrightarrow{\tau}$ symmetrisch sein.

Die Größe $\frac{\partial v_i}{\partial x_j}$ bezeichnet man als *Geschwindigkeitsgradiententensor*. Für diesen kann man notieren

$$\frac{\partial v_i}{\partial x_j} = S_{i,j} + \frac{1}{2}R_{i,j} \tag{3.81}$$

mit

$$S_{i,j} := \frac{1}{2}\left(\frac{\partial v_i}{\partial x_j} + \frac{\partial v_j}{\partial x_i}\right), \tag{3.82}$$

$$R_{i,j} := \frac{\partial v_i}{\partial x_j} - \frac{\partial v_j}{\partial x_i}. \tag{3.83}$$

$S_{i,j}$ bezeichnet man als *Spannungstensor*, dieser ist symmetrisch, und $R_{i,j}$ als *Rotationstensor*, dieser ist antisymmetrisch. Die Elemente des Rotationstensors entsprechen der Rotation von Fluidteilchen, aber keiner Verformung oder Beschleunigung. Nur die Elemente des Spannungstensors sind also relevant für den Stress. Daher kann man notieren

$$\tau_{i,j} = \sum_{n,m} K_{i,j,m,n} S_{m,n} \tag{3.84}$$

mit einem komplexen Tensor vierter Stufe $\overleftrightarrow{K}$, dessen Elemente beschreiben wie das Fluid auf Verformungen reagiert. Die Summen laufen von eins bis drei. Durch diese Formulierung kann man paarweise alle Elemente von $\overleftrightarrow{\tau}$ mit allen Elementen von $\overleftrightarrow{S}$ linear verknüpfen.

Geht man von einem Medium aus, dessen Materialeigenschaften richtungsunabhängig sind, was für ideale Gase der Fall ist, muss $\overleftrightarrow{K}$ von der Orientierung des Koordinantensystems unabhängig sein. Dies impliziert, dass $\overleftrightarrow{K}$ isotrop ist. Ein isotroper Tensor vierter Stufe hat die Form

$$K_{i,j,m,n} = \lambda\delta_{i,j}\delta_{m,n} + \mu\delta_{i,m}\delta_{j,n} + \gamma\delta_{i,n}\delta_{j,m}, \tag{3.85}$$

wobei $\lambda, \mu, \gamma \in \mathbb{C}$ skalare sind. Da sowohl $\overleftrightarrow{\tau}$ als auch $\overleftrightarrow{S}$ symmetrisch sind, ändern sie sich bei Vertauschung von i und j nicht. Gleiches muss also auch für $\overleftrightarrow{K}$ gelten. Dies impliziert

$$\gamma = \mu. \tag{3.86}$$

Dies führt auf

$$K_{i,j,m,n} = \lambda\delta_{i,j}\delta_{m,n} + 2\mu\delta_{i,m}\delta_{j,n}. \tag{3.87}$$

μ bezeichnet man als *dynamische Viskosität*. Setzt man dies in Glg. (3.84) ein, erhält man

$$\tau_{i,j} = \sum_{n,m}\left(\lambda\delta_{i,j}\delta_{m,n} + 2\mu\delta_{i,m}\delta_{j,n}\right)S_{m,n} = \lambda\delta_{i,j}\sum_{m} S_{m,m} + 2\mu S_{i,j}. \tag{3.88}$$

Aus Glg. (3.82) folgt

$$\sum_m S_{m,m} = \nabla \cdot \boldsymbol{v}. \tag{3.89}$$

Somit gilt

$$T_{i,j} = -p\delta_{i,j} + \lambda\delta_{i,j}\nabla \cdot \boldsymbol{v} + 2\mu S_{i,j} \tag{3.90}$$

Für $i = j$ erhält man hieraus

$$T_{i,i} = -p + \lambda\nabla \cdot \boldsymbol{v} + 2\mu S_{i,i}. \tag{3.91}$$

Summiert man dies über $i = 1, 3$, folgt

$$\begin{aligned} \sum_i T_{i,i} &= -3p + \left(2\mu + 3\lambda\right)\nabla \cdot \boldsymbol{v} \\ \Rightarrow p &= -\frac{1}{3}T_{i,i} + \sum_i T_{i,i} + \left(\frac{2}{3}\mu + \lambda\right)\nabla \cdot \boldsymbol{v}. \end{aligned} \tag{3.92}$$

Hieraus lässt sich in Abgrenzung zum thermodynamischen Druck ein *mittlerer Druck*

$$\overline{p} := -\frac{1}{3}T_{i,i} \tag{3.93}$$

ableiten. Für diesen gilt

$$p - \overline{p} = \sum_i T_{i,i} + \left(\frac{2}{3}\mu + \lambda\right)\nabla \cdot \boldsymbol{v}. \tag{3.94}$$

Man definiert nun die *Bulk-Viskosität* μ_v durch

$$\mu_v := \frac{2}{3}\mu + \lambda \tag{3.95}$$

$$\Rightarrow p - \overline{p} = \sum_i T_{i,i} + \mu_v\nabla \cdot \boldsymbol{v}. \tag{3.96}$$

Die *Stokes-Annahme*

$$\mu_v = 0 \tag{3.97}$$

ist oft gerechtfertigt, wird jedoch im weiteren nicht gemacht. Für die Materialkonstante λ erhält man in Termen der Bulk-Viskosität

$$\lambda = \mu_v - \frac{2}{3}\mu. \tag{3.98}$$

Setzt man dies in Glg. (3.90) ein, erhält man

$$T_{i,j} = -p\delta_{i,j} + \left(\mu_v - \frac{2}{3}\mu\right)\delta_{i,j}\nabla \cdot \boldsymbol{v} + 2\mu S_{i,j}. \tag{3.99}$$

Eine weitere Schreibweise lautet

$$\boxed{T_{i,j} = -p\delta_{i,j} + \tau_{i,j} = -p\delta_{i,j} + 2\mu\left(S_{i,j} - \frac{1}{3}\nabla \cdot \boldsymbol{v}\delta_{i,j}\right) + \mu_v\nabla \cdot \boldsymbol{v}\delta_{i,j}.} \tag{3.100}$$

Die Annahme, dass $\overleftrightarrow{T}$ linear von $\overleftrightarrow{S}$ abhängt, ist eine Approximation, die für die meisten Fluide stimmt. Solche Fluide bezeichnet man als *Newton'sche Fluide*. In der Meteorologie ist es nicht notwendig, hierüber hinauszugehen.

In kartesischen Koordinaten mit $\boldsymbol{v} = (u, v, w)^T$ wird Glg. (3.100) zu

$$\overleftrightarrow{T} = \begin{pmatrix} -p + 2\mu\frac{\partial u}{\partial x} + \left(\mu_v - \frac{2}{3}\mu\right)\nabla\cdot\boldsymbol{v} & \mu\left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x}\right) & \mu\left(\frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial x}{\partial x}\right) \\ \mu\left(\frac{\partial v}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial y}\right) & -p + 2\mu\frac{\partial v}{\partial y} + \left(\mu_v - \frac{2}{3}\mu\right)\nabla\cdot\boldsymbol{v} & \mu\left(\frac{\partial v}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial y}\right) \\ \mu\left(\frac{\partial w}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial z}\right) & \mu\left(\frac{\partial w}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial z}\right) & -p + 2\mu\frac{\partial w}{\partial z} + \left(\mu_v - \frac{2}{3}\mu\right)\nabla\cdot\boldsymbol{v} \end{pmatrix}. \tag{3.101}$$

Für die Reibung werden häufig andere als der mit Glg. (3.104) erhaltene Ausdruck verwendet. Daher wird in den Herleitungen von nun an meist ein allgemeiner Ausdruck

$$\boldsymbol{F}_R = \begin{pmatrix} F_{R,x} \\ F_{R,y} \\ F_{R,z} \end{pmatrix} \equiv \begin{pmatrix} \boldsymbol{F}_R^{(H)} \\ F_{R,z} \end{pmatrix} \tag{3.102}$$

für die Reibungsbeschleunigung mitgeführt. Dies ist trotz der relativen Kleinheit der Reibung in der Atmosphäre aufgrund der ihrer Bedeutung für die Energiekaskade sinnvoll.

3.4.2.1 Inkompressibler Grenzfall

Im Falle von Inkompressibilität gilt wegen $S_{m,m} = \nabla\cdot\boldsymbol{v} = 0$ die Gleichung

$$T_{i,j} = p\delta_{i,j} - 2\mu S_{i,j}. \tag{3.103}$$

Hiieraus folgt

$$\begin{aligned} -\frac{1}{\rho}\nabla\cdot\overleftrightarrow{T} &= -\frac{1}{\rho}\nabla p + \frac{2\mu}{\rho}\sum_{i,j=1}^{3}\boldsymbol{e}_i\frac{\partial S_{i,j}}{\partial x_j} = -\frac{1}{\rho}\nabla p + \frac{\mu}{\rho}\sum_{i,j=1}^{3}\boldsymbol{e}_i\frac{\partial\left(\frac{\partial v_i}{\partial x_j} + \frac{\partial v_j}{\partial x_i}\right)}{\partial x_j} = -\frac{1}{\rho}\nabla p + r\sum_{i,j=1}^{3}\boldsymbol{e}_i\left(\frac{\partial^2 v_i}{\partial x_j^2} + \frac{\partial}{\partial x_i}\frac{\partial v_j}{\partial x_j}\right) \\ &= -\frac{1}{\rho}\nabla p + r\Delta\boldsymbol{v} + r\sum_{i=1}^{3}\boldsymbol{e}_i\frac{\partial}{\partial x_i}\nabla\cdot\boldsymbol{v} = r\Delta\boldsymbol{v}, \end{aligned} \tag{3.104}$$

wobei die *kinematische Viskosität*

$$r := \frac{\mu}{\rho} \tag{3.105}$$

eingeführt wurde.

Üblicherweise stellt man sich die Reibung als eine bremsende Kraft vor. Dies ist in Fluiden nicht immer der Fall. Um dies einzusehen, wird von dem eindimensionalen Strömungsfeld

$$u = 2 + \sin(x) > 0 \tag{3.106}$$

ausgegangen, wobei Einheiten für den Moment ignoriert werden. Ist das Medium inkompressibel, lautet die Reibungsbeschleunigung a_R bis auf eine Konstante

$$a_R = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = -\sin(x). \tag{3.107}$$

Somit kann die durch die Reibung geleistete Arbeit

$$ua_R = -u\sin(x) \tag{3.108}$$

beide Vorzeichen haben. Es ist in Fluiden also möglich, dass die Reibung kinetische Energie produziert.

Eine Skalenanalyse der Reibungsbeschleunigung für die synoptische Skala ergibt $10^{-5}10^{-11} = 10^{-16}$ m/s², die typische Beschleunigung ist 10^{-4} m/s², 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*.

3.4.3 Addition der Kräfte

Setzt man Glg. (3.75) und Glg. (3.104) in Glg. (3.56) ein, so ergibt sich

$$\boxed{\frac{D\boldsymbol{v}}{Dt} = -\frac{1}{\rho}\nabla p + \boldsymbol{v}\times\boldsymbol{f} + \boldsymbol{g} + \boldsymbol{F}_R. \qquad (3.109)}$$

$\boldsymbol{f} := 2\boldsymbol{\omega}$ ist der *Coriolis-Vektor*. Mit einer Umbenennung wurde außerdem mit $\frac{D\boldsymbol{v}}{Dt}$ die Beschleunigung $\left(\frac{D\boldsymbol{v}'}{Dt}\right)'$ bezeichnet, s. Glg. (3.75). $\boldsymbol{v}$ ist die im rotierenden System gemessene Geschwindigkeit. Der Term der Zentrifugalbeschleunigung wurde in $\boldsymbol{g}$ absorbiert.

Man kann die Beschleunigung $\frac{D\boldsymbol{v}}{Dt}$ noch aufteilen in eine lokalzeitliche Ableitung $\frac{\partial\boldsymbol{v}}{\partial t}$ und einen advektiven Anteil:

$$\frac{D\boldsymbol{v}}{Dt} = \frac{\partial\boldsymbol{v}}{\partial t} + (\boldsymbol{v}\cdot\nabla)\,\boldsymbol{v} \qquad (3.110)$$

Für den advektiven Anteil gilt mit Glg. (B.61)

$$(\boldsymbol{v}\cdot\nabla)\,\boldsymbol{v} = \frac{1}{2}\nabla(\boldsymbol{v}\cdot\boldsymbol{v}) - \boldsymbol{v}\times(\nabla\times\boldsymbol{v}). \qquad (3.111)$$

Definiert man die *spezifische kinetische Energie* k durch

$$k := \frac{1}{2}\boldsymbol{v}^2, \qquad (3.112)$$

folgt

$$\boxed{\frac{\partial\boldsymbol{v}}{\partial t} = -\frac{1}{\rho}\nabla p + \boldsymbol{v}\times(\boldsymbol{f}+\nabla\times\boldsymbol{v}) - \nabla k + \boldsymbol{g} + r\Delta\boldsymbol{v}. \qquad (3.113)}$$

Nun wird Gleichung (3.109) komponentenweise bezüglich der ortsabhängigen Orthonormalbasis der Kugelkoordinaten notiert. Für den Vektor $\boldsymbol{f}$ gilt

$$\boldsymbol{f} = |\boldsymbol{f}|\begin{pmatrix} 0 \\ \cos(\varphi) \\ \sin(\varphi)\end{pmatrix} =: \begin{pmatrix} 0 \\ f' \\ f\end{pmatrix}. \qquad (3.114)$$

$f := \boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{f}$ bezeichnet man als den *Coriolis-Parameter*. Damit folgt

$$\boldsymbol{v}\times\boldsymbol{f} = \begin{pmatrix} fv - f'w \\ -fu \\ f'u\end{pmatrix}. \qquad (3.115)$$

Setzt man dies in die Bewegungsgleichung ein, folgt

$$\boxed{\begin{aligned}
\frac{\partial u}{\partial t} + u\frac{\partial u}{\partial x} + v\frac{\partial u}{\partial y} + w\frac{\partial u}{\partial z} - \frac{uv\tan(\varphi)}{a+z} + \frac{uw}{a+z} &= -\frac{1}{\rho}\frac{\partial p}{\partial x} - f'w + fv + F_{R,x}, && (3.116)\\
\frac{\partial v}{\partial t} + u\frac{\partial v}{\partial x} + v\frac{\partial v}{\partial y} + w\frac{\partial v}{\partial z} + \frac{u^2\tan(\varphi)}{a+z} + \frac{vw}{a+z} &= -\frac{1}{\rho}\frac{\partial p}{\partial y} - fu + F_{R,y}, && (3.117)\\
\frac{\partial w}{\partial t} + u\frac{\partial w}{\partial x} + v\frac{\partial w}{\partial y} + w\frac{\partial w}{\partial z} - \frac{u^2+v^2}{a+z} &= -\frac{1}{\rho}\frac{\partial p}{\partial z} - g + f'u + F_{R,z}. && (3.118)
\end{aligned}}$$

3.4.4 Randbedingungen

Will man ein hydrodynamisches Gleichungssystem auf ein System Ω anwenden, benötigt man Randbedingungen. Ω sei durch kondensierte Materie begrenzt. Sei $\boldsymbol{n}$ ein Normalenvektor auf $\partial\Omega$, dann gilt als Randbedingung für

das Windfeld $\boldsymbol{v}$

$$\boldsymbol{v} \cdot \boldsymbol{n} = 0, \tag{3.119}$$

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

$$\boldsymbol{v}(\partial\Omega) = 0, \tag{3.120}$$

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

$$\lim_{r \uparrow A} p = \lim_{r \downarrow A} p, \tag{3.121}$$

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. (3.121) bezeichnet man als *dynamische Randbedingung*.

3.4.5 Näherungen

3.4.5.1 Advektive Anteile

Die Nichtlinearität der hergeleiteten Impulsgleichung steckt zu einem großen Anteil in der Advektion $(\boldsymbol{v} \cdot \nabla)\,\boldsymbol{v}$. Diese Terme tragen also entscheidend zur Interaktion verschiedener atmosphärischer Phänomene und zur Entstehung von Instabilitäten bei. Hingegen ist die Reibung ein stabilisiernder Einfluss. Man definiert daher die sogenannte *Reynolds-Zahl* N_{Re} als das Verhältnis dieser beiden Terme:

$$N_{\mathrm{Re}} := \frac{U^2}{L}\frac{L^2}{rU} = \frac{UL}{r} \tag{3.122}$$

Desto größer die Reynolds-Zahl ist, desto instabiler und turbulenter ist die Strömung. Auf der synoptischen Skala gilt

$$N_{\mathrm{Re}} \sim \frac{10^1 10^6}{10^{-5}} = 10^{12}. \tag{3.123}$$

Synotische Strömungen sind also sehr instabil.

3.4.5.2 Shallow atmosphere

Die sogenannte *shallow-atmosphere*-Approximation beruht auf der Ersetzung

$$\sqrt{g} = r^2 \cos(\varphi) \to a^2 \cos(\varphi) \tag{3.124}$$

für die Funktionaldeterminante der *geographischen Koordinaten*, hierbei ist a ein konstanter Wert für den Radius. Die metrischen Terme in den Glg.en (3.116) - (3.118) lassen sich in zwei Gruppen:

- Solche, die $\tan(\varphi)$ enthalten. Sie entstehen durch die Abhängigkeit von $\sqrt{g}$ von φ.
- Solche, die $\tan(\varphi)$ nicht enthalten. Sie entstehen durch die Abhängigkeit von $\sqrt{g}$ von r.

Die zweite Gruppe fällt unter der shallow-water-Approximation weg. Führt man die gleiche Näherung in der Herleitung von Glg. (B.125) ein, erhält man

$$\nabla \times \boldsymbol{v} = \boldsymbol{k}\left(-\frac{\partial v_x}{\partial y} + \frac{\partial v_y}{\partial x}\right) - \boldsymbol{j}\left(\frac{\partial v_z}{\partial x} - \frac{\partial v_x}{\partial z}\right) + \boldsymbol{i}\left(-\frac{\partial v_y}{\partial z} + \frac{\partial v_z}{\partial y}\right) + \frac{v_x \tan(\varphi)}{a}\boldsymbol{k}. \tag{3.125}$$

Abbildung 3.1: Die Zusatzkomponente von $f^\star$ als Funktion der Breite. Der Wert bei $\varphi = \pm 85^\circ$ ist zusätzlich eingetragen. Es wurde von einer Windgeschwindigkeit von $u = 10$ m/s ausgegangen.

In der shallow atmosphere gilt für die aus der Erdrotation folgende Geschwindigkeit

$$\boldsymbol{v}_i = \boldsymbol{\Omega} \times \boldsymbol{r} = \Omega a \cos\left(\varphi\right) \boldsymbol{i}. \tag{3.126}$$

Mit Glg. (3.125) erhält man

$$\begin{aligned} \nabla \times \boldsymbol{v}_i &= \left(-\frac{\partial\left(\Omega a \cos\left(\varphi\right)\right)}{\partial y} + \Omega a \cos\left(\varphi\right) \frac{\tan\left(\varphi\right)}{a} \right) \boldsymbol{k} \\ &= \left(-\frac{\partial\left(\Omega \cos\left(\varphi\right)\right)}{\partial \varphi} + \Omega \sin\left(\varphi\right) \right) \boldsymbol{k} = 2\Omega \sin\left(\varphi\right) \boldsymbol{k} \end{aligned} \tag{3.127}$$

Daher muss man mit der shallow-atmosphere-Approximation auch die sogenannte *traditionelle Approximation*

$$f' = 0. \tag{3.128}$$

einführen. Das Gleichungssystem der shallow atmosphere lautet also

$$\frac{\partial u}{\partial t} + u\frac{\partial u}{\partial x} + v\frac{\partial u}{\partial y} - \frac{uv\tan\left(\varphi\right)}{a+z} = -\frac{1}{\varrho}\frac{\partial p}{\partial x} + fv + F_{R,x}, \tag{3.129}$$

$$\frac{\partial v}{\partial t} + u\frac{\partial v}{\partial x} + v\frac{\partial v}{\partial y} + \frac{u^2\tan\left(\varphi\right)}{a+z} = -\frac{1}{\varrho}\frac{\partial p}{\partial y} - fu + F_{R,y}, \tag{3.130}$$

$$\frac{\partial w}{\partial t} + u\frac{\partial w}{\partial x} + v\frac{\partial w}{\partial y} + w\frac{\partial w}{\partial z} = -\frac{1}{\varrho}\frac{\partial p}{\partial z} - g + F_{R,z}. \tag{3.131}$$

3.4.5.3 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 $f^\star$ durch

$$f^\star := f\left(1 + \frac{u}{2a\omega\cos\left(\varphi\right)}\right). \tag{3.132}$$

f^* ist dabei, anders als f, auch vom Geschwindigkeitsfeld abhängig und beschreibt nicht mehr nur die Coriolis-Kraft. Damit lassen sich die Glg.en (3.129) - (3.130) kürzer notieren als

$$\frac{\partial u}{\partial t} + u\frac{\partial u}{\partial x} + v\frac{\partial u}{\partial y} + w\frac{\partial u}{\partial z} = -\frac{1}{\varrho}\frac{\partial p}{\partial x} + f^* v + F_{R,x}, \tag{3.133}$$

$$\frac{\partial v}{\partial t} + u\frac{\partial v}{\partial x} + v\frac{\partial v}{\partial y} + w\frac{\partial v}{\partial z} = -\frac{1}{\varrho}\frac{\partial p}{\partial y} - f^* u + F_{R,y}. \tag{3.134}$$

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:

$$\frac{\partial u}{\partial t} + u\frac{\partial u}{\partial x} + v\frac{\partial u}{\partial y} + w\frac{\partial u}{\partial z} = -\frac{1}{\varrho}\frac{\partial p}{\partial x} + fv + F_{R,x} \tag{3.135}$$

$$\frac{\partial v}{\partial t} + u\frac{\partial v}{\partial x} + v\frac{\partial v}{\partial y} + w\frac{\partial v}{\partial z} = -\frac{1}{\varrho}\frac{\partial p}{\partial y} - fu + F_{R,y} \tag{3.136}$$

Anschaulich bedeutet die Vernachlässigbarkeit der Krümmungsterme, 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 Krümmungsterme, dies ist allerdings keine Eigenschaft der Erde, sondern des verwendeten Koordinatensystems. Da man dieses beliebig ausrichten kann, kann man für alle regionalen Betrachtungen die Krümmungsterme vernachlässigen. In einem globalen Modell jedoch nicht.

3.4.5.4 Flachwassergleichungen

Das einfachste Gleichungssystem der Geofluiddynamik mit Zeitableitungen ist das der *Flachwassergleichungen* (SWEs, engl. *shallow water equations*). Um dieses herzuleiten, geht man von den Glg.en (3.135) - (3.136) aus und nimmt eine homogene Dichte an, außerdem ignoriert man die Reibung. Damit wird die Kontinuitätsgleichung zu

$$\nabla \cdot \boldsymbol{v} = 0. \tag{3.137}$$

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

$$p(z) = -(0 - p(z)) = -(p(b+h) - p(z)) = -\int_z^{b+h} \frac{\partial p}{\partial z} dz = g\varrho \int_z^{b+h} dz = (b + h - z)\, g\varrho. \tag{3.138}$$

Somit folgt

$$\frac{\partial p}{\partial x} = g\varrho \frac{\partial}{\partial x}(b + h) \tag{3.139}$$

und analog in y-Richtung. Verschwindet die vertikale Scherung der Horizontalbewegung $\left(\frac{\partial u}{\partial z}, \frac{\partial v}{\partial z}\right)^T$ 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:

$$h\nabla \cdot \boldsymbol{v} = \int_b^{b+h} \nabla \cdot \boldsymbol{v} dz = -\int_b^{b+h} \frac{\partial w}{\partial z} dz = -w(b + h) + w(b) \tag{3.140}$$

Die Annahme, dass die Horizontalgeschwindigkeit nicht geschert ist und die die Integration Glg. (3.140) 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

$$\text{Wellenlänge} \gg \text{Tiefe}, \tag{3.141}$$

$$\text{Wellenhöhe} \ll \text{Tiefe} \tag{3.142}$$

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:

$$w(b) = \frac{dz}{dt}(b) = \frac{db}{dt} = \boldsymbol{v} \cdot \nabla_h b \tag{3.143}$$

An der Oberfläche gilt

$$w(b+h) = \frac{D}{Dt}(b+h) = \frac{\partial h}{\partial t} + \boldsymbol{v}_h \cdot \nabla_h (b+h). \tag{3.144}$$

Setzt man dies in Glg. (3.140) ein, erhält man

$$h \nabla_h \cdot \boldsymbol{v} = -\frac{\partial h}{\partial t} - \boldsymbol{v} \cdot \nabla_h h. \tag{3.145}$$

Somit erhält man folgendes Gleichungssystem:

$$\boxed{\begin{aligned} \frac{\partial \boldsymbol{v}}{\partial t} + (\boldsymbol{v} \cdot \nabla)\boldsymbol{v} &= -g \nabla_h (h+b) - f(y)\, \boldsymbol{k} \times \boldsymbol{v} && (3.146) \\ \frac{\partial h}{\partial t} + \nabla_h \cdot (h\boldsymbol{v}) &= 0 && (3.147) \end{aligned}}$$

3.4.5.4.1 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

$$\frac{\partial \boldsymbol{v}}{\partial t} = -g \nabla d - f \boldsymbol{k} \times \boldsymbol{v}, \tag{3.148}$$

$$\frac{\partial d}{\partial t} + D \nabla \cdot \boldsymbol{v} = 0. \tag{3.149}$$

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

$$\psi(\varphi, \lambda, z(\varphi, \lambda, \mu)) = \tilde{\psi}(\varphi, \lambda, \mu), \tag{3.150}$$

so folgt für die Gradienten in diesen Koordinaten

$$\nabla \psi = \begin{pmatrix} \frac{\partial \psi}{\partial \varphi} \\ \frac{\partial \psi}{\partial \lambda} \\ \frac{\partial \psi}{\partial z} \end{pmatrix}, \tag{3.151}$$

$$\nabla \tilde{\psi} = \begin{pmatrix} \frac{\partial \tilde{\psi}}{\partial \varphi} \\ \frac{\partial \tilde{\psi}}{\partial \lambda} \\ \frac{\partial \tilde{\psi}}{\partial \mu} \end{pmatrix}. \tag{3.152}$$

Es gilt

$$\frac{\partial \tilde{\psi}}{\partial \lambda} = \frac{d}{d\lambda} \psi(\varphi, \lambda, z(\varphi, \lambda, \mu)) = \nabla \psi \cdot \begin{pmatrix} \frac{d\varphi}{d\lambda} \\ \frac{d\lambda}{d\lambda} \\ \frac{dz}{d\lambda} \end{pmatrix} = \nabla \psi \cdot \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ \frac{\partial z}{\partial \lambda} \end{pmatrix} = \frac{\partial \psi}{\partial \lambda} + \frac{\partial z}{\partial \lambda} \frac{\partial \psi}{\partial z}. \tag{3.153}$$

Die Ableitungen nach λ sind proportional zu den Ableitungen nach x. Damit folgt

$$\frac{\partial \tilde{\psi}}{\partial x} = \frac{\partial \psi}{\partial x} + \frac{\partial z}{\partial x}\frac{\partial \psi}{\partial z}. \tag{3.154}$$

Unterschlägt man in der Notation den Unterschied von ψ und $\tilde{\psi}$ und kennzeichnet anstattdessen konstantgehaltene Größen durch Indizes, so erhält man

$$\left(\frac{\partial \psi}{\partial x}\right)_\mu = \left(\frac{\partial \psi}{\partial x}\right)_z + \left(\frac{\partial z}{\partial x}\right)_\mu \frac{\partial \psi}{\partial z}. \tag{3.155}$$

z und μ sind in der Herleitung vertauschbar, daher gilt genauso

$$\left(\frac{\partial \psi}{\partial x}\right)_z = \left(\frac{\partial \psi}{\partial x}\right)_\mu + \left(\frac{\partial \mu}{\partial x}\right)_z \frac{\partial \psi}{\partial \mu}. \tag{3.156}$$

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. (3.155) um:

$$\boxed{\begin{aligned} \frac{\partial \psi}{\partial z} &= \frac{\partial \mu}{\partial z}\frac{\partial \psi}{\partial \mu} && (3.157)\\ \left(\frac{\partial \psi}{\partial x}\right)_z &= \left(\frac{\partial \psi}{\partial x}\right)_\mu - \left(\frac{\partial z}{\partial x}\right)_\mu \frac{\partial \mu}{\partial z}\frac{\partial \psi}{\partial \mu} && (3.158)\end{aligned}}$$

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. (B.12)) 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

$$\frac{D\psi}{Dt} = \frac{\partial \psi}{\partial t} + u\frac{\partial \psi}{\partial x} + v\frac{\partial \psi}{\partial y} + \omega\frac{\partial \psi}{\partial p}. \tag{3.159}$$

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

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \boldsymbol{v}) = 0. \tag{3.160}$$

Setzt man die hydrostatische Grundgleichung $\rho = -\frac{1}{g}\frac{\partial p}{\partial z}$ ein, so folgt

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 p}{\partial z \partial t} + \nabla \cdot \left(\frac{\partial p}{\partial z}\boldsymbol{v}\right) &= 0 \\ \Leftrightarrow \frac{\partial^2 p}{\partial z \partial t} + \boldsymbol{v} \cdot \nabla\left(\frac{\partial p}{\partial z}\right) + \frac{\partial p}{\partial z}\nabla \cdot \boldsymbol{v} &= \frac{\partial^2 p}{\partial z \partial t} + \frac{\partial}{\partial z}(\boldsymbol{v} \cdot \nabla p) - \nabla p \cdot \frac{\partial \boldsymbol{v}}{\partial z} + \frac{\partial p}{\partial z}\nabla \cdot \boldsymbol{v} \\ = \frac{\partial \omega}{\partial z} - \nabla_h p \cdot \frac{\partial \boldsymbol{v}_h}{\partial z} + \frac{\partial p}{\partial z}\nabla \cdot \boldsymbol{v}_h &= 0. \end{aligned} \tag{3.161}$$

Hierbei wurde ein kleiner Transformationsterm vernachlässigt, s. Glg. (B.123). Nach der Kettenregel ist $\frac{\partial}{\partial z} = \frac{\partial p}{\partial z}\frac{\partial}{\partial p}$. Damit folgt

$$\frac{\partial \omega}{\partial p} + \nabla \cdot \boldsymbol{v}_h - \nabla_h p \cdot \frac{\partial \boldsymbol{v}_h}{\partial p} = 0. \tag{3.162}$$

Verwendet man Glg. (3.156), erhält man

$$\left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)_z = \left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)_p + \frac{\partial u}{\partial p}\left(\frac{\partial p}{\partial x}\right)_z \Leftrightarrow \left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)_z - \frac{\partial u}{\partial p}\left(\frac{\partial p}{\partial x}\right)_z = \left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)_p \tag{3.163}$$

und analog für v. Nicht näher bezeichnete partielle Ableitungen sind bisher Ableitungen im z-System. Nun werden Ableitungen im p-System verwendet:

$$\frac{\partial \omega}{\partial p} + \nabla \cdot \boldsymbol{v}_h = 0. \tag{3.164}$$

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

- $\nabla \cdot \boldsymbol{v}_h \sim 10^{-5}$
- $\frac{\partial \omega}{\partial p} \sim 10^{-6}$.

Die Divergenz des Horizontalwindes ist also in Wirklichkeit eine Größenordnung kleiner als die synoptisch-skalige Vorticity.

Will man die Bewegungsgleichungen für Flachgeofluide Glg.en (3.135) - (3.136) transformieren, so müssen auf der linken Seite nur die totalen Ableitungen im p-System notiert werden. Der Druckgradient macht etwas mehr Arbeit. Mit Glg. (3.156) sowie der hydrostatischen Approximation folgt

$$\left(\frac{\partial p}{\partial x}\right)_p = 0 = \left(\frac{\partial p}{\partial x}\right)_z + \left(\frac{\partial z}{\partial x}\right)_p \frac{\partial p}{\partial z} = \left(\frac{\partial p}{\partial x}\right)_z - g\varrho\left(\frac{\partial z}{\partial x}\right)_p. \tag{3.165}$$

Es gilt also

$$\frac{1}{\varrho}\left(\frac{\partial p}{\partial x}\right)_z = g\left(\frac{\partial z}{\partial x}\right)_p = \left(\frac{\partial \varphi}{\partial x}\right)_p \tag{3.166}$$

und analog in y-Richtung. Damit werden die horizontalen Impulsgleichungen im p-System zu

$$\frac{\partial u}{\partial t} + u\frac{\partial u}{\partial x} + v\frac{\partial u}{\partial y} + \omega\frac{\partial u}{\partial p} = -\frac{\partial \varphi}{\partial x} + fv + F_{R,x}, \tag{3.167}$$

$$\frac{\partial v}{\partial t} + u\frac{\partial v}{\partial x} + v\frac{\partial v}{\partial y} + \omega\frac{\partial v}{\partial p} = -\frac{\partial \varphi}{\partial y} - fu + F_{R,y}. \tag{3.168}$$

3.5.2 $\theta-$System

In einer thermisch stabil geschichteten Atmosphäre kann θ als generalisierte Vertikalkoordinate verwendet werden. Außerdem wird hier von Hydrostatik ausgegangen. Dies bezeichnet man als $\theta-$*System* oder auch als *isentrope Koordinaten*. Notiert man die Glg.en (3.157) - (3.158) mit $\mu = \theta$, folgt

$$\frac{\partial \psi}{\partial z} = \frac{\partial \theta}{\partial z}\frac{\partial \psi}{\partial \theta}, \tag{3.169}$$

$$\left(\frac{\partial \psi}{\partial x}\right)_z = \left(\frac{\partial \psi}{\partial x}\right)_\theta - \left(\frac{\partial z}{\partial x}\right)_\theta \frac{\partial \theta}{\partial z}\frac{\partial \psi}{\partial \theta} = \left(\frac{\partial \psi}{\partial x}\right)_\theta + \varrho\left(\frac{\partial \varphi}{\partial x}\right)_\theta \frac{\partial \theta}{\partial p}\frac{\partial \psi}{\partial \theta}, \tag{3.170}$$

$$\left(\frac{\partial \psi}{\partial y}\right)_z = \left(\frac{\partial \psi}{\partial y}\right)_\theta - \left(\frac{\partial z}{\partial y}\right)_\theta \frac{\partial \theta}{\partial z}\frac{\partial \psi}{\partial \theta} = \left(\frac{\partial \psi}{\partial y}\right)_\theta + \varrho\left(\frac{\partial \varphi}{\partial y}\right)_\theta \frac{\partial \theta}{\partial p}\frac{\partial \psi}{\partial \theta}. \tag{3.171}$$

Im Fall $\psi = p$ folgt

$$\left(\frac{\partial p}{\partial x}\right)_z = \left(\frac{\partial p}{\partial x}\right)_\theta - \left(\frac{\partial z}{\partial x}\right)_\theta \frac{\partial \theta}{\partial z}\frac{\partial p}{\partial \theta} = \left(\frac{\partial p}{\partial x}\right)_\theta + \varrho \left(\frac{\partial \varphi}{\partial x}\right)_\theta . \tag{3.172}$$

Es gilt

$$\begin{aligned}
p &= \varrho R_d \theta \left(\frac{p}{p_0}\right)^{\frac{R_d}{c^{(p)}}} \\
\Rightarrow \left(\frac{\partial p}{\partial x}\right)_\theta &= R_d \theta \left(\frac{p}{p_0}\right)^{\frac{R_d}{c^{(p)}}} \left(\frac{\partial \varrho}{\partial x}\right)_\theta + \varrho R_d \theta \frac{1}{p_0^{\frac{R_d}{c^{(p)}}}} \frac{R_d}{c^{(p)}} p^{\frac{R_d}{c^{(p)}}-1} \left(\frac{\partial p}{\partial x}\right)_\theta \\
&= R_d T \left(\frac{\partial \varrho}{\partial x}\right)_\theta + \varrho R_d \theta \left(\frac{p}{p_0}\right)^{\frac{R_d}{c^{(p)}}} \frac{R_d}{c_p p} \left(\frac{\partial p}{\partial x}\right)_\theta \\
&= R_d T \left(\frac{\partial \varrho}{\partial x}\right)_\theta + \varrho R_d T \frac{R_d}{c^{(p)} \varrho R_d T} \left(\frac{\partial p}{\partial x}\right)_\theta \\
&= R_d T \left(\frac{\partial \varrho}{\partial x}\right)_\theta + \frac{R_d}{c^{(p)}} \left(\frac{\partial p}{\partial x}\right)_\theta \\
\Rightarrow \left(\frac{\partial p}{\partial x}\right)_\theta &= \frac{c^{(p)} R_d T}{c^{(v)}} \left(\frac{\partial \varrho}{\partial x}\right)_\theta = \frac{c^{(p)}}{c^{(v)}} T \left(\frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{p}{T}\right)\right)_\theta \\
&= \frac{c^{(p)}}{c^{(v)}} T \left(\frac{1}{T}\frac{\partial p}{\partial x} - \frac{p}{T^2}\frac{\partial T}{\partial x}\right) = \frac{c^{(p)}}{c^{(v)}} \left(\frac{\partial p}{\partial x}\right)_\theta - \frac{c^{(p)}}{c^{(v)}} \frac{p}{T} \left(\frac{\partial T}{\partial x}\right)_\theta \\
&= \frac{c^{(p)}}{c^{(v)}} \left(\frac{\partial p}{\partial x}\right)_\theta - \frac{c^{(p)}}{c^{(v)}} \varrho R_d \left(\frac{\partial T}{\partial x}\right)_\theta \\
\Rightarrow \frac{R_d}{c^{(v)}} \left(\frac{\partial p}{\partial x}\right)_\theta &= \frac{c^{(p)}}{c^{(v)}} \varrho R_d \left(\frac{\partial T}{\partial x}\right)_\theta \\
\Rightarrow \left(\frac{\partial p}{\partial x}\right)_\theta &= c^{(p)} \varrho \left(\frac{\partial T}{\partial x}\right)_\theta .
\end{aligned} \tag{3.173}$$

Somit erhält man

$$\frac{1}{\varrho}\left(\frac{\partial p}{\partial x}\right)_z = \frac{\partial}{\partial x}\left(c^{(p)} T + \varphi\right), \tag{3.174}$$

wobei auf der rechten Seite die partielle Ableitung im $\theta-$System durchgeführt wird. Man defininert

$$M := c^{(p)} T + \varphi \tag{3.175}$$

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

$$\sigma_z := \frac{z-h}{H-h} \Leftrightarrow z = h + \sigma_z (H-h), \tag{3.176}$$

daraus folgen

$$\frac{\partial \sigma_z}{\partial z} = \frac{1}{H-h}, \tag{3.177}$$

$$\left(\frac{\partial z}{\partial x}\right)_{\sigma_z} = (1-\sigma_z)\frac{\partial h}{\partial x}, \tag{3.178}$$

$$\left(\frac{\partial z}{\partial x}\right)_{\sigma_z}\frac{\partial \sigma_z}{\partial z} = \frac{1-\sigma_z}{H-h}\frac{\partial h}{\partial x}. \tag{3.179}$$

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

$$\sigma_p := \frac{p-p_T}{p_S-p_T} \Leftrightarrow p = p_T + \sigma_p\left(p_S-p_T\right), \tag{3.180}$$

daraus folgen

$$\frac{\partial \sigma_p}{\partial p} = \frac{1}{p_S-p_T}, \tag{3.181}$$

$$\left(\frac{\partial p}{\partial x}\right)_{\sigma_p} = \sigma_p\frac{\partial p_S}{\partial x}, \tag{3.182}$$

$$\left(\frac{\partial p}{\partial x}\right)_{\sigma_p}\frac{\partial \sigma_p}{\partial z} = \frac{\sigma_p}{p_S-p_T}\frac{\partial p_S}{\partial x}. \tag{3.183}$$

3.6 Erster Hauptsatz in der Atmosphäre

3.6.1 Ideales einatomiges Gas

In diesem Abschnitt soll es um die Thermodynamik einer Atmosphäre gehen, die aus einem idealen, einatomigen Gas mit der individuellen Gaskonstante R_s besteht.

3.6.1.1 Temperatur als prognostische Variable

Der Ausgangspunkt ist Glg. (2.741). Durch Differentiation nach der Zeit ergibt sich

$$\frac{dE}{dt} + p\frac{dV}{dt} = \frac{dQ_T}{dt} + \mu\frac{dN}{dt}. \tag{3.184}$$

Mit den Glg.en (2.812) und (2.817) folgt

$$\begin{aligned} c^{(v)}m\frac{dT}{dt} + c^{(v)}T\frac{dm}{dt} + p\frac{dV}{dt} &= \frac{dQ_T}{dt} + T\left(\frac{C^{(v)}}{N} - \frac{S}{N} + k_B\right)\frac{dN}{dt} \\ &= \frac{dQ_T}{dt} + T\left(\frac{C^{(v)}}{N} - \frac{S}{N} + \frac{pV}{NT}\right)\frac{dN}{dt}. \end{aligned} \tag{3.185}$$

Division durch die Masse m des betrachteten Teilchens liefert mit

$$\frac{1}{m}p\frac{dV}{dt} = p\frac{d}{dt}\left(\frac{V}{m}\right) + \frac{pV}{m^2}\frac{dm}{dt} = -\frac{p}{\rho^2}\frac{d\rho}{dt} + \frac{p}{m\rho}\frac{dm}{dt} \tag{3.186}$$

die Gleichung

$$\begin{aligned} c^{(v)}\frac{dT}{dt} - \frac{p}{\varrho^2}\frac{d\varrho}{dt} &= \frac{dq_T}{dt} - \frac{p}{m\varrho}\frac{dm}{dt} + T\left(c^{(v)} - c^{(v)} - s + \frac{p}{\varrho T}\right)\frac{1}{N}\frac{dN}{dt} \\ &= \frac{dq_T}{dt} - \frac{p}{m\varrho}\frac{dm}{dt} + T\left(R_s - s\right)\frac{1}{N}\frac{dN}{dt} \\ &= \frac{dq_T}{dt} - \frac{p}{m\varrho}\frac{dm}{dt} + R_s T\frac{1}{N}\frac{dN}{dt} - Ts\frac{1}{N}\frac{dN}{dt}, \end{aligned} \tag{3.187}$$

wobei $s := \frac{S}{m}$ für die spezifische Entropie steht und $q_T := \frac{Q_T}{m}$ für die spezifische Wärme. Durch Erweiterung mit der Teilchenmasse erhält man

$$c^{(v)}\frac{dT}{dt} - \frac{p}{\varrho^2}\frac{d\varrho}{dt} = \frac{dq_T}{dt} - \frac{p}{m\varrho}\frac{dm}{dt} + R_s T\frac{1}{m}\frac{dm}{dt} - sT\frac{1}{m}\frac{dm}{dt}, \tag{3.188}$$

Aufgrund der Zustandsgleichung idealer Gase gilt

$$-\frac{p}{\varrho}\frac{1}{m}\frac{dm}{dt} + R_s T\frac{1}{m}\frac{dm}{dt} = 0. \tag{3.189}$$

Man definiert

$$\frac{dq_\varrho}{dt} := \frac{1}{m}\frac{dm}{dt}. \tag{3.190}$$

Üblicherweise werden die Wärme- und Massenflüsse jedoch auf das Volumen bezogen, es wird

$$q_\varrho^{(V)} := \varrho\frac{dq_\varrho}{dt}, \tag{3.191}$$

$$q_T^{(V)} := \varrho\frac{dq_T}{dt} \tag{3.192}$$

definiert. Damit folgt

$$c^{(v)}\frac{dT}{dt} - \frac{p}{\varrho^2}\frac{d\varrho}{dt} = \frac{q_T^{(V)}}{\varrho} - \frac{sT}{\varrho}q_\varrho^{(V)} \tag{3.193}$$

Dabei ist zu berückstichtigen, dass es sich bei den Zeitableitungen um materielle Ableitungen handelt

$$\boxed{c^{(v)}\frac{DT}{Dt} - \frac{p}{\varrho^2}\frac{D\varrho}{Dt} = \frac{q_T^{(V)}}{\varrho} - \frac{sT}{\varrho}q_\varrho^{(V)}.} \tag{3.194}$$

Mittels der Kontinuitätsgleichung in der Form

$$\frac{D\varrho}{Dt} = -\varrho\nabla\cdot\boldsymbol{v} \tag{3.195}$$

kann man dies zu

$$c^{(v)}\frac{\partial T}{\partial t} + c^{(v)}\boldsymbol{v}\cdot\nabla T + \frac{p}{\varrho}\nabla\cdot\boldsymbol{v} = \frac{q_T^{(V)}}{\varrho} - \frac{sT}{\varrho}q_\varrho^{(V)} \tag{3.196}$$

umformen. Mit $p = \varrho R_s T$ folgt

$$\frac{\partial T}{\partial t} + \boldsymbol{v}\cdot\nabla T + \frac{R_s T}{c^{(v)}}\nabla\cdot\boldsymbol{v} = \frac{\partial T}{\partial t} + \nabla\cdot(T\boldsymbol{v}) + \left(\frac{R_s}{c^{(v)}} - 1\right)T\nabla\cdot\boldsymbol{v} = \frac{q_T^{(V)}}{c^{(v)}\varrho} - \frac{sT}{c^{(v)}\varrho}q_\varrho^{(V)}. \tag{3.197}$$

Mit $R_s = c^{(p)} - c^{(v)}$ kann man dies zu

$$\frac{\partial T}{\partial t} = -\nabla \cdot (T\boldsymbol{v}) + (2 - \varkappa)\, T\nabla \cdot \boldsymbol{v} + \frac{q_T^{(V)}}{c^{(v)}\varrho} - \frac{sT}{c^{(v)}\varrho} q_\varrho^{(V)} \tag{3.198}$$

umschreiben.

3.6.1.2 Hydrostatischer Grenzfall

Leitet man die Zustandsgleichung zeitlich ab, folgt

$$\omega a + p\frac{Da}{Dt} = R_s \frac{DT}{Dt}. \tag{3.199}$$

Mit den Glg.en (3.194) und (2.816) erhält man unter Vernachlässigung der Massenquelldichte

$$\begin{aligned} \omega a + a q_T^{(V)} - c^{(v)}\frac{DT}{Dt} = R_s \frac{DT}{Dt} \Leftrightarrow -\omega a + \left(R_s + c^{(v)}\right)\frac{DT}{Dt} &= c^{(p)}\frac{DT}{Dt} - a\omega = a q_T^{(V)} \\ \frac{D_h T}{Dt} - \omega\left(\frac{a}{c^{(p)}} - \frac{\partial T}{\partial p}\right) &= \frac{a}{c^{(p)}} q_T^{(V)}. \end{aligned} \tag{3.200}$$

Mit der Zustandsgleichung folgt

$$\frac{a}{c^{(p)}} - \frac{\partial T}{\partial p} = \frac{R_s T}{c^{(p)} p} - \frac{\partial T}{\partial p} =: S_p, \tag{3.201}$$

dies definiert den Stabilitätsparameter S_p. Man erhält

$$\boxed{\frac{D_h T}{Dt} - S_p \omega = \frac{a}{c^{(p)}} q_T^{(V)}.} \tag{3.202}$$

3.6.1.3 Adiabatische Grenzfälle

Ein Prozess ist adiabatisch, wenn keine Wärme übertragen wird, $dQ = 0$. Der Erste Hauptsatz lautet dann mit den Zustandsgrößen des idealen Gases

$$c^{(v)} m \frac{DT}{Dt} = -p\frac{Dv}{Dt}. \tag{3.203}$$

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

$$c^{(v)} m \frac{dT}{dp}\frac{dp}{dV} = -p. \tag{3.204}$$

Aus der Zustandsgleichung $pV = nRT$ folgt $T = \frac{pV}{nR}$, also lautet die totale Ableitung der Temperatur nach dem Druck für diesen Prozess

$$\frac{dT}{dp} = \frac{\partial T}{\partial p} + \frac{\partial T}{\partial V}\frac{dV}{dp} = \frac{V}{nR} + \frac{p}{nR}\frac{dV}{dp}. \tag{3.205}$$

Setzt man dies in Glg. (3.204) ein, erhält man

$$\begin{aligned} c^{(v)} m \frac{dp}{dV}\left(\frac{V}{nR} + \frac{p}{nR}\frac{dV}{dp}\right) &= -p \Leftrightarrow \frac{c^{(v)}}{R_s} V \frac{dp}{dV} + \frac{c^{(v)}}{R_s} p = -p \\ \Leftrightarrow V\frac{dp}{dV} &= -p\left(1 + \frac{R_s}{c^{(v)}}\right). \end{aligned} \tag{3.206}$$

Macht man mit einem $\varkappa > 0$ den Ansatz

$$p(V) = p_0 \left(\frac{V_0}{V}\right)^{\varkappa}, \tag{3.207}$$

folgt

$$\frac{dp}{dV} = -\varkappa p_0 V_0^{\varkappa} V^{-\varkappa-1} = -\varkappa p_0 \left(\frac{V_0}{V}\right)^{\varkappa} \frac{1}{V} = -\varkappa \frac{p}{V} \tag{3.208}$$

und durch Koeffizientenvergleich erhält man

$$-\varkappa p \quad = \quad -p\left(1 + \frac{R_s}{c^{(v)}}\right) \Leftrightarrow \varkappa = 1 + \frac{R_s}{c^{(v)}} = \frac{c^{(p)}}{c^{(v)}}. \tag{3.209}$$

$\varkappa > 1$ bezeichnet man als den Adiabaten- oder Isentropenexponenten.

3.6.1.4 Potentielle Temperatur als prognostische Variable

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. (3.207) das Volumen durch die Temperatur, erhält man

$$p_0 = p\left(\frac{V}{V_0}\right)^{\varkappa} = p\left(\frac{Tp_0}{p\theta}\right)^{\varkappa} \Leftrightarrow T_0^{\varkappa} = T^{\varkappa}\left(\frac{p_0}{p}\right)^{\varkappa-1} \Leftrightarrow \theta = T\left(\frac{p_0}{p}\right)^{\frac{R_s}{c^{(p)}}} \tag{3.210}$$

Dies kann man nutzen, um die Definition des Stabilitätsparameters S_p Glg. (3.201) zu vereinfachen:

$$-\frac{T}{\theta}\frac{\partial\theta}{\partial p} \quad = \quad -\frac{T}{\theta}\left(\frac{\partial T}{\partial p} - T\frac{1}{p}\frac{R_s}{c^{(p)}}\right)\left(\frac{p_0}{p}\right)^{\frac{R_s}{c^{(p)}}} = \frac{R_s T}{c^{(p)} p} - \frac{\partial T}{\partial p} = S_p \tag{3.211}$$

Man erhält für die potentielle Dichte ϱ_0 den Ausdruck

$$\varrho_0 = \varrho\left(\frac{p_0}{p}\right)^{\frac{1}{\varkappa}}. \tag{3.212}$$

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

$$\frac{dT}{dz} = \theta\frac{dp}{dz}\frac{R_s}{c^{(p)}}\frac{1}{p_0}\left(\frac{p}{p_0}\right)^{\frac{R_s}{c^{(p)}}-1}, \tag{3.213}$$

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 hydrostatische Approximation und die Zustandsgleichung idealer Gase ein, folgt

$$\frac{dT}{dz} = -\theta g \varrho_0 \frac{R_s}{c^{(p)}}\frac{1}{p_0} = -\frac{g}{c^{(p)}} \approx -0{,}98\ \frac{\mathrm{K}}{100\ \mathrm{m}}, \tag{3.214}$$

man definiert den trockenadiabatischen Gradienten Γ_d als den Betrag der Abnahme

$$\Gamma_d := \frac{g}{c^{(p)}} \approx 0{,}98\ \frac{\mathrm{K}}{100\ \mathrm{m}}. \tag{3.215}$$

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

Abbildung 3.2: Die adiabatische Hebung eines trockenen Luftteilchens, diese Kurve bezeichnet man auch als Hebungskurve.

muss überhaupt nicht, auch nicht näherungsweise, mit der Trockenadiabaten übereinstimmen. Es gilt nämlich

$$\begin{aligned}
\frac{\partial T}{\partial z} &= \theta \frac{\partial p}{\partial z} \frac{R_s}{c^{(p)}} \frac{1}{p_0} \left(\frac{p}{p_0}\right)^{\frac{R_s}{c^{(p)}}-1} + \frac{\partial \theta}{\partial z} \left(\frac{p}{p_0}\right)^{\frac{R_s}{c^{(p)}}} = -\frac{g}{c^{(p)}} - g \frac{p}{R_s T} \frac{\partial \theta}{\partial p} \left(\frac{p}{p_0}\right)^{\frac{R_s}{c^{(p)}}} \\
\Rightarrow g \frac{p}{R_s \theta} \frac{\partial \theta}{\partial p} &= -\left(\Gamma_d - \Gamma\right), \qquad (3.216)
\end{aligned}$$

mit

$$\Gamma := -\frac{\partial T}{\partial z}. \qquad (3.217)$$

Die materielle Ableitung von Glg. (3.210) ist

$$\frac{DT}{Dt} = \frac{D\theta}{Dt} \left(\frac{p}{p_0}\right)^{R_s/c^{(p)}} + \theta \frac{dp}{dt} \frac{1}{p_0} \frac{R_s}{c^{(p)}} \left(\frac{p}{p_0}\right)^{R_s/c^{(p)}-1} = \frac{T}{\theta} \frac{D\theta}{Dt} + \frac{T}{p} \omega \frac{R_s}{c^{(p)}} = \frac{T}{\theta} \frac{D\theta}{Dt} + \frac{\omega}{\varrho c^{(p)}}. \qquad (3.218)$$

Hieraus folgt

$$\begin{aligned}
c^{(v)} \frac{T}{\theta} \frac{D\theta}{Dt} + \frac{T}{p} \omega \frac{R_s}{c^{(p)}} c^{(v)} + p \frac{D}{Dt} \frac{R_s T}{p} &= \frac{q_T^{(V)}}{\varrho} - \frac{sT}{\varrho} q_\varrho^{(V)} \\
\Leftrightarrow \frac{D\theta}{Dt} \frac{T}{\theta} + \frac{\omega T}{p} \frac{R_s}{c^{(p)}} - \frac{R_s T}{p c^{(v)}} \omega + \frac{R_s}{c^{(v)}} \frac{DT}{Dt} &= \frac{q_T^{(V)}}{c^{(v)} \varrho} - \frac{sT}{c^{(v)} \varrho} q_\varrho^{(V)} \\
\Leftrightarrow \frac{T}{\theta} \frac{D\theta}{Dt} + \frac{\omega R_s T}{p} \left(\frac{1}{c^{(p)}} - \frac{1}{c^{(v)}}\right) & \\
+ \frac{R_s}{c^{(v)}} \left(\frac{T}{\theta} \frac{D\theta}{Dt} + \frac{T}{p} \omega \frac{R_s}{c^{(p)}}\right) &= \frac{q_T^{(V)}}{c^{(v)} \varrho} - \frac{sT}{c^{(v)} \varrho} q_\varrho^{(V)} \\
\Leftrightarrow \frac{T}{\theta} \frac{D\theta}{Dt} \frac{c^{(p)}}{c^{(v)}} + \frac{\omega R_s T}{p} \frac{c^{(v)} - c^{(p)} + R_s}{c^{(v)} c^{(p)}} &= \frac{q_T^{(V)}}{c^{(v)} \varrho} - \frac{sT}{c^{(v)} \varrho} q_\varrho^{(V)}. \qquad (3.219)
\end{aligned}$$

Damit lautet Erste Hauptsatz für Thermodynamik für ein Gas in Termen der potentiellen Temperatur

$$\boxed{\frac{D\theta}{Dt} = \frac{\theta}{T\varrho c^{(p)}}\left(q_T^{(V)} - sTq_\varrho^{(V)}\right). \tag{3.220}}$$

Multipliziert man diese Gleichung mit ϱ, erhält man

$$\varrho\frac{\partial\theta}{\partial t} + \varrho\boldsymbol{v}\cdot\nabla\theta = \frac{\theta}{Tc^{(p)}}\left(q_T^{(V)} - sTq_\varrho^{(V)}\right). \tag{3.221}$$

Addiert man das Produkt der potentiellen Temperatur mit der Kontinuitätsgleichung

$$\theta\frac{\partial\varrho}{\partial t} + \theta\boldsymbol{v}\cdot\nabla\varrho + \theta\varrho\nabla\cdot\boldsymbol{v} = \theta q_\varrho^{(V)} = \frac{\theta}{Tc^{(p)}}Tc^{(p)}q_\varrho^{(V)} \tag{3.222}$$

hinzu, folgt

$$\boxed{\frac{\partial\left(\varrho\theta\right)}{\partial t} + \nabla\cdot\left(\varrho\theta\boldsymbol{v}\right) = \frac{\theta}{Tc^{(p)}}\left(q_T^{(V)} + T\left(c^{(p)} - s\right)q_\varrho^{(V)}\right). \tag{3.223}}$$

Diese Form bezeichnet man auch als *Flussform*, wohingegen Glg. (3.220) *Advektionsform* hat. Die Flussform lässt sich als eine formale Kontinuitätsgleichung verstehen.

3.6.1.5 Druck als prognostische Variable

Nun soll noch die Definition der potentiellen Temperatur in die Zustandsgleichung eingesetzt werden:

$$p = \varrho R_s\theta\left(\frac{p}{p_0}\right)^{R_s/c^{(p)}} \Rightarrow p^{1-R_s/c^{(p)}} = \varrho R_s\theta\frac{1}{p_0^{R_s/c^{(p)}}} \tag{3.224}$$

$$\Rightarrow p^{1/\varkappa} = \varrho R_s\theta\frac{1}{p_0^{R_s/c^{(p)}}} \Rightarrow p = \left(\varrho R_s\theta\right)^{\varkappa}\left(\frac{1}{p_0}\right)^{\varkappa-1} \tag{3.225}$$

Auch für p kann eine prognostiosche Gleichung hergeleitet werden:

$$p = \varrho R_s T \Rightarrow \frac{Dp}{Dt} = R_s\left(T\frac{D\varrho}{Dt} + \varrho\frac{DT}{Dt}\right) \tag{3.226}$$

Mit

$$\frac{D\varrho}{Dt} = -\varrho\nabla\cdot\boldsymbol{v} + q_\varrho^{(V)}, \tag{3.227}$$

$$\frac{DT}{Dt} = \frac{T}{\theta}\frac{D\theta}{Dt} + \frac{TR_s}{c^{(p)}p}\frac{Dp}{Dt} \tag{3.228}$$

folgt

$$\begin{aligned}
\frac{Dp}{Dt} &= R_sT\left(-\varrho\nabla\cdot\boldsymbol{v} + q_\varrho\right) + R_s\varrho\left(\frac{T}{\theta}\frac{D\theta}{Dt} + \frac{TR_s}{c^{(p)}p}\frac{Dp}{Dt}\right)\\
&= -p\nabla\cdot\boldsymbol{v} + R_sTq_\varrho^{(V)} + \frac{p}{\theta}\frac{D\theta}{Dt} + \frac{R_s}{c^{(p)}}\frac{Dp}{Dt}\\
\Leftrightarrow \frac{c^{(v)}}{c^{(p)}}\frac{Dp}{Dt} &= -p\nabla\cdot\boldsymbol{v} + R_sTq_\varrho^{(V)} + \frac{p}{\theta}\frac{D\theta}{Dt}\\
\Leftrightarrow \frac{\partial p}{\partial t} &= -\boldsymbol{v}\cdot\nabla p - \frac{c^{(p)}}{c^{(v)}}p\nabla\cdot\boldsymbol{v} + \frac{c^{(p)}}{c^{(v)}}R_sTq_\varrho^{(V)} + \frac{p}{T\varrho c^{(v)}}\left(q_T^{(V)} - sTq_\varrho^{(V)}\right)
\end{aligned} \tag{3.229}$$

$$\boxed{\Leftrightarrow \frac{\partial p}{\partial t} = -\boldsymbol{v}\cdot\nabla p - \frac{c^{(p)}}{c^{(v)}} p \nabla\cdot\boldsymbol{v} + \frac{c^{(p)}}{c^{(v)}} R_s T q_\varrho^{(V)} + \frac{R_s}{c^{(v)}}\left(q_T^{(V)} - s T q_\varrho^{(V)}\right). \qquad (3.230)}$$

3.6.1.6 Exner-Druck als prognostische Variable

Definiert man den *Exner-Druck* Π durch

$$\Pi := \frac{T}{\theta} = \left(\frac{p}{p_0}\right)^{R_s/c^{(p)}} \Leftrightarrow p = \Pi^{c^{(p)}/R_s} p_0, \qquad (3.231)$$

gilt der Zusammenhang

$$\begin{aligned} p &= \varrho R_s \theta \Pi \Leftrightarrow \Pi^{c^{(p)}/R_s} = \frac{\varrho R_s \theta}{p_0}\Pi \Leftrightarrow \Pi^{c^{(v)}/R_s} = \frac{\varrho R_s \theta}{p_0} \\ \Pi &= \left(\frac{\varrho R_s \theta}{p_0}\right)^{R_s/c^{(v)}}. \end{aligned} \qquad (3.232)$$

Hieraus folgt

$$\nabla p = R_s \theta \varrho \nabla \Pi + R_s \Pi \nabla\left(\varrho\theta\right) = c^{(p)}\theta\varrho\nabla\Pi - c^{(v)}\theta\varrho\nabla\Pi + R_s\Pi\nabla\left(\varrho\theta\right). \qquad (3.233)$$

Man stellt fest:

$$\begin{aligned} -c^{(v)}\theta\varrho\nabla\Pi + R_s\Pi\nabla\left(\varrho\theta\right) &= -\left(\frac{R_s}{p_0}\right)^{R_s/c^{(v)}} c^{(v)}\theta\varrho\nabla\left(\varrho\theta\right)^{R_s/c^{(v)}} + R_s\Pi\nabla\left(\varrho\theta\right) \\ &\overset{\text{Glg. (3.232)}}{=} R_s\left(\Pi - \left(\frac{R_s}{p_0}\right)^{R_s/c^{(v)}}\left(\varrho\theta\right)^{R_s/c^{(v)}}\right)\nabla\left(\varrho\theta\right) = 0 \end{aligned} \qquad (3.234)$$

Somit kann man für die Druckgradientbeschleunigung schreiben

$$-\frac{1}{\varrho}\nabla p = -c^{(p)}\theta\nabla\Pi. \qquad (3.235)$$

Mit Glg. (B.53) folgt

$$\begin{aligned} \nabla\cdot\left(\varrho c^{(p)}\Pi\theta\boldsymbol{v}\right) &= \varrho c^{(p)}\theta\boldsymbol{v}\cdot\nabla\Pi + \Pi\nabla\cdot\left(\varrho c^{(p)}\theta\boldsymbol{v}\right) \\ \Leftrightarrow -\varrho\boldsymbol{v}\cdot c^{(p)}\theta\nabla\Pi &= -\nabla\cdot\left(\varrho c^{(p)}T\boldsymbol{v}\right) + c^{(p)}\Pi\nabla\cdot\left(\varrho\theta\boldsymbol{v}\right) \\ \Leftrightarrow -\varrho\boldsymbol{v}\cdot c^{(p)}\theta\nabla\Pi &= -\nabla\cdot\left(\varrho h\boldsymbol{v}\right) + c^{(p)}\Pi\nabla\cdot\left(\varrho\theta\boldsymbol{v}\right) \end{aligned} \qquad (3.236)$$

mit der spezifischen Enthalpie h. Hieraus kann man ablsesen:

- 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.

Nun werden noch zwei prognostische Gleichungen für Π hergeleitet. Die lokalzeitliche Ableitung von Glg. (3.232) lautet im adiabatischen Fall

$$\begin{aligned} \frac{\partial\Pi}{\partial t} &= \frac{R_s}{c^{(v)}}\left(\frac{\varrho R_s\theta}{p_0}\right)^{\frac{R_s}{c^{(v)}}-1}\frac{\varrho R_s\theta}{p_0}\left(\frac{1}{\theta}\frac{\partial\theta}{\partial t} + \frac{1}{\varrho}\frac{\partial\varrho}{\partial t}\right) = \frac{R_s}{c^{(v)}\theta\varrho}\left(\frac{\varrho R_s\theta}{p_0}\right)^{\frac{R_s}{c^{(v)}}}\left(\varrho\frac{\partial\theta}{\partial t} + \theta\frac{\partial\varrho}{\partial t}\right) \\ &= \frac{R_s\Pi}{c^{(v)}\theta\varrho}\left(\varrho\frac{\partial\theta}{\partial t} + \theta\frac{\partial\varrho}{\partial t}\right) = \frac{R_s\Pi}{c^{(v)}\theta\varrho}\left(-\varrho\boldsymbol{v}\cdot\nabla\theta - \theta\nabla\cdot\left(\varrho\boldsymbol{v}\right)\right) = -\frac{R_s\Pi}{c^{(v)}\theta\varrho}\nabla\cdot\left(\varrho\theta\boldsymbol{v}\right). \end{aligned} \qquad (3.237)$$

Fügt man die diabatischen Terme hinzu, folgt

$$\boxed{\frac{\partial \Pi}{\partial t} = -\frac{R_s \Pi}{c^{(v)} \theta \varrho} \left[\nabla \cdot \left(\varrho \theta \boldsymbol{v} \right) - \frac{\theta}{T c^{(p)}} \left(q_T^{(V)} + T \left(c^{(p)} - s \right) q_\varrho^{(V)} \right) \right]. \qquad (3.238)}$$

Für die materielle Ableitung von Glg. (3.232) erhält man

$$\frac{D\Pi}{Dt} = \frac{R_s}{c^{(v)}} \left(\frac{\varrho R_s \theta}{p_0} \right)^{R_s / c^{(v)} - 1} \frac{R_s}{p_0} \frac{D\left(\varrho\theta\right)}{Dt} = \frac{R_s}{c^{(v)} \varrho \theta} \left(\frac{\varrho R_s \theta}{p_0} \right)^{R_s / c^{(v)}} \frac{D\left(\varrho\theta\right)}{Dt} = \frac{R_s \Pi}{c^{(v)} \varrho \theta} \frac{D\left(\varrho\theta\right)}{Dt}. \qquad (3.239)$$

Mit Glg. (3.223) folgt

$$\boxed{\frac{D\Pi}{Dt} = \frac{R_s \Pi}{c^{(v)}} \left[-\nabla \cdot \boldsymbol{v} + \frac{1}{\varrho T c^{(p)}} \left(q_T^{(V)} + T \left(c^{(p)} - s \right) q_\varrho^{(V)} \right) \right]. \qquad (3.240)}$$

3.6.1.7 Entropie als prognostische Variable

Setzt man die Zustandsgleichungen Glg.en (2.808) und (2.810) in Glg. (2.806) ein, folgt unter Vernachlässigung des Ungefähr-Zeichens

$$\begin{aligned}
S\left(E, V, N\right) &= k_B \frac{3N}{2} \ln\left(c\right) + k_B N \ln\left(\frac{V}{N}\right) + k_B \frac{3N}{2} \ln\left(\frac{E}{N}\right) \\
&= k_B \frac{3N}{2} \ln\left(c\right) + k_B N \ln\left(\frac{k_B T}{p}\right) + k_B \frac{3N}{2} \ln\left(\frac{3}{2} k_B T\right) \\
&= k_B N \ln\left(k_B T\right) + k_B \frac{3N}{2} \ln\left(\frac{3}{2} k_B T\right) - N k_B \ln\left(p\right) + k_B \frac{3N}{2} \ln\left(c\right) \\
&= k_B \frac{5N}{2} \ln\left(k_B T\right) + k_B \frac{3N}{2} \ln\left(\frac{3}{2}\right) - N k_B \ln\left(p\right) + k_B \frac{3N}{2} \ln\left(c\right) \\
&= k_B \frac{5N}{2} \ln\left(T\right) - N k_B \ln\left(p\right) + k_B \frac{5N}{2} \ln\left(k_B\right) + k_B \frac{3N}{2} \ln\left(\frac{3}{2}\right) + k_B \frac{3N}{2} \ln\left(c\right) \\
&= k_B \frac{5N}{2} \ln\left(T\right) - N k_B \ln\left(p\right) + N k_B \ln\left(k_B^{\frac{5}{2}}\right) + N k_B \ln\left[\left(\frac{3}{2}\right)^{\frac{3}{2}}\right] + N k_B \ln\left(c^{\frac{3}{2}}\right) \\
&= k_B \frac{5N}{2} \ln\left(T\right) - N k_B \ln\left(p\right) + N k_B \ln\left[k_B^{\frac{5}{2}} \left(\frac{3}{2}\right)^{\frac{3}{2}} c^{\frac{3}{2}}\right] \\
&= k_B \frac{5N}{2} \ln\left(T\right) - N k_B \ln\left(p\right) + N k_B \ln\left[\left(\frac{3 k_B}{2} c\right)^{\frac{3}{2}} k_B\right]. \qquad (3.241)
\end{aligned}$$

Aus Glg. (2.807) weiß man

$$c = \frac{M e^{5/3}}{3 \pi \hbar^2}, \qquad (3.242)$$

wobei M die Masse der Teilchen bezeichnet. Hieraus folgt

$$\begin{aligned}
S\left(E, V, N\right) &= k_B \frac{5N}{2} \ln\left(T\right) - N k_B \ln\left(p\right) + N k_B \ln\left[\left(\frac{3 k_B}{2} \frac{M e^{5/3}}{3 \pi \hbar^2}\right)^{\frac{3}{2}} k_B\right] \\
&= k_B \frac{5N}{2} \ln\left(T\right) - N k_B \ln\left(p\right) + N k_B \ln\left[\left(\frac{M e^{5/3} k_B}{2 \pi \hbar^2}\right)^{\frac{3}{2}} k_B\right]. \qquad (3.243)
\end{aligned}$$

Mit

$$c' := k_B \ln\left[\left(\frac{M e^{5/3} k_B}{2 \pi \hbar^2}\right)^{\frac{3}{2}} k_B\right] \qquad (3.244)$$

kann man abkürzend

$$S(E,V,N) = k_B \frac{5N}{2} \ln(T) - Nk_B \ln(p) + Nc' \tag{3.245}$$

notieren. Somit erhält man

$$\begin{aligned}
S(E,V,N) &= C^{(p)} \ln(T) - Nk_B \ln(p) + Nc' \\
&= C^{(p)} \ln\left[\theta \left(\frac{p}{p_0}\right)^{\frac{R_s}{c^{(p)}}}\right] - Nk_B \ln(p) + Nc' \\
&= C^{(p)} \ln(\theta) + R_s m \ln\left(\frac{p}{p_0}\right) - Nk_B \ln(p) + Nc' \\
&= C^{(p)} \ln(\theta) + k_B N \ln(p) - Nk_B \ln(p) - Nk_B \ln(p_0) + Nc' \\
&= C^{(p)} \ln(\theta) - Nk_B \ln(p_0) + Nk_B \ln\left[\left(\frac{k_B M e^{5/3}}{2\pi\hbar^2}\right)^{\frac{3}{2}} k_B\right] \\
&= C^{(p)} \ln(\theta) + Nk_B \ln\left[\frac{k_B}{p_0}\left(\frac{k_B M e^{5/3}}{2\pi\hbar^2}\right)^{\frac{3}{2}}\right] \\
&= C^{(p)} \ln(\theta) + \frac{2C^{(p)}}{5} \ln\left[\frac{k_B}{p_0}\left(\frac{k_B M e^{5/3}}{2\pi\hbar^2}\right)^{\frac{3}{2}}\right] \\
&= C^{(p)} \ln(\theta) + mc''.
\end{aligned} \tag{3.246}$$

Mit

$$c'' := \frac{2c^{(p)}}{5} \ln\left[\frac{k_B}{p_0}\left(\frac{k_B M e^{5/3}}{2\pi\hbar^2}\right)^{\frac{3}{2}}\right]. \tag{3.247}$$

Für die spezifische Entropie s gilt somit

$$s = c^{(p)} \ln(\theta) + c'' \tag{3.248}$$

mit der molaren Masse M. Man kann auch s als Zustandsgröße verwenden. Es gilt nämlich

$$\boxed{\rho \frac{Ds}{Dt} = c^{(p)} \frac{\rho}{\theta} \frac{D\theta}{Dt} = \frac{1}{T}\left(q_T^{(V)} - sTq_\rho^{(V)}\right).} \tag{3.249}$$

Addiert man das Produkt der Entropie s mit der Kontinuitätsgleichung

$$s \frac{\partial \rho}{\partial t} + s\boldsymbol{v} \cdot \nabla \rho + s\rho \nabla \cdot \boldsymbol{v} = sq_\rho^{(V)} \tag{3.250}$$

hinzu, folgt mit der Definition

$$\tilde{s} := \rho s. \tag{3.251}$$

die Gleichung

$$\boxed{\Rightarrow \frac{\partial \tilde{s}}{\partial t} + \nabla \cdot (\tilde{s}\boldsymbol{v}) = \frac{q_T^{(V)}}{T}.} \tag{3.252}$$

Man mache sich an dieser Stelle klar, dass die Konstante c'' nicht irrelevant ist. Ersetze nämlich

$$s \to s - \tilde{c} \tag{3.253}$$

mit einer beliebigen Konstante $\tilde{c}$, dann wird aus Glg. (3.252)

$$\frac{\partial \tilde{s}}{\partial t} + \nabla \cdot (\tilde{s}\boldsymbol{v}) \quad = \quad \frac{q_T^{(V)}}{T} + \tilde{c} q_\varrho^{(V)}. \tag{3.254}$$

Möchte man c'' also loswerden, möchte man also $c^{(p)} \ln(\theta)$ direkt als Ausdruck für die Entropie verwenden, so geht dies nur unter Vernachlässigung von Massenquelltermen. Diese tragen nicht zur Evolution der Entropiedichte bei.

Mit der Bezeichnungsänderung

$$c \to \frac{c''}{M} \tag{3.255}$$

ergibt sich als Diagnostik für die potentielle Temperatur

$$\theta = \exp\left(\frac{s - c}{c^{(p)}}\right) = \exp\left(\frac{\frac{\tilde{s}}{\varrho} - c}{c^{(p)}}\right) = \exp\left(-\frac{c}{c^{(p)}}\right) \exp\left(\frac{\tilde{s}}{c^{(p)}\varrho}\right). \tag{3.256}$$

Mit

$$\theta = T\left(\frac{p_0}{p}\right)^{R_s/c^{(p)}} = T\left(\frac{p_0}{\varrho R_s T}\right)^{R_s/c^{(p)}} = \left(\frac{p_0}{R_s}\right)^{R_s/c^{(p)}} T^{c^{(v)}/c^{(p)}} \varrho^{-R_s/c^{(p)}} \tag{3.257}$$

erhält man weiter

$$T = \left(\frac{R_s}{p_0}\right)^{R_s/c^{(v)}} \exp\left(-\frac{c}{c^{(v)}}\right) \varrho^{R_s/c^{(v)}} \exp\left(\frac{\tilde{s}}{c^{(v)}\varrho}\right). \tag{3.258}$$

Mit

$$\beta := \left(\frac{R_s}{p_0}\right)^{R_s/c^{(v)}} \exp\left(-\frac{c}{c^{(v)}}\right) \tag{3.259}$$

kann man dies kürzer als

$$\boxed{T = \beta \varrho^{R_d/c^{(v)}} \exp\left(\frac{\tilde{s}}{c^{(v)}\varrho}\right)} \tag{3.260}$$

notieren. Dies ist die Zustandsgleichung idealer Gase in Entropieformulierung.

3.6.2 Ideales Gasgemisch mit homogener Zusammensetzung

N-atomige ideale Gase haben gegenüber dem einatomigen Gas zusätzlich Rotations- und Vibrationsfreiheitsgrade. Diese zusätzlichen Freiheitsgrade erhöhen die Wärmekapazitäten und ein analytischer Ausdruck für die Entropie liegt dann nicht mehr vor. Als Modell für dieses komplexe System wird ein einatomiges ideales Gas mit der gleichen fiktiven molaren Masse wie das Originalgas verwendet, wobei für die Wärmekapazitäten Messweret oder Produkte einer fundamentaleren Theorie verwendet. Damit lassen sich die im vorigen Abschnitt aufgeführten Ergebnisse insbesondere auch auf trockene übertragen.

3.6.3 Ideales Gasgemisch mit variabler Zusammensetzung

Hier geht man von einem Gasgemisch aus $N \geq 1$ idealen einatomigen Gasen aus. Glg. (3.252) lässt sich auf jede dieser Komponenten anwenden und überlagern. Dabei gilt

$$\tilde{s}_i = s_i \varrho_i \tag{3.261}$$

für $1 \leq i \leq N$ und

$$s = \sum_{i=1}^{N} \tilde{s}_i. \tag{3.262}$$

Prinzipiell bekommt jede Gassorte ihren eigenen Temperatur-Quellterm $q_{T,i}$. Man nimmt jedoch vereinfachend an, dass der anschließende Austausch der Energie zwischen den Gassorten so schnell ist, dass man sie als instantan annehmen kann. In diesem Fall kann man

$$q_{T,i}^{(V)} = \frac{\varrho_i}{\varrho} q_T^{(V)} \tag{3.263}$$

Somit gilt Glg. (3.252)

$$\boxed{\Rightarrow \frac{\partial \tilde{s}}{\partial t} + \nabla \cdot (\tilde{s}\boldsymbol{v}) \quad = \quad q_T^{(V)}} \tag{3.264}$$

auch mit diesen Definitionen.

3.6.3.1 Beispiel: feuchte Luft

Hier soll es zunächst um feuchte Luft unter Abwesenheit von Kondensaten gehen. In solch einem System gilt

$$s = \varrho_d \left[c_d^{(p)} \ln(\theta) + \frac{1}{\tilde{M}_d} \tilde{c}_d'' \right] + \varrho_v \left[c_v^{(p)} \ln(\theta_v) + \frac{1}{\tilde{M}_v} \tilde{c}_v'' \right], \tag{3.265}$$

wobei $\theta_v := T \left(\frac{p_0}{p} \right)^{R_v / c_v^{(p)}}$ die potentielle Temperatur von Wasserdampf ist. In jeder individuellen Phase i gilt

$$\nabla p_i \quad = \quad \varrho c_i^{(p)} \nabla T - \varrho_i T \nabla s_i. \tag{3.266}$$

Somit folgt für zwei Phasen d, v durch Summation

$$\nabla p = \nabla (p_d + p_v) \quad = \quad \varrho_d c_d^{(p)} \nabla T - \varrho_d T \nabla s_d + \varrho_v c_v^{(p)} \nabla T - \varrho_v T \nabla s_v. \tag{3.267}$$

Hieraus folgt

$$\boxed{\Leftrightarrow -\frac{1}{\varrho} \nabla p \quad = \quad -c_h^{(p)} \nabla T + \frac{T}{\varrho} \left(\varrho_d \nabla s_d + \varrho_v \nabla s_v \right)} \tag{3.268}$$

mit der isobaren spezifischen Wärmekapazität feuchter Luft

$$c_h^{(p)} = \frac{\varrho_d c_d^{(p)} + \varrho_v c_v^{(p)}}{\varrho = \varrho_d + \varrho_v}. \tag{3.269}$$

3.6.4 Anwendungen

3.6.4.1 Die isentrope trockene Atmosphäre

In einer isentropen Atmosphäre (Atmosphäre homogener spezifischer Entropie) ist nach Glg. (3.248) 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

$$\frac{\partial p}{\partial z} = -g\varrho = -g \frac{p}{R_d T} = -\frac{g}{R_d} \frac{p}{T_0 - \Gamma_d z} = \frac{gp}{R_d(\Gamma_d z - T_0)} \tag{3.270}$$

als zu lösende Differenzialgleichung für $p = p(z)$. Macht man den Ansatz

$$p(z) = C \exp[f(z)] \tag{3.271}$$

mit einer stetig-differenzierbaren Funktion $f = f(z)$ und einer Konstanten $C > 0$, so folgt

$$\frac{\partial p}{\partial z} = \frac{\partial f}{\partial z} p, \tag{3.272}$$

man erhält also für f

$$\frac{\partial f}{\partial z} = \frac{g}{R_d\left(\Gamma_d z - T_0\right)}, \tag{3.273}$$

dies ist gelöst für

$$f = \frac{g}{R_d \Gamma_d} \ln\left(T_0 - \Gamma_d z\right). \tag{3.274}$$

Damit folgt für den Druck

$$p(z) = C \exp\left(\frac{g}{R_d \Gamma_d} \ln\left(T_0 - \Gamma_d z\right)\right) = C\left(T_0 - \Gamma_d z\right)^{\frac{g}{R_d \Gamma_d}}, \tag{3.275}$$

mit $p(0) = p_0$ folgt $C = \frac{p_0}{T_0^{\frac{g}{\Gamma_d R_d}}}$. Es gilt also

$$\boxed{p(z) = p_0 \left(1 - \frac{\Gamma_d z}{T_0}\right)^{\frac{g}{R_d \Gamma_d}}.} \tag{3.276}$$

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 $T_0 = 290$ K $= 16,85°$ C an und einer bis in eine Höhe $H = 12$ km linearen Temperaturabnahme $k = 0,65$ K/100m. Darüber geht man von Isothermie aus. Ersetzt man in der Formel der isentropen Atmosphäre (3.276) den trockenadiabatischen Gradienten Γ_d durch k und verwendet darüber die barometrische Höhenformel, so folgt

$$p(z) = \begin{cases} p_0 \left(1 - \frac{kz}{T_0}\right)^{\frac{g}{R_d k}}, & z < H \\ p(H) \exp\left(-g \frac{z-H}{R_d T_T}\right), & z \geq H \end{cases} \tag{3.277}$$

mit $T_T := T_0 - kH$ 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.

3.6.5 Kondensate

Es muss der Erste Hauptsatz auch noch für die Kondensatklassen i formuliert werden. Hierzu geht man von Glg. (2.693) aus:

$$\Delta U_i = \Delta Q_i - \Delta W_i \tag{3.278}$$

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. 3.9 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

$$\begin{aligned}
c_i m_i T_i(t) + c_h m_h T + \sum_{j\neq i} c_j m_j T_j &= c_i T_i(t+\Delta t)\left(m_h + m_i + \sum_{j\neq i} m_j\right) \\
\Leftrightarrow c_i m_i \left[T_i(t+\Delta t) - T_i(t)\right] &= c_h m_h T + \sum_{j\neq i} c_j m_j T_j - c_i T_i(t+\Delta t)\left(m_h + \sum_{j\neq i} m_j\right) \\
\Leftrightarrow \Delta T_i &= \frac{c_h}{c_i m_i} m_h \left(T - \frac{c_i}{c_h} T_i(t+\Delta t)\right) + \frac{1}{c_i m_i}\sum_{j\neq i}\left[c_j m_j T_j - c_i m_j T_i(t+\Delta t)\right] \\
\Leftrightarrow \frac{1}{\Delta V}\frac{dT_i}{dt} &= \frac{1}{m_i}\widetilde{q}_{hi}\left(\frac{c_h}{c_i}T - T_i\right) + \frac{1}{m_i}\sum_{j\neq i}\widetilde{q}_{j,i}\left(\frac{c_j}{c_i}T_j - T_i\right) \\
\Leftrightarrow \varrho_i c_i \frac{dT_i}{dt} &= \widetilde{q}_{hi}\left(c_h T - c_i T_i\right) + \sum_j \widetilde{q}_{j,i}\left(c_j T_j - c_i T_i\right). \qquad (3.279)
\end{aligned}$$

Hierbei wurde davon ausgegangen, dass alle Teilchen der Klasse i dieselbe Temperatur T_i haben, dass also instantane Durchmischung eintritt. Nach Glg. (3.43) und den Überlegungen in Absch. 3.9.2 gilt

$$\widetilde{q}_{hi} = \widetilde{q}'_{v,i} + \widetilde{q}''_{v,i}. \qquad (3.280)$$

Zu den $\widetilde{q}_{j,i}$ tragen Phasenumwandlungen, Kollisionen und Zerfallsprozesse bei. Nach den Überlegungen in der Herleitung von Glg. (3.43) gilt

$$\widetilde{q}_{j,i} = \tilde{m}_j \sum_k \sigma_{j,k} n_j n_k \overline{v_{\mathrm{rel}}}(j,k) P_{j,k}\delta_{i,R_{j,k}} + \tilde{m}_i \lambda_j n_j \sum_l \left(Z_{jil}\right) + \widetilde{q}'''_{j,i}. \qquad (3.281)$$

Man hat also

$$\boxed{\begin{aligned}
\varrho_i c_i \frac{dT_i}{dt} &= q_i + \left(\widetilde{q}'_{v,i} + \widetilde{q}''_{v,i}\right)\left(c_h T - c_i T_i\right) \\
&\quad + \sum_j \left[\tilde{m}_j \sum_k \sigma_{j,k} n_j n_k \overline{v_{\mathrm{rel}}}(j,k) P_{j,k}\delta_{i,R_{j,k}} + \tilde{m}_i \lambda_j n_j \sum_l \left(Z_{jil}\right) + \widetilde{q}'''_{j,i}\right]\left(c_j T_j - c_i T_i\right) \qquad (3.282)
\end{aligned}}$$

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:

$$\boxed{\varrho_h c_h^{(v)} \frac{DT}{Dt} = q_h + \sum_i \left(\widetilde{q}'_{v,i} + \widetilde{q}''_{v,i}\right)\left(c_h^{(v)} T - c_i T_i\right) \qquad (3.283)}$$

3.7 Integralrelationen einer einphasigen Atmosphäre

Die prognostische Gleichung der spezifischen kinetischen Energie $k = \frac{1}{2}\boldsymbol{v}^2$ erhält man durch Multiplikation der Impulsgleichung in der Form Glg. (3.113) von links mit $\boldsymbol{v}\cdot$:

$$\frac{Dk}{Dt} = \frac{\partial k}{\partial t} + \boldsymbol{v}\cdot\nabla k = -\frac{1}{\varrho}\boldsymbol{v}\cdot\nabla p - wg + \boldsymbol{v}\cdot\boldsymbol{F}_R. \tag{3.284}$$

Multipliziert man diese Gleichung mit ϱ und addiert das Produkt der Kontinuitätsgleichung mit k dazu, erhält man

$$\boxed{\frac{DK}{Dt} = \frac{\partial K}{\partial t} + \boldsymbol{v}\cdot\nabla K = -\boldsymbol{v}\cdot\nabla p - \varrho wg - K\nabla\cdot\boldsymbol{v} + \varrho\boldsymbol{v}\cdot\boldsymbol{F}_R} \tag{3.285}$$

als prognostische Gleichung für die kinetische Energiedichte $K = \frac{1}{2}\varrho\boldsymbol{v}^2$. Als prognostische Gleichung für die spezifische geopotentielle Energie φ erhält man

$$\frac{D\varphi}{Dt} = \boldsymbol{v}\cdot\nabla\varphi = wg. \tag{3.286}$$

Multipliziert man diese Gleichung mit ϱ und addiert das Produkt der Kontinuitätsgleichung mit φ dazu, erhält man

$$\boxed{\frac{DP}{Dt} = \frac{\partial P}{\partial t} + \boldsymbol{v}\cdot\nabla P = \varrho wg - P\nabla\cdot\boldsymbol{v}} \tag{3.287}$$

als prognostische Gleichung für die geopotentielle Energiedichte $P = \varrho\varphi$. Als prognostische Gleichung für die spezifische innere Energie $i = c^{(v)}T$ erhält man

$$\frac{Di}{Dt} = \frac{\partial i}{\partial t} + \boldsymbol{v}\cdot\nabla i = -p\frac{Da}{Dt} - \boldsymbol{v}\cdot\boldsymbol{F}_R = -pa\nabla\cdot\boldsymbol{v} - \boldsymbol{v}\cdot\boldsymbol{F}_R. \tag{3.288}$$

Multipliziert man diese Gleichung mit ϱ und addiert das Produkt der Kontinuitätsgleichung mit i dazu, erhält man

$$\boxed{\frac{D\widetilde{I}}{Dt} = \frac{\partial\widetilde{I}}{\partial t} + \boldsymbol{v}\cdot\nabla\widetilde{I} = -\left(p + \widetilde{I}\right)\nabla\cdot\boldsymbol{v} - \varrho\boldsymbol{v}\cdot\boldsymbol{F}_R} \tag{3.289}$$

als prognostische Gleichung für die innere Energiedichte $\widetilde{I} := \varrho i$. Die Energiedichte e ist die Summe aus kinetischer, potentieller und innerer Energie pro Volumen,

$$e = K + P + \widetilde{I}. \tag{3.290}$$

Die totale Ableitung hiervon ergibt sich unter Verwendung der gerade hergeleiteten Gleichungen zu

$$\frac{De}{Dt} = -e\nabla\cdot\boldsymbol{v} - \nabla\cdot(p\boldsymbol{v}). \tag{3.291}$$

Damit folgt

$$\boxed{\frac{\partial e}{\partial t} = -\nabla\cdot(p\boldsymbol{v}) - \nabla\cdot(e\boldsymbol{v}) \Leftrightarrow \frac{\partial e}{\partial t} + \nabla\cdot(e\boldsymbol{v}) = -\nabla\cdot(p\boldsymbol{v}).} \tag{3.292}$$

Dies bezeichnet man auch als das *Poynting-Theorem der Meteorologie* in Analogie zum Poynting-Theorem der ED Glg. (2.145). Als Spezialfall von Glg. (3.291) erhält man für stationäre Strömungen inkompressibler Medien

wegen

$$\nabla \cdot \boldsymbol{v} = 0, \tag{3.293}$$

$$\frac{Dp}{Dt} = \boldsymbol{v} \cdot \nabla p \tag{3.294}$$

die Gleichung

$$\boxed{\frac{D}{Dt}(K + P + p) = 0,} \tag{3.295}$$

was man als *Bernoulli-Gleichung* bezeichnet. Weitere Formen dieser Aussage sind

$$\frac{1}{2}\varrho \boldsymbol{v}^2 + \varrho g z + p = \text{const. entlang Stromlinien,} \tag{3.296}$$

$$\frac{1}{2}\boldsymbol{v} + gz + \frac{p}{\varrho} = \text{const. entlang Stromlinien.} \tag{3.297}$$

Die Gesamtenergie E der Atmosphäre A ist

$$E = \int_A e d^3 r. \tag{3.298}$$

Nimmt man A als konstant an, gilt mit dem Gauß'schen Satz

$$\frac{dE}{dt} = \int_A \frac{\partial e}{\partial t} d^3 r = \int_A -\nabla \cdot [(e + p)\, \boldsymbol{v}]\, d^3 r = -\int_O (e + p)\, \boldsymbol{v} \cdot d\boldsymbol{n} - \int_v (e + p)\, \boldsymbol{v} \cdot d\boldsymbol{n}, \tag{3.299}$$

hierbei sind O der Oberrand der Atmosphäre und U die Erdoberfläche. Unter der Voraussetzung von Massenerhaltung (hier: kinematische Randbedingung) gilt also

$$\boxed{E = \text{const.}} \tag{3.300}$$

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 Gesamtentropie S einer Atmosphäre gilt bis auf eine Konstante

$$S = \int_A \tilde{s} d^3 r \tag{3.301}$$

mit $\tilde{s}$ wie in Glg. (3.251) definiert. Die prognostische Gleichung dieser Größe ist Glg. (3.252):

$$\frac{\partial \tilde{s}}{\partial t} + \nabla \cdot (\tilde{s} \boldsymbol{v}) = c^{(v)} \frac{\varrho}{T} q_T \tag{3.302}$$

Globale Integration liefert

$$\frac{dS}{dt} = \int_A c^{(v)} \frac{\varrho}{T} q_T d^3 r. \tag{3.303}$$

Dieses Integral nichtnegativ, da der Wärmefluss positiv in kälteren und negativ in wärmeren Gebieten ist. Somit gilt

$$\boxed{\frac{dS}{dt} \geq 0.} \tag{3.304}$$

In einer idealen adiabatischen einphasigen Atmosphäre laufen die Prozesse reversibel ab. Für die Zeitableitung

der inneren Energie einer einphasigen Atmosphäre gilt mit Glg. (3.289)

$$\frac{d}{dt}\int_A \widetilde{I} d^3r = \frac{d}{dt}\int_A -p\nabla\cdot\boldsymbol{v} - \varrho\boldsymbol{v}\cdot\boldsymbol{F}_R d^3r = \int_A \boldsymbol{v}\cdot\nabla p - \varrho\boldsymbol{v}\cdot\boldsymbol{F}_R d^3r. \tag{3.305}$$

Die Bilanz der Enthalpie erhält man durch Multiplikation dieser Gleichung mit dem Adiabatenexponenten $\varkappa = \frac{c^{(p)}}{c^{(v)}}$. Analog erhält man für die kinetische bzw. potentielle Energie

$$\frac{d}{dt}\int_A K d^3r \overset{\text{Glg. (3.285)}}{=} \int_A -\boldsymbol{v}\cdot\nabla p - \varrho w g + \varrho\boldsymbol{v}\cdot\boldsymbol{F}_R d^3r, \tag{3.306}$$

$$\frac{d}{dt}\int_A P d^3r \overset{\text{Glg. (3.287)}}{=} \int_A \varrho w g d^3r. \tag{3.307}$$

Somit folgt

$$\boxed{\begin{aligned} \frac{d}{dt}\int_A \widetilde{I} + P d^3r &= D - C, && (3.308)\\ \frac{d}{dt}\int_A K d^3r &= C - D && (3.309)\end{aligned}}$$

mit der *adiabatischen Konversion*

$$C := \int_A -\boldsymbol{v}\cdot\nabla p - \varrho w g d^3r \tag{3.310}$$

und der Dissipation

$$D := \int_A -\varrho\boldsymbol{v}\cdot\boldsymbol{F}_R d^3r. \tag{3.311}$$

Die adiabatische Konversion steht für die Umwandlung von potentieller und innerer Energie in kinetische Energie. Dies geschieht, indem der Druckgradient und die Schwere Arbeit leisten. In der Impulsgleichung kann man daher die Zuordnung

$$\underbrace{\overbrace{\frac{\partial\boldsymbol{v}}{\partial t}}^{\text{lokalzeitl. Änderung}} = \overbrace{-(\boldsymbol{v}\cdot\nabla)\boldsymbol{v} - \boldsymbol{f}\times\boldsymbol{v}}^{\text{Advektion}} \quad \overbrace{-\frac{1}{\varrho}\nabla p + \boldsymbol{g}}^{\text{adiabatische Konversion}}}_{\text{reversibel}} + \underbrace{\overbrace{\boldsymbol{F}_R}^{\text{Dissipation}}}_{\text{irreversibel}} \tag{3.312}$$

bzw.

$$\underbrace{\overbrace{\frac{\partial\boldsymbol{v}}{\partial t}}^{\text{lokalzeitl. Änderung}} = \overbrace{\boldsymbol{v}\times\boldsymbol{\eta} - \nabla k}^{\text{Advektion}} \quad \overbrace{-\frac{1}{\varrho}\nabla p - \nabla\varphi}^{\text{adiabatische Konversion}}}_{\text{reversibel}} + \underbrace{\overbrace{\boldsymbol{F}_R}^{\text{Dissipation}}}_{\text{irreversibel}} \tag{3.313}$$

vornehmen.

Für den Gesamtimpuls $\boldsymbol{P}$ der Atmosphäre gilt

$$\boldsymbol{P} = \int_A \varrho\boldsymbol{v} d^3r. \tag{3.314}$$

Für die Zeitableitung dieser Größe sind laut dem Zweiten Newton'schen Axiom nur die externen Kräfte zu berücksichtigen:

$$\frac{d\boldsymbol{P}}{dt} = \int_A \varrho\boldsymbol{f}_{\text{ext}} d^3r. \tag{3.315}$$

$\boldsymbol{P}$ ist also nie erhalten, da mindestens durch die Oberfläche immer externe Kräfte wirken.

Für den Gesamtdrehimpuls $\boldsymbol{L}$ der Atmosphäre gilt

$$\begin{aligned} \boldsymbol{L} &= \int_A \boldsymbol{r} \times \varrho \boldsymbol{v} d^3 r \\ \frac{d\boldsymbol{L}}{dt} &= \int_A \boldsymbol{r} \times \varrho \boldsymbol{f}_{\text{ext}} d^3 r. \end{aligned} \tag{3.316}$$

Der Drehimpuls ist also genau dann erhalten, wenn alle externen Kräfte auf der radialen Achse wirken, also nur in ruhenden Koordinaten über einem Planten mit radialsymmetrischer Massenverteilung im Inneren.

3.7.1 APE

Die kinetische Energie KE einer Luftsäule in einer hydrostatischen Atmosphäre ist durch

$$\text{KE} = \int_0^\infty \frac{1}{2} \varrho \boldsymbol{v}_h^2 dz = -\frac{1}{g} \int_{p_S}^0 \frac{1}{2} \boldsymbol{v}_h^2 dp = \frac{1}{g} \int_0^{p_S} \frac{1}{2} \boldsymbol{v}_h^2 dp \tag{3.317}$$

gegeben, hierbei ist p_S der Druck an der Erdoberfläche. Analog gilt für die innere Energie

$$\text{IE} = \int_0^\infty \varrho c^{(v)} T dz = \frac{1}{g} \int_0^{p_S} c^{(v)} T dp. \tag{3.318}$$

Für die potentielle Energie PE erhält man mit partieller Integration

$$\text{PE} = \int_0^\infty \varrho g z dz = \int_0^{p_S} z(p)\, dp = p_S z_S + \frac{1}{g} \int_0^{p_S} R_d T dp \tag{3.319}$$

mit z_S als Orographie. Man definiert die *totale potentielle Energie* oder auch kurz potentielle Energie TPE durch

$$\begin{aligned} \text{TPE} &:= \text{PE} + \text{IE} = p_S z_S + g^{-1} \int_0^{p_S} \left(c^{(v)} + R_d \right) dp = p_S z_S + g^{-1} \int_0^{p_S} h dp \\ &= p_S z_S + \frac{c^{(p)}}{g} \int_0^{p_S} \theta \left(\frac{p}{p_0} \right)^{R_d / c^{(p)}} dp \end{aligned} \tag{3.320}$$

mit $h = c^{(p)} T$ als Enthalpie.Man schätzt ab

$$\frac{\text{KE}}{\text{IE}} \sim \frac{\overline{v}_h^2}{2 c^{(v)} \overline{T}} \sim 0{,}03\ \%. \tag{3.321}$$

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 *verfügbaren potentiellen Energie* APE ein. Hierfür transformiert man zunächst Glg. (3.320) ins $\theta-$System:

$$\text{TPE} = p_S z_S + \frac{c^{(p)}}{g p_0^{R_d / c^{(p)}}} \int_\infty^{\theta_S} \theta p(\theta)^{R_d / c^{(p)}} \frac{\partial p}{\partial \theta} d\theta \tag{3.322}$$

Mittels partieller Integration erhält man

$$\begin{aligned} \int_\infty^{\theta_S} \theta p(\theta)^{R_d / c^{(p)}} \frac{\partial p}{\partial \theta} d\theta &= \theta_S p_S^{1 + \frac{R_d}{c^{(p)}}} - \int_\infty^{\theta_S} p(\theta)^{1 + \frac{R_d}{c^{(p)}}} + \frac{R_d}{c^{(p)}} \theta p(\theta)^{R_d / c^{(p)}} \frac{\partial p}{\partial \theta} d\theta \\ \Rightarrow \int_\infty^{\theta_S} \theta p(\theta)^{R_d / c^{(p)}} \frac{\partial p}{\partial \theta} d\theta &= \frac{c^{(p)}}{c^{(p)} + R_d} \theta_S p_S^{1 + \frac{R_d}{c^{(p)}}} + \frac{c^{(p)}}{c^{(p)} + R_d} \int_{\theta_S}^\infty p(\theta)^{1 + \frac{R_d}{c^{(p)}}} d\theta \\ \Rightarrow \text{TPE} &= p_S z_S + \frac{c^{(p)2} \theta_S p_S^{1 + \frac{R_d}{c^{(p)}}}}{g p_0^{R_d / c^{(p)}} \left(c^{(p)} + R_d \right)} \\ &\quad + \frac{c^{(p)2}}{g p_0^{R_d / c^{(p)}} \left(c^{(p)} + R_d \right)} \int_{\theta_S}^\infty p(\theta)^{1 + \frac{R_d}{c^{(p)}}} d\theta. \end{aligned} \tag{3.323}$$

Um die potentielle Energie zu erhalten, die in einer Atmosphäre über einer Fläche A enthalten ist, rechnet man

$$\begin{aligned}\int_A \mathrm{TPE} dA &= \int_A p_S z_S dA + \frac{c^{(p)2}}{g p_0^{R_d/c^{(p)}}\left(c^{(p)}+R_d\right)} \int_A \theta_S p_S^{1+\frac{R_d}{c^{(p)}}} dA + \frac{c^{(p)2}}{g p_0^{R_d/c^{(p)}}\left(c^{(p)}+R_d\right)} \int_A \int_{\theta_S}^{\infty} p(\theta)^{1+\frac{R_d}{c^{(p)}}} d\theta dA \\ &\approx A\overline{p_S z_S} + \frac{A c^{(p)2}}{g p_0^{R_d/c^{(p)}}\left(c^{(p)}+R_d\right)} \overline{\theta_S p_S^{1+\frac{R_d}{c^{(p)}}}} + \frac{A c^{(p)2}}{g p_0^{R_d/c^{(p)}}\left(c^{(p)}+R_d\right)} \int_{\overline{\theta_S}}^{\infty} \overline{p(\theta)^{1+\frac{R_d}{c^{(p)}}}} d\theta. \end{aligned} \tag{3.324}$$

Nach Ggl. (3.320) ist

$$\int_A \mathrm{TPE} + KE dA \tag{3.325}$$

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

$$\mathrm{APE} := \int_A \mathrm{TPE} - \mathrm{TPE}_{\min} dA, \tag{3.326}$$

wobei das Minimum der potentiellen Energie aller hydrostatischer 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

$$\begin{aligned}\int_A \mathrm{TPE} dA &= \int_A p'(z_S) z_S dA + \frac{c^{(p)2}}{g p_0^{R_d/c^{(p)}}\left(c^{(p)}+R_d\right)} \int_A \theta'(z_S) p'(z_S)^{1+\frac{R_d}{c^{(p)}}} dA \\ &\quad + \frac{c^{(p)2}}{g p_0^{R_d/c^{(p)}}\left(c^{(p)}+R_d\right)} \int_A \int_{\theta_S}^{\infty} p'(\theta)^{1+\frac{R_d}{c^{(p)}}} d\theta dA \\ &\approx A\overline{p'(z_S) z_S} + \frac{A c^{(p)2}}{g p_0^{R_d/c^{(p)}}\left(c^{(p)}+R_d\right)} \overline{\theta'(z_S) p'(z_S)^{1+\frac{R_d}{c^{(p)}}}} \\ &\quad + \frac{A c^{(p)2}}{g p_0^{R_d/c^{(p)}}\left(c^{(p)}+R_d\right)} \int_{\overline{\theta_S}}^{\infty} \overline{p'(\theta)^{1+\frac{R_d}{c^{(p)}}}} d\theta. \end{aligned} \tag{3.327}$$

Die ersten beiden Terme auf den rechten Seiten der Glg.en (3.324) und (3.327) sind analytisch wenig ergiebig, ihre Differenz wird mit C abgekürzt, damit erhält man

$$\mathrm{APE} \approx C + \frac{A c^{(p)2}}{g p_0^{R_d/c^{(p)}}\left(c^{(p)}+R_d\right)} \int_{\overline{\theta_S}}^{\infty} \overline{p(\theta)^{1+\frac{R_d}{c^{(p)}}}} - \overline{p'(\theta)^{1+\frac{R_d}{c^{(p)}}}} d\theta. \tag{3.328}$$

Die Masse M über der Isentrope θ ist konservativ, daher gilt

$$p'(\theta) = \overline{p(\theta)} \Rightarrow \overline{p'(\theta)^{1+\frac{R_d}{c^{(p)}}}} = \overline{p(\theta)}^{1+\frac{R_d}{c^{(p)}}} \tag{3.329}$$

woraus folgt

$$\begin{aligned}\mathrm{APE} &\approx C + \frac{A c^{(p)2}}{g p_0^{R_d/c^{(p)}}\left(c^{(p)}+R_d\right)} \int_{\overline{\theta_S}}^{\infty} \overline{p(\theta)^{1+\frac{R_d}{c^{(p)}}}} - \overline{p(\theta)}^{1+\frac{R_d}{c^{(p)}}} d\theta \\ &= \approx C + \frac{A}{\Gamma_d p_0^{\chi}(1+\chi)} \int_{\overline{\theta_S}}^{\infty} \overline{p(\theta)^{1+\chi}} - \overline{p(\theta)}^{1+\chi} d\theta \end{aligned} \tag{3.330}$$

mit dem trockenadiabatischen Temperaturgradienten $\Gamma_d = g/c^{(p)}$ und der Abkürzung $\chi := \frac{R_d}{c^{(p)}}$. Man notiert

$p = \overline{p} + p'$, damit gilt die Taylor-Entwicklung

$$p^{1+\varkappa} = \overline{p}^{1+\varkappa} + (1+\varkappa)\,\overline{p}^{\varkappa} p' + \frac{1}{2}\varkappa\,(1+\varkappa)\,\overline{p}^{\varkappa-1} p'^2 + \ldots \tag{3.331}$$

Man erhält somit

$$\text{APE} \quad \approx \quad C + \frac{A\varkappa}{2\Gamma_d p_0^{\varkappa}} \int_{\overline{\theta_S}}^{\infty} \overline{p}^{1+\varkappa} \overline{\left(\frac{p'}{\overline{p}}\right)^2} d\theta. \tag{3.332}$$

Nun wird dies wieder ins p-System rücktransformiert. Hierzu verwendet man

$$p \quad \approx \quad \overline{p}\,(\theta\,(p)) \Rightarrow p' \approx \theta' \frac{\partial \overline{p}}{\partial \theta}. \tag{3.333}$$

Somit erhält man

$$\begin{aligned}
\text{APE} \quad &\approx \quad C + \frac{A\varkappa}{2\Gamma_d p_0^{\varkappa}} \int_{\overline{\theta_S}}^{\infty} \overline{p}^{\varkappa-1} \overline{\left(\theta' \frac{\partial \overline{p}}{\partial \theta}\right)^2} d\theta = C + \frac{A\varkappa}{2\Gamma_d p_0^{\varkappa}} \int_{\overline{\theta_S}}^{\infty} \overline{p}^{\varkappa-1} \overline{\theta'^2} \left(\frac{\partial \overline{p}}{\partial \theta}\right)^2 d\theta \\
&\approx \quad C - \frac{A\varkappa}{2\Gamma_d p_0^{\varkappa}} \int_{\overline{p_S}}^{0} \overline{p}^{\varkappa-1} \overline{\theta}^2 \overline{\left(\frac{\theta'}{\overline{\theta}}\right)^2} \left(\frac{\partial \overline{\theta}}{\partial p}\right)^{-1} dp = C - \frac{A\varkappa}{2\Gamma_d} \int_{\overline{p_S}}^{0} \frac{1}{\overline{p}} \overline{\theta}\,\overline{T} \overline{\left(\frac{T'}{\overline{T}}\right)^2} \left(\frac{\partial \overline{\theta}}{\partial p}\right)^{-1} dp \\
&= \quad C - \frac{A}{2} \int_{\overline{p_S}}^{0} \frac{\varkappa \overline{\theta}}{\Gamma_d \overline{p}} \left(\frac{\partial \overline{\theta}}{\partial p}\right)^{-1} \overline{T} \overline{\left(\frac{T'}{\overline{T}}\right)^2} dp.
\end{aligned} \tag{3.334}$$

Nach Glg. (3.216) gilt

$$\frac{\Gamma_d \overline{p}}{\varkappa \overline{\theta}} \frac{\partial \overline{\theta}}{\partial p} \approx \overline{\frac{\Gamma_d p}{\varkappa \theta} \frac{\partial \theta}{\partial p}} = -\left(\Gamma_d - \overline{\Gamma}\right), \tag{3.335}$$

also

$$\text{APE} \approx C + \frac{A}{2} \int_{\overline{p_S}}^{0} \frac{\overline{T}}{\Gamma_d - \overline{\Gamma}} \overline{\left(\frac{T'}{\overline{T}}\right)^2} dp. \tag{3.336}$$

Nimmt man einen klimatologischen Wert $\overline{\Gamma} \approx \frac{2}{3}\Gamma_d$ und vernachlässigt C, um eine Abschätzung vorzunehmen, folgt

$$\text{APE} \approx \frac{3Ac^{(p)}}{2g} \int_{\overline{p_S}}^{0} \overline{T} \overline{\left(\frac{T'}{\overline{T}}\right)^2} dp. \tag{3.337}$$

Für A wählt man die gesamte Erdoberfläche und setzt $T' \sim 15$ K, $\overline{T} \sim 270$ K an, dann folgen

$$\frac{\text{APE}/A}{\text{KE}} \quad \sim \quad \frac{3\overline{T'^2} c^{(p)}}{\overline{T} \boldsymbol{v}_h^2} \sim 25. \tag{3.338}$$

Es bleibt in diesem Abschnitt eine offene Frage, warum der größte Anteil der verfügbaren potentiellen Energie nicht in kinetische Energie umgewandelt wird.

3.8 Anwendung des Hamilton-Formalismus auf die Atmosphäre

3.8.1 Trockene Atmosphäre

Die Hamilton-Funktion H einer trockenen Atmosphäre $A \subseteq \mathbb{R}^3$ lautet mit den generalisierten Zustandskoordianten $\boldsymbol{v}, \varrho, \tilde{T} := \varrho T$

$$\boxed{H = H\left(\boldsymbol{v}, \varrho, \tilde{T}\right) = \int_A \frac{1}{2}\varrho \boldsymbol{v}^2 + \varrho\varphi + c_d^{(v)} \tilde{T} d^3 r.} \tag{3.339}$$

Die Funktionalableitungen hiervon sind

$$\frac{\delta H}{\delta \boldsymbol{v}} = \varrho \boldsymbol{v}, \tag{3.340}$$

$$\frac{\delta H}{\delta \varrho} = \frac{1}{2}\boldsymbol{v}^2 + \varphi, \tag{3.341}$$

$$\frac{\delta H}{\delta \widetilde{T}} = c_d^{(v)}. \tag{3.342}$$

Sei F ein beliebiges Funktional der atmosphärischen Zustandsvariablen. Die Zeitentwicklung von F lässt sich laut Glg. (2.91) mittels der Poisson-Klammer als

$$\frac{dF}{dt} = \{F, H\} + \frac{\partial F}{\partial t}. \tag{3.343}$$

notieren. Hängt F nicht explizit von der Zeit ab, was im Regelfall so ist, folgt

$$\boxed{\frac{dF}{dt} = \{F, H\}\,.} \tag{3.344}$$

In einer trockenen Atmosphäre gilt also für jede beliebige Größe F die Evolutionsgleichung

$$\frac{dF}{dt} = \{F, H\} + (F, \boldsymbol{f}_r) + (F, Q) \tag{3.345}$$

mit

$$\{F, H\} = -\int_A \frac{\delta F}{\delta \boldsymbol{v}} \cdot \left(\frac{\boldsymbol{\eta}}{\varrho} \times \frac{\delta H}{\delta \boldsymbol{v}}\right) d^3r \tag{3.346}$$

$$-\int_A \frac{\delta F}{\delta \varrho} \nabla \cdot \frac{\delta H}{\delta \boldsymbol{v}} - \frac{\delta H}{\delta \varrho} \nabla \cdot \frac{\delta F}{\delta \boldsymbol{v}} d^3r \tag{3.347}$$

$$-\int_A \frac{\partial F}{\partial \widetilde{q}} \nabla \cdot \left(q \frac{\partial H}{\partial \boldsymbol{v}}\right) - \frac{\partial H}{\partial \widetilde{q}} \nabla \cdot \left(q \frac{\delta F}{\delta \boldsymbol{v}}\right) d^3r \tag{3.348}$$

und

$$(F, \boldsymbol{f}_r) = -\int_A \frac{\delta F}{\delta \boldsymbol{v}} \cdot \frac{1}{\varrho} \nabla \cdot \overline{\varrho \boldsymbol{v}' \boldsymbol{v}'} d^3r, \tag{3.349}$$

$$(F, Q) = \int_A \frac{\partial F}{\partial \widetilde{q}} \frac{q_T^{(\mathrm{diss})} q}{T c_d^{(p)}} d^3r, \tag{3.350}$$

$$q_T^{(\mathrm{diss})} = -\boldsymbol{v} \cdot \nabla \cdot \overline{\varrho \boldsymbol{v}' \boldsymbol{v}'}. \tag{3.351}$$

3.8.1.1 Potentielle Temperatur als prognostische Variable

Verwendet man anstatt der Temperatur die potentielle Temperatur und definiert

$$\widetilde{q} := \varrho \theta, \tag{3.352}$$

folgt mit Glg. (3.225)

$$\begin{aligned} H &= H\left(\boldsymbol{v}, \varrho, \tilde{\theta}\right) = \int_A \frac{1}{2}\varrho \boldsymbol{v}^2 + \varrho\varphi + c_d^{(v)} \frac{p\left(\varrho, \tilde{\theta}\right)}{R_d} d^3r \\ &= \int_A \frac{1}{2}\varrho \boldsymbol{v}^2 + \varrho\varphi + c_d^{(v)} \frac{p_0}{R_d} \left(\frac{R_d \tilde{\theta}}{p_0}\right)^{\varkappa} d^3r. \end{aligned} \tag{3.353}$$

Die Funktionalableitungen hiervon sind

$$\frac{\delta H}{\delta \boldsymbol{v}} = \varrho \boldsymbol{v}, \tag{3.354}$$

$$\frac{\delta H}{\delta \varrho} = \frac{1}{2}\boldsymbol{v}^2 + \varphi, \tag{3.355}$$

$$\frac{\delta H}{\delta \tilde{\theta}} = c_d^{(v)} \frac{p_0}{R_d} \frac{R_d}{p_0} \varkappa \left(\frac{R_d \tilde{\theta}}{p_0}\right)^{\varkappa - 1} = c_d^{(p)} \left(\frac{R_d \tilde{\theta}}{p_0}\right)^{\varkappa - 1} = c_d^{(p)} \left(\frac{R_d \tilde{\theta}}{p_0}\right)^{\frac{R_d}{c_d^{(v)}}} \overset{\text{Glg. (3.232)}}{=} c_d^{(p)} \Pi. \tag{3.356}$$

Nun sollen die Zeitentwicklungen der Größen

$$B := \int_A \widetilde{I} + \varrho\varphi d^3 r = \int_A \varrho\varphi + c_d^{(v)} \varrho T d^3 r = \int_A \varrho\varphi + c_d^{(v)} \frac{p_0}{R_d} \left(\frac{R_d \tilde{\theta}}{p_0}\right)^{\varkappa} d^3 r \tag{3.357}$$

und

$$C := \int_A \frac{1}{2} \varrho \boldsymbol{v}^2 d^3 r \tag{3.358}$$

in Termen der Poisson-Klammer mit der Hamilton-Funktion H notiert werden. Dazu rechnet man vorbereitend

$$\frac{\delta B}{\delta \boldsymbol{v}} = 0, \tag{3.359}$$

$$\frac{\delta B}{\delta \varrho} = \varphi, \tag{3.360}$$

$$\frac{\delta B}{\delta \tilde{\theta}} = c_d^{(v)} \Pi, \tag{3.361}$$

$$\frac{\delta C}{\delta \boldsymbol{v}} = \varrho \boldsymbol{v}, \tag{3.362}$$

$$\frac{\delta C}{\delta \varrho} = \frac{1}{2}\boldsymbol{v}^2, \tag{3.363}$$

$$\frac{\delta C}{\delta \tilde{\theta}} = 0 \tag{3.364}$$

und erhält somit

$$\{B, H\} = -\int_A \frac{\delta B}{\delta \boldsymbol{v}} \cdot \left(\frac{\boldsymbol{\eta}}{\varrho} \times \frac{\delta H}{\delta \boldsymbol{v}}\right) d^3 r \tag{3.365}$$

$$-\int_A \frac{\delta B}{\delta \varrho} \nabla \cdot \frac{\delta H}{\delta \boldsymbol{v}} - \frac{\delta H}{\delta \varrho} \nabla \cdot \frac{\delta B}{\delta \boldsymbol{v}} d^3 r \tag{3.366}$$

$$-\int_A \frac{\partial B}{\partial \widetilde{q}} \nabla \cdot \left(q \frac{\partial H}{\partial \boldsymbol{v}}\right) - \frac{\partial H}{\partial \widetilde{q}} \nabla \cdot \left(q \frac{\delta B}{\delta \boldsymbol{v}}\right) d^3 r$$

$$= -\int_A \varphi \nabla \cdot \left(\varrho \boldsymbol{v}\right) + c_d^{(p)} \Pi \nabla \cdot \left(\tilde{\theta} \boldsymbol{v}\right) d^3 r, \tag{3.367}$$

$$\{C, H\} = -\int_A \frac{\delta C}{\delta \boldsymbol{v}} \cdot \left(\frac{\boldsymbol{\eta}}{\varrho} \times \frac{\delta H}{\delta \boldsymbol{v}}\right) d^3 r \tag{3.368}$$

$$-\int_A \frac{\delta C}{\delta \varrho} \nabla \cdot \frac{\delta H}{\delta \boldsymbol{v}} - \frac{\delta H}{\delta \varrho} \nabla \cdot \frac{\delta C}{\delta \boldsymbol{v}} d^3 r \tag{3.369}$$

$$-\int_A \frac{\partial C}{\partial \widetilde{q}} \nabla \cdot \left(q \frac{\partial H}{\partial \boldsymbol{v}}\right) - \frac{\partial H}{\partial \widetilde{q}} \nabla \cdot \left(q \frac{\delta C}{\delta \boldsymbol{v}}\right) d^3 r$$

$$= -\int_A -\varphi \nabla \cdot \left(\varrho \boldsymbol{v}\right) - c_d^{(p)} \Pi \nabla \cdot \left(\tilde{\theta} \boldsymbol{v}\right) d^3 r = -\int_A \varrho \boldsymbol{v} \cdot \nabla \varphi + c_d^{(p)} \tilde{\theta} \boldsymbol{v} \cdot \nabla \Pi d^3 r. \tag{3.370}$$

3.8.1.2 Entropdiedichte als prognostische Variable

Verwendet man anstatt der potentiellen Temperatur die Entropie und definiert

$$\tilde{s} := \varrho s, \tag{3.371}$$

folgt mit Glg. (3.225)

$$\begin{aligned}
H &= H\left(\boldsymbol{v}, \varrho, \tilde{\theta}\right) = \int_A \frac{1}{2}\varrho \boldsymbol{v}^2 + \varrho\varphi + c_d^{(v)} \frac{s\left(\varrho, \tilde{\theta}\right)}{R_d} d^3r \\
&= \int_A \frac{1}{2}\varrho \boldsymbol{v}^2 + \varrho\varphi + c_d^{(v)} \frac{p_0}{R_d} \left(\frac{R_d \varrho \theta}{p_0}\right)^{\varkappa} d^3r \\
&\overset{\text{Glg. (3.256)}}{=} \int_A \frac{1}{2}\varrho \boldsymbol{v}^2 + \varrho\varphi + c_d^{(v)} \frac{p_0}{R_d} \left(\frac{R_d \varrho \exp\left(-\frac{c}{c_d^{(p)}}\right) \exp\left(\frac{\tilde{s}}{c_d^{(p)}\varrho}\right)}{p_0}\right)^{\varkappa} d^3r \\
&= \int_A \frac{1}{2}\varrho \boldsymbol{v}^2 + \varrho\varphi + c_d^{(v)} \left(\frac{R_d}{p_0}\right)^{\frac{R_d}{c^{(v)}}} \exp\left(-\frac{c}{c_d^{(v)}}\right) \left(\varrho \exp\left(\frac{\tilde{s}}{c_d^{(p)}\varrho}\right)\right)^{\varkappa} d^3r \\
&= \int_A \frac{1}{2}\varrho \boldsymbol{v}^2 + \varrho\varphi + c_d^{(v)} \left(\frac{R_d}{p_0}\right)^{\frac{R_d}{c^{(v)}}} \exp\left(-\frac{c}{c_d^{(v)}}\right) \varrho^{\varkappa} \exp\left(\frac{\tilde{s}}{c_d^{(v)}\varrho}\right) d^3r.
\end{aligned} \tag{3.372}$$

Mit der Bezeichnungsänderung

$$c \to c_d^{(v)} \left(\frac{R_d}{p_0}\right)^{\frac{R_d}{c_d^{(v)}}} \exp\left(-\frac{c}{c_d^{(v)}}\right) \tag{3.373}$$

lässt sich dies als

$$H = \int_A \frac{1}{2}\varrho \boldsymbol{v}^2 + \varrho\varphi + c\varrho^{\varkappa} \exp\left(\frac{\tilde{s}}{c_d^{(v)}\varrho}\right) d^3r \tag{3.374}$$

notieren. Die Funktionalableitungen hiervon sind

$$\frac{\delta H}{\delta \boldsymbol{v}} = \varrho \boldsymbol{v}, \tag{3.375}$$

$$\begin{aligned}
\frac{\delta H}{\delta \varrho} &= \frac{1}{2}\boldsymbol{v}^2 + \varphi + c_d^{(p)} \left(\frac{\varrho R_d}{p_0}\right)^{\frac{R_d}{c_d^{(v)}}} \exp\left(-\frac{c}{c_d^{(v)}}\right) \exp\left(\frac{\tilde{s}}{c_d^{(v)}\varrho}\right) \\
&\quad - \frac{\tilde{s}}{\varrho}\left(\frac{\varrho R_d}{p_0}\right)^{\frac{R_d}{c_d^{(v)}}} \exp\left(-\frac{c}{c_d^{(v)}}\right) \exp\left(\frac{\tilde{s}}{c_d^{(v)}\varrho}\right), \\
&= \frac{1}{2}\boldsymbol{v}^2 + \varphi + \left(c_d^{(p)} - s\right)\left(\frac{\varrho R_d}{p_0}\right)^{\frac{R_d}{c_d^{(v)}}} \exp\left(-\frac{c}{c_d^{(v)}}\right) \exp\left(\frac{\tilde{s}}{c_d^{(v)}\varrho}\right), \\
&\overset{\text{Glg. (3.256)}}{=} \frac{1}{2}\boldsymbol{v}^2 + \varphi + \left(c_d^{(p)} - s\right)\left(\frac{\varrho R_d \theta}{p_0}\right)^{\frac{R_d}{c_d^{(v)}}} \theta, \\
&\overset{\text{Glg. (3.232)}}{=} \frac{1}{2}\boldsymbol{v}^2 + \varphi + \left(c_d^{(p)} - s\right)\Pi\theta \overset{\text{Glg. (3.231)}}{=} \frac{1}{2}\boldsymbol{v}^2 + \varphi + \left(c_d^{(p)} - s\right) T \overset{\text{Glg. (2.815)}}{=} \frac{1}{2}\boldsymbol{v}^2 + \varphi + G,
\end{aligned} \tag{3.376}$$

$$\begin{aligned}
\frac{\delta H}{\delta \tilde{s}} &= \left(\frac{\varrho R_d}{p_0}\right)^{\frac{R_d}{c_d^{(v)}}} \exp\left(-\frac{c}{c_d^{(v)}}\right) \exp\left(\frac{\tilde{s}}{c_d^{(v)}\varrho}\right) = \left[\left(\frac{\varrho R_d}{p_0}\right)^{\frac{R_d}{c_d^{(p)}}} \exp\left(-\frac{c}{c_d^{(p)}}\right) \exp\left(\frac{\tilde{s}}{c_d^{(p)}\varrho}\right)\right]^{\varkappa} \\
&= \left[\left(\frac{\varrho R_d}{p_0}\right)^{\frac{R_d}{c_d^{(p)}}} \exp\left(\frac{\tilde{s}}{c_d^{(p)}\varrho} - \frac{c}{c_d^{(p)}}\right)\right]^{\varkappa} \overset{\text{Glg. (3.256)}}{=} \left(\frac{\varrho\theta R_d}{p_0}\right)^{\frac{R_d}{c_d^{(v)}}} \theta \\
&\overset{\text{Glg. (3.232)}}{=} \Pi\theta \overset{\text{Glg. (3.231)}}{=} T.
\end{aligned} \tag{3.377}$$

G bezeichnet hierbei das spezifische Gibbs-Potential. Nun sollen die Zeitentwicklungen der Größen

$$B := \int_A \widetilde{I} + \varrho\varphi d^3 r = \int_A \varrho\varphi + c_d^{(v)} \varrho T d^3 r = \int_A \varrho\varphi + c\varrho^{\varkappa} \exp\left(\frac{\tilde{s}}{c_d^{(v)}\varrho}\right) d^3 r \tag{3.378}$$

und

$$C := \int_A \frac{1}{2}\varrho \boldsymbol{v}^2 d^3 r \tag{3.379}$$

in Termen der Poisson-Klammer mit der Hamilton-Funktion H notiert werden. Dazu rechnet man vorbereitend

$$\frac{\delta B}{\delta \boldsymbol{v}} = 0, \tag{3.380}$$

$$\frac{\delta B}{\delta \varrho} = \varphi + G, \tag{3.381}$$

$$\frac{\delta B}{\delta \tilde{s}} = T, \tag{3.382}$$

$$\frac{\delta C}{\delta \boldsymbol{v}} = \varrho \boldsymbol{v}, \tag{3.383}$$

$$\frac{\delta C}{\delta \varrho} = \frac{1}{2}\boldsymbol{v}^2, \tag{3.384}$$

$$\frac{\delta C}{\delta \tilde{s}} = 0 \tag{3.385}$$

und erhält somit

$$
\begin{aligned}
\{B,H\} &= -\int_A \frac{\delta B}{\delta \boldsymbol{v}} \cdot \left(\frac{\boldsymbol{\eta}}{\varrho} \times \frac{\delta H}{\delta \boldsymbol{v}}\right) d^3r && (3.386)\\
&\quad -\int_A \frac{\delta B}{\delta \varrho} \nabla \cdot \frac{\delta H}{\delta \boldsymbol{v}} - \frac{\delta H}{\delta \varrho} \nabla \cdot \frac{\delta B}{\delta \boldsymbol{v}} d^3r && (3.387)\\
&\quad -\int_A \frac{\partial B}{\partial \tilde{s}} \nabla \cdot \left(s \frac{\partial H}{\partial \boldsymbol{v}}\right) - \frac{\partial H}{\partial \tilde{s}} \nabla \cdot \left(q \frac{\delta B}{\delta \boldsymbol{v}}\right) d^3r \\
&= -\int_A \frac{\delta B}{\delta \varrho} \nabla \cdot (\varrho \boldsymbol{v}) + \frac{\partial B}{\partial \tilde{s}} \nabla \cdot (s\varrho \boldsymbol{v})\, d^3r = -\int_A \left(\varphi + c_d^{(p)} T - sT\right) \nabla \cdot (\varrho \boldsymbol{v}) + T \nabla \cdot (s\varrho \boldsymbol{v})\, d^3r \\
&= -\int_A (\varphi + G)\, \nabla \cdot (\varrho \boldsymbol{v}) + T \nabla \cdot (\tilde{s} \boldsymbol{v})\, d^3r, && (3.388)
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
\{C,H\} &= -\int_A \frac{\delta C}{\delta \boldsymbol{v}} \cdot \left(\frac{\boldsymbol{\eta}}{\varrho} \times \frac{\delta H}{\delta \boldsymbol{v}}\right) d^3r && (3.389)\\
&\quad -\int_A \frac{\delta C}{\delta \varrho} \nabla \cdot \frac{\delta H}{\delta \boldsymbol{v}} - \frac{\delta H}{\delta \varrho} \nabla \cdot \frac{\delta C}{\delta \boldsymbol{v}} d^3r && (3.390)\\
&\quad -\int_A \frac{\partial C}{\partial \tilde{s}} \nabla \cdot \left(s \frac{\partial H}{\partial \boldsymbol{v}}\right) - \frac{\partial H}{\partial \tilde{s}} \nabla \cdot \left(s \frac{\delta C}{\delta \boldsymbol{v}}\right) d^3r \\
&= -\int_A \frac{\delta C}{\delta \varrho} \nabla \cdot \frac{\delta H}{\delta \boldsymbol{v}} - \frac{\delta H}{\delta \varrho} \nabla \cdot \frac{\delta C}{\delta \boldsymbol{v}} - \frac{\partial H}{\partial \tilde{s}} \nabla \cdot \left(s \frac{\delta C}{\delta \boldsymbol{v}}\right) d^3r \\
&= -\int_A \frac{\delta C}{\delta \varrho} \nabla \cdot (\varrho \boldsymbol{v}) - \frac{\delta H}{\delta \varrho} \nabla \cdot (\varrho \boldsymbol{v}) - T \nabla \cdot (s\varrho \boldsymbol{v})\, d^3r \\
&= -\int_A -(\varphi + G)\, \nabla \cdot (\varrho \boldsymbol{v}) - T \nabla \cdot (\tilde{s} \boldsymbol{v})\, d^3r \\
&= \int_A (\varphi + G)\, \nabla \cdot (\varrho \boldsymbol{v}) - \tilde{s} \boldsymbol{v} \cdot \nabla T d^3r \\
&= \int_A -\varrho \boldsymbol{v} \cdot \nabla (\varphi + G) - \varrho \boldsymbol{v} \cdot (s \nabla T)\, d^3r. && (3.391)
\end{aligned}
$$

Hieraus erhält man als Ausdruck für die Druckgradientbeschleunigung

$$
\boxed{-\frac{1}{\varrho} \nabla p = -\nabla G - s \nabla T. \qquad (3.392)}
$$

Dies wird auch durch

$$
\begin{aligned}
-\nabla G - s \nabla T &= -c_d^{(p)} \nabla T + T \nabla s = -c_d^{(p)} \nabla T + T c_d^{(p)} \nabla \ln(\theta) \\
&= -c_d^{(p)} \nabla T + \frac{T}{\theta} c_d^{(p)} \nabla \theta = -c_d^{(p)} \theta \nabla \frac{T}{\theta} = -c_d^{(p)} \theta \nabla \Pi && (3.393)
\end{aligned}
$$

bestätigt.

3.9 Konkretisierung der Wärmeflüsse

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).

3.9.1 Wärmeleitung

Wärmeleitung tritt nur in der Gasphase und führt nach Glg. (2.884) zu einer Temperaturtendenz

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \varkappa_h \Delta T \tag{3.394}$$

mit $\varkappa_h$ als Temperaturleitfähigkeit der feuchten Luft.

3.9.2 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

$$q_i' = c_{i,v} \left(\widetilde{q}_{v,i}' - \widetilde{q}_{i,v}' \right) \tag{3.395}$$

für die auf die Komponente i wirkende Wärmeleistung pro Volumen, hierbei ist $c_{i,v}$ die Phasenumwandlungsenthalpie 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]

$$q_i'' = c_{i,v} \left(\widetilde{q}_{v,i}'' - \widetilde{q}_{i,v}'' \right) \tag{3.396}$$

Im dritten Fall wandeln sich Kondensate ineinander um. Hierfür gilt

$$q_i''' = \sum_j c_{i,j} \widetilde{q}_{j,i}''' - c_{i,j} \widetilde{q}_{i,j}'''. \tag{3.397}$$

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

$$q_i = q_i' + q_i'' + q_i'''. \tag{3.398}$$

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.

3.9.3 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

$$s = \xi \Delta T \tag{3.399}$$

[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.

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

$$q_i = n_i A_i \xi_i \left(T - T_i\right). \tag{3.400}$$

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

$$q_h = \sum_i n_i A_i \xi_i \left(T_i - T\right). \tag{3.401}$$

3.9.4 Dissipation

Der Reibungsterm $\boldsymbol{F}_R$ dissipiert spezifische kinetische Energie $k = \frac{1}{2}\boldsymbol{v}^2$ in thermische Energie $u = c^{(v)}T$. Wäre nur der Reibungsterm wirksam, würde die Impulsgleichung

$$\frac{\partial \boldsymbol{v}}{\partial t} + \left(\boldsymbol{v} \cdot \nabla\right)\boldsymbol{v} = \boldsymbol{F}_R \tag{3.402}$$

lauten. Für die materielle Änderung der spezifischen kinetischen Energie k gilt in diesem Fall

$$\frac{Dk}{Dt} = \frac{D}{Dt}\left(\frac{1}{2}\boldsymbol{v}^2\right) = \boldsymbol{v} \cdot \frac{D\boldsymbol{v}}{Dt} = \boldsymbol{v} \cdot \boldsymbol{F}_R. \tag{3.403}$$

Um energetische Konsistenz zu gewährleisten, setzt man daher

$$q_{\text{diss}} \frac{1}{\varrho} = \frac{Du}{Dt} = -\frac{Dk}{Dt} = -\boldsymbol{v} \cdot \boldsymbol{F}_R \tag{3.404}$$

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:

$$q_{\text{diss},i} = -\varrho_i \boldsymbol{v} \cdot \boldsymbol{F}_R \tag{3.405}$$

Dann ergibt sich die Gesamt-Leistungsdichte zu

$$q_{\text{diss}} = q_h + \sum_i q_{\text{diss},i} = -\left[\varrho_h + \sum_i \varrho_i\right]\boldsymbol{v} \cdot \boldsymbol{F}_R = -\varrho \boldsymbol{v} \cdot \boldsymbol{F}_R, \tag{3.406}$$

was wieder Glg. (3.404) entspricht.

3.9.5 Strahlungsübertragungsgleichung

Das Poynting-Theorem Glg. (2.145) ist eine Kontinuitätsgleichung für die Strahlungsflussdichte $\boldsymbol{S}$. Die Herleitung ist klassisch, $-\boldsymbol{j} \cdot \boldsymbol{E}$ ist die Leistung, die das Feld an beweglichen Ladungen verrichtet. Man kann die Gleichung notieren als

$$\frac{1}{v_h}\left(P_{\text{Feld}} + P_{\text{Ladungen}}\right) = -\nabla \cdot \boldsymbol{S}, \tag{3.407}$$

dabei sind $P_{\text{Feld}} = \frac{\partial w}{\partial t}$ die lokalzeitliche Ableitung der Energiedichte und $\boldsymbol{j} \cdot \boldsymbol{E}$ 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

$$\frac{1}{v_h}\left(P_{\text{Feld}} + P_{\text{Materie}}\right) = -\nabla \cdot \boldsymbol{S}. \tag{3.408}$$

Es ist $P_{\text{Feld}} \ll P_{\text{Materie}}$ und daher kann man in guter Näherung

$$\frac{1}{v_h} P_{\text{Materie}} = -\nabla \cdot \boldsymbol{S}. \tag{3.409}$$

setzen.

Das Planck'sche Strahlungsgesetz Glg. (2.939) wurde bisher als Funktion der Kreisfrequenz ω formuliert. Bei Spektren verwendet man jedoch meist die Wellenlänge λ als unabhängige Größe. Es gilt

$$c = \frac{\lambda}{T} \Rightarrow \lambda = cT = \frac{2\pi c}{\frac{2\pi}{T}} = \frac{2\pi c}{\omega} \Rightarrow \omega = \frac{2\pi c}{\lambda}. \tag{3.410}$$

Mit der Forderung

$$u(\omega)\, d\omega \overset{!}{=} u(\lambda)\, d\lambda \tag{3.411}$$

folgt

$$u(\lambda) = u(\omega(\lambda)) \left| \frac{d\omega}{d\lambda} \right| = \frac{\hbar 8\pi^3 c^3}{\pi^2 c^3 \lambda^3} \frac{1}{\exp\left(\frac{\hbar 2\pi c}{k_B T \lambda}\right) - 1} \frac{2\pi c}{\lambda^2} = \frac{8\pi c h}{\lambda^5} \frac{1}{\exp\left(\frac{hc}{k_B T \lambda}\right) - 1}. \tag{3.412}$$

Für die spektrale Strahldichte der Schwarzkörperstrahlung gilt L_B folgt

$$L_B(\lambda, T) = \frac{2hc^2}{\lambda^5} \frac{1}{\exp\left(\frac{hc}{k_B T \lambda}\right) - 1}. \tag{3.413}$$

Die spektrale Strahldichte in der Atmosphäre hängt ab vom Ort, der Richtung und der Wellenlänge, also $L = L(\boldsymbol{r}, \lambda, \vartheta, \varphi)$. Hieraus ergibt sich das Feld der spektralen Strahlungsflussdichte $\boldsymbol{S}_\lambda$ zu

$$\boldsymbol{S}_\lambda(\boldsymbol{r}, \lambda) = \int_0^{2\pi} \int_0^{\pi} L(\boldsymbol{r}, \lambda, \vartheta, \varphi)\, \boldsymbol{e}(\vartheta, \varphi) \sin(\vartheta)\, d\vartheta d\varphi \tag{3.414}$$

mit $\boldsymbol{e}(\vartheta, \varphi)$ 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 eigene spektrale Leistungsdichte q_j. Man macht sich schnell klar, dass beim Durchtritt durch Materie für die Änderung der spektralen Strahldichte gilt

$$dL(\Omega) \propto \varrho_j, \tag{3.415}$$

$$dL(\Omega) \propto ds, \tag{3.416}$$

hierbei ist Ω ein Raumwinkelelement. Hieraus kann man folgern:

$$dL(\Omega) = \overbrace{-\varrho_j k_j L ds}^{\text{Absorption}} + \overbrace{\varrho_j k_j L_B ds}^{\text{Emission}} + \overbrace{ds \varrho_j \int_{4\pi} s_j(\Omega', \Omega)\, L(\Omega')\, d\Omega'}^{\text{Zustreuung aus anderen Raumrichtungen}} - \overbrace{ds \varrho_j L(\Omega) \int_{4\pi} s_j(\Omega, \Omega')\, d\Omega'}^{\text{Wegstreuung in andere Raumrichtungen}}$$

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:

$$\boxed{\begin{aligned} dL(\Omega) &= ds\,(L_B - L(\Omega)) \sum_j \left(k_j \varrho_j\right) + ds \sum_i \varrho_j \int_{4\pi} s_j(\Omega', \Omega)\, L(\Omega')\, d\Omega' \\ &\quad - ds \sum_j \varrho_j L(\Omega) \int_{4\pi} s_j(\Omega, \Omega')\, d\Omega'. \end{aligned}} \tag{3.417}$$

Dies ist die *Strahlungsübertragungsgleichung*. Für die auf die Komponente i wirkende Heizrate gilt dann

$$q_j = \int_0^{\infty} (\nabla \cdot \boldsymbol{S}_\lambda)_j\, d\lambda. \tag{3.418}$$

3.9.6 Randbedingungen

An der Erdoberfläche gilt

$$\boldsymbol{j}_v \cdot \boldsymbol{n} = E + S - R - C, \tag{3.419}$$

hierbei stehen $\boldsymbol{n}$ 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 $\boldsymbol{j}_v$.

Die Randbedingungen in der Strahlungsübertragungsgleichung lauten

$$\boldsymbol{S}_{\text{in}} = S_{\text{o}} \boldsymbol{e}_{\text{Sonne} \to \text{Erde}} \tag{3.420}$$

am Oberrand sowie

$$L(\lambda, \vartheta, \varphi) = \varepsilon(\lambda, \vartheta, \varphi, T) L_B(\lambda, \vartheta, \varphi, T) \tag{3.421}$$

Weiterhin ist

$$\xi_{\text{SFC}} (T_{\text{SFC}} - T) \tag{3.422}$$

die Wärmeflussdichte, die als Randbedingung an der Oberfläche im Ersten Hauptsatz für feuchte Luft auftritt.

3.10 Zusammenstellung der herrschenden Gleichungen

$$
\begin{aligned}
\forall\left(i \in \{\text{gasförmige Bestandteile der Luft}\}\right) \frac{D\boldsymbol{v}_i}{Dt} &= -\frac{1}{\varrho}\nabla p + \boldsymbol{v}_i \times \boldsymbol{f} + \boldsymbol{g} + r\Delta\boldsymbol{v}_g \\
\forall\left(i \in \{\text{Kondensatklassen}\}\right) \boldsymbol{j}_i &= \varrho_i \boldsymbol{v} - \boldsymbol{k}\varrho_i v_i \\
p &= T_g R_g \varrho_g' \\
c_g^{(v)} \frac{DT}{Dt} + p\frac{D}{Dt}\left[\frac{1 - \sum_{j\in\{\text{Kondensatklassen}\}} \frac{\varrho_j}{\varrho_j'}}{\varrho_g}\right] &= \frac{q_g}{\varrho_g} \\
\frac{\partial \varrho_d}{\partial t} + \nabla\cdot\boldsymbol{j}_d &= 0 \\
\forall\left(i \in \{\text{Tracerklassen}\}\right) \frac{\partial \varrho_i}{\partial t} + \nabla\cdot\boldsymbol{j}_i &= Q_i \\
\forall\left(i \in \{\text{Kondensatklassen}\}\right) c_i^{(v)} \frac{DT}{Dt} &= \frac{q_i}{\varrho_i} \\
dL(\Omega) &= ds\left(L_B - L(\Omega)\right) \sum_{j\in\{d,v,i\}} \left(k_j \varrho_j\right) \\
&\quad + ds \sum_{j\in\{d,v,i\}} \varrho_j \int_{4\pi} s_j(\Omega',\Omega)\, L(\Omega')\, d\Omega' \\
&\quad - ds \sum_{j\in\{d,v,i\}} \varrho_j L(\Omega) \int_{4\pi} s_j(\Omega,\Omega')\, d\Omega'
\end{aligned}
$$

<u>Randbedingungen</u>

$$
\begin{aligned}
\boldsymbol{v}\cdot\boldsymbol{n} &= 0 \text{ am Oberrand} \\
\varrho_i &= 0 \text{ am Oberrand} \\
\boldsymbol{v}\cdot\boldsymbol{n} &= 0 \text{ am Unterrand} \\
\boldsymbol{S}_{\text{in}} &= S_0 \boldsymbol{e}_{\text{Sonne}\to\text{Erde}} \text{ am Oberrand} \\
\boldsymbol{j}_v\cdot\boldsymbol{n} &= E + S - R - C \text{ am Unterand} \\
L(\lambda,\vartheta,\varphi,T) &= \varepsilon(\lambda,\vartheta,\varphi,T)\, L_B(\lambda,\vartheta,\varphi,T) \text{ am Uberrand} \\
\tau_{\text{SFC}}\left(T_{\text{SFC}} - T\right) &= \text{ Wärmedurchgang am Unterrand}
\end{aligned}
$$

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/s², während die Vertikalbeschleunigung in der Größenordnung 10^{-7} m/s^2 liegt. Die Glg.

$$\boxed{\frac{\boldsymbol{g}}{g} \cdot \nabla p = \varrho \boldsymbol{g} \overset{\substack{\text{radialsymmetrisches} \\ \text{Schwerefeld}}}{\Rightarrow} \frac{\partial p}{\partial z} = -g\varrho, \tag{4.1}}$$

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

$$\frac{\boldsymbol{g}}{g} \cdot \nabla p = \varrho \boldsymbol{g} \Rightarrow w = 0. \tag{4.2}$$

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 immernoch 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 $\{\overline{a}, \overline{p}\}$ einführen mit $a := \frac{1}{\varrho}$ als spezifischem Volumen, der Glg. (4.1) erfüllt, und die tatsächlichen Größen $\{a, p\}$ als Übelagerung des Grundzustandes mit Abweichungen $\{a', p'\}$ zu notieren, also

$$a = \overline{a} + a', \tag{4.3}$$
$$p = \overline{p} + p'. \tag{4.4}$$

Dann gilt

$$-a\nabla p + \boldsymbol{g} = -a'\nabla\overline{p} - \overline{a}\nabla p' - a'\nabla p' = -a'\nabla p - \overline{a}\nabla p' = -a\nabla p' - a'\nabla\overline{p}. \tag{4.5}$$

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

$$\frac{\partial p}{\partial \varphi} = \frac{\partial p}{\partial z}\frac{\partial z}{\partial \varphi} = -\varrho. \tag{4.6}$$

Die SI-Einheit des Geopotentials ist m²/s². Ein Geopotentialmeter gpm ist definiert durch

$$1 \text{ gpm} := 9{,}8 \text{ m}^2/\text{s}^2, \tag{4.7}$$

sodass

$$\frac{z}{\text{m}} = \frac{\varphi/g}{\text{m}} \approx \frac{\varphi}{\text{gpm}} \tag{4.8}$$

gilt. Möchte man die Höhenabhängigkeit der Schwerebeschleunigung berücksichtigen, so verwendet man hierfür

als Formel für das Gravitationspotential zunächst

$$\varphi_g(r) = -\frac{\varphi_0 a}{r} + \varphi_0 \tag{4.9}$$

mit $\varphi_0 := GM/a$ mit G als Newton'scher Gravitationskonstante und M als Erdmasse. Dies ist die Formel für das Schwerefeld eines Planeten mit radialsymmatrischer 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

$$g = \frac{\varphi_0 a}{r^2} = g_0 \frac{a^2}{r^2} \tag{4.10}$$

mit $g_0 := \frac{\varphi_0}{a}$. In dieser Approximation fordert man für die generalisierte Vertikalkoordinate geopotentielle Höhe z_g, dass gilt

$$g_0 z_g \stackrel{!}{=} \varphi_g(a+z) = -\frac{\varphi_0 a}{a+z} + \varphi_0 \Rightarrow z_g = -\frac{a^2}{a+z} + a = \frac{-a^2 + a^2 + za}{a+z} = \frac{z}{1+\frac{z}{a}}. \tag{4.11}$$

Hieraus folgt weiterhin

$$\begin{aligned} \frac{\partial p}{\partial z} &= \frac{z_g}{z}\frac{\partial p}{\partial z_g} = \left(\frac{1}{1+\frac{z}{a}} - \frac{z}{a}\frac{1}{\left(1+\frac{z}{a}\right)^2}\right)\frac{\partial p}{\partial z_g} = \frac{1}{\left(1+\frac{z}{a}\right)^2}\frac{\partial p}{\partial z_g} = \frac{a^2}{r^2}\frac{\partial p}{\partial z_g} = -g\varrho = -g_0\frac{a^2}{r^2}\varrho \\ \Rightarrow \frac{\partial p}{\partial z_g} &= -g_0\varrho. \end{aligned} \tag{4.12}$$

Bezieht man die Fliehbeschleunigung $-\boldsymbol{\omega}\times(\boldsymbol{\omega}\times\boldsymbol{r})$ und/oder die eher ellipsoidische Form der Erde mit ein, sind die Äquipotentialflächen keine Kugelschalen mehr, s. Absch. D.3.2. Rechnet man die Fliehbeschleunigung betragsmäßig approximativ in g_0 hinein und verwendet weiterhin eine sphärische Approximation des Schwerefeldes, spricht man von der *spherical geopotential approximation (SGA)*.

Verwendet man den Druck als Höhenkoordinate und das Geopotential als die abhängige Koordinate, transformiert man also $p(\varphi)$ auf $\varphi(p)$, so lautet die hydrostatische Grundgleichung

$$\frac{\partial\varphi}{\partial p} = -a \tag{4.13}$$

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 $\nabla\varrho$ 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. (3.167) unter Annahme von Barotropie nach p ab, erhält man

$$\frac{\partial}{\partial p}\frac{Du}{Dt} = -\frac{\partial}{\partial p}\frac{\partial\varphi}{\partial x} + f\frac{\partial v}{\partial p} = -\frac{\partial}{\partial x}\frac{\partial\varphi}{\partial p} + f\frac{\partial v}{\partial p} = f\frac{\partial v}{\partial p}. \tag{4.14}$$

Es gilt außerdem

$$\frac{\partial}{\partial p}\frac{Du}{Dt} = \frac{\partial}{\partial p}\left(\frac{\partial u}{\partial t} + u\frac{\partial u}{\partial x} + v\frac{\partial u}{\partial y} + \omega\frac{\partial u}{\partial p}\right), \tag{4.15}$$

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}

Tabelle 4.1: Skalierung der horizontalen Impulsgleichung auf der synoptischen Skala.

hieraus folgt

$$\frac{\partial}{\partial t}\frac{\partial u}{\partial p} = \frac{\partial}{\partial p}\frac{\partial u}{\partial t} = f\frac{\partial v}{\partial p} - \frac{\partial}{\partial p}\left(u\frac{\partial u}{\partial x} + v\frac{\partial u}{\partial y} + \omega\frac{\partial u}{\partial p}\right). \tag{4.16}$$

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. (3.164) $\frac{\partial \omega}{\partial p}$ 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

$$N_{\mathrm{Ro}} := \frac{U^2}{LfU} = \frac{v}{Lf} \sim 10^{-1} \tag{4.17}$$

auf der synoptischen Skala. In erster Ordnung liegt also ein Kräftegleichgewicht aus Coriolis-Kraft und Druckgradientkraft vor. Dies ist die geostrophische Approximation. Das entsprechende Windfeld $\boldsymbol{v}_h = \left(u_g, v_g\right)^T$ erhält man, indem man in den horizontalen Bewegungsgleichungen Glg.en (3.167) - (3.168) die Beschleunigung gleich Null setzt.

$$0 = -\frac{\partial \varphi}{\partial x} + fv_g \tag{4.18}$$

$$0 = -\frac{\partial \varphi}{\partial y} - fu_g \tag{4.19}$$

Stellt man dies nach der Windgeschwindigkeit um, ergeben sich

$$v_g = \frac{1}{f}\frac{\partial \varphi}{\partial x}, \tag{4.20}$$

$$u_g = -\frac{1}{f}\frac{\partial \varphi}{\partial y}. \tag{4.21}$$

Der geostrophische Wind ist also

$$\boxed{\boldsymbol{v}_{h,g} = \frac{1}{f}\begin{pmatrix} -\frac{\partial \varphi}{\partial y} \\ \frac{\partial \varphi}{\partial x} \end{pmatrix} = \boldsymbol{k} \times \frac{1}{f}\nabla\varphi.} \tag{4.22}$$

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

$$\nabla\varphi \cdot \boldsymbol{v}_{h,g} = 0, \tag{4.23}$$

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

$$\nabla \cdot \boldsymbol{v}_{h,g} = -\frac{1}{f}\frac{\partial^2 \varphi}{\partial x \partial y} + \frac{1}{f}\frac{\partial^2 \varphi}{\partial y \partial x} - \frac{\beta}{f^2}\frac{\partial \varphi}{\partial x} - \frac{v \tan(\varphi)}{r} = -\frac{\beta}{f^2}\frac{\partial \varphi}{\partial x} = -\frac{\beta}{f} v - \frac{v \tan(\varphi)}{r}. \tag{4.24}$$

Unter Verwendung der Skalen aus Tab. 1.3 folgt

$$\mathcal{O}\left(\nabla \cdot \boldsymbol{v}_{h,g}\right) = \frac{10^{-11}}{10^{-4}} 10^{1} \frac{1}{\mathrm{s}} = 10^{-6} \frac{1}{\mathrm{s}} \tag{4.25}$$

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

$$\boxed{\frac{\partial \boldsymbol{v}_{h,g}}{\partial p} = \boldsymbol{k} \times \frac{1}{f}\nabla \frac{\partial \varphi}{\partial p} = -\frac{R_d}{pf}\boldsymbol{k} \times \nabla T. \tag{4.26}}$$

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)

$$\begin{aligned}
\boldsymbol{v}_{h,g}(p_2) - \boldsymbol{v}_{h,g}(p_1) &= \int_{p_1}^{p_2} -\frac{R_d}{pf}\boldsymbol{k} \times \nabla T dp \\
\Rightarrow \boldsymbol{v}_{h,g}(p_1) &= \boldsymbol{v}_{h,g}(p_2) + \int_{p_1}^{p_2} \frac{R_d}{pf}\boldsymbol{k} \times \nabla T dp = \boldsymbol{v}_{h,g}(p_2) + \frac{R_d}{f}\int_{p_1}^{p_2} \frac{1}{p}\boldsymbol{k} \times \nabla T dp \\
&= \boldsymbol{v}_{h,g}(p_2) + \frac{R_d}{f}\ln\left(\frac{p_2}{p_1}\right)\boldsymbol{k} \times \nabla \overline{T}(p_1, p_2)
\end{aligned} \tag{4.27}$$

mit einer gewichteten Schichtmitteltemperatur

$$\overline{T}(p_1, p_2) = \frac{\int_{p_1}^{p_2} \frac{1}{p} T dp}{\int_{p_1}^{p_2} \frac{1}{p} dp}. \tag{4.28}$$

4.4 Boussinesq-Approximation

Die Kontinuitätsgleichung lautet

$$\frac{\partial \varrho}{\partial t} + \boldsymbol{v} \cdot \nabla \varrho + \varrho \nabla \cdot \boldsymbol{v} = 0. \tag{4.29}$$

Setzt man für die Dichte

$$\varrho = \varrho_0 + \varrho' \tag{4.30}$$

mit einer stationären, horizontal homogenen Schichtung $\varrho_0(z)$ und einer Fluktuation ϱ' ein, folgt

$$\frac{\partial \varrho'}{\partial t} + \varrho_0 \nabla \cdot \boldsymbol{v} + \varrho' \nabla \cdot \boldsymbol{v} + \boldsymbol{v} \cdot \nabla \varrho' + w\frac{\partial \varrho_0}{\partial z} = 0. \tag{4.31}$$

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:

$$\underbrace{\frac{\partial \varrho'}{\partial t}}_{10^{-1}} + \underbrace{\varrho_0 \nabla \cdot \boldsymbol{v}}_{10^{0}} + \underbrace{\varrho' \nabla \cdot \boldsymbol{v}}_{10^{-1}} + \underbrace{\boldsymbol{v} \cdot \nabla \varrho'}_{10^{-1}} + \underbrace{w \frac{\partial \varrho_0}{\partial z}}_{10^{-1}} = 0. \tag{4.32}$$

Hieraus folgen

$$\nabla \cdot \boldsymbol{v} = 0, \tag{4.33}$$

$$\frac{D\varrho}{Dt} = 0. \tag{4.34}$$

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

$$f(\varphi) = 2\omega \sin(\varphi). \tag{4.35}$$

Taylor-entwickelt man dies an einer Breite φ_0, erhält man

$$\begin{aligned} f(\varphi) &= f(\varphi_0) + f'(\varphi_0)(\varphi - \varphi_0) + \frac{1}{2} f''(\varphi_0)(\varphi - \varphi_0)^2 + \frac{1}{6} f'''(\varphi_0)(\varphi - \varphi_0)^2 + \mathcal{O}\left[(\varphi - \varphi_0)^4\right] \\ &= f(\varphi_0)\left[1 + \cot(\varphi_0)(\varphi - \varphi_0) - \frac{1}{2}(\varphi - \varphi_0)^2 - \frac{1}{6}\cot(\varphi_0)(\varphi - \varphi_0)^3\right], \end{aligned} \tag{4.36}$$

wobei die Terme vierter und höherer Ordnung nicht mehr mitnotiert wurden. Mit

$$y := r(\varphi - \varphi_0) \tag{4.37}$$

mit r als Abstand vom Erdmittelpunkt kann man dies als

$$f(\varphi) = f(\varphi_0)\left[1 + \cot(\varphi_0)\frac{y}{r} - \frac{y^2}{2r^2} - \frac{y^3}{6r^3}\cot(\varphi_0)\right] \tag{4.38}$$

notieren. Der *Rossby-Parameter* wird definiert durch

$$\beta(\varphi_0) := \cot(\varphi_0)\frac{f(\varphi_0)}{r} = \frac{2\omega\cos(\varphi_0)}{r} = \frac{d\varphi}{dy}\frac{df}{d\varphi} = \frac{df}{dy}. \tag{4.39}$$

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

$$f(\varphi) \approx f(\varphi_0). \tag{4.40}$$

Nach Glg. (4.38) ist dies gerechtfertigt, falls

$$B \ll r\tan(\varphi_0), \tag{4.41}$$

$$B \ll \sqrt{2}r \tag{4.42}$$

gelten. Bei der sogenannten *f-Kugel* nimmt man einen global homogenen Coriolisparameter an, was für operationelle Vorhersagen nicht geeignet ist.

4.5.2 $\beta-$Ebene

Hier setzt man die Approximation

$$f(\varphi) \approx f(\varphi_0) + \beta y \tag{4.43}$$

an. Nach Glg. (4.38) ist dies gerechtfertigt, falls

$$B \ll 2r\cot(\varphi_0), \tag{4.44}$$
$$B \ll \sqrt{6}r \tag{4.45}$$

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 Trajekorie mit Radius $R > 0$ zu bewegen, also

$$\frac{V^2}{R} = \left| |f|\, V - \frac{1}{\rho} |\nabla_h p| \right|. \tag{4.46}$$

Im zyklonalen Fall ist der Ausdruck zwischen den äußeren Betragszeichen negativ, also

$$\begin{aligned} \frac{V^2}{R} &= \frac{1}{\rho} |\nabla_h p| - |f|\, V \\ \Leftrightarrow V^2 + |f|\, VR - R\frac{1}{\rho} |\nabla_h p| &= 0 \\ \frac{V^2}{R} &= -\frac{1}{\rho} |\nabla_h p| + |f|\, V \\ \Leftrightarrow V &= -\frac{|f|\, R}{2} \pm \sqrt{\frac{f^2 R^2}{4} + R\frac{1}{\rho} |\nabla_h p|}. \end{aligned} \tag{4.47}$$

Wegen $V = |\boldsymbol{v}_h| > 0$ 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

$$\begin{aligned} \frac{V^2}{R} &= -\frac{1}{\rho} |\nabla_h p| + |f|\, V \\ \Leftrightarrow V^2 - |f|\, VR + R\frac{1}{\rho} |\nabla_h p| &= 0 \\ \frac{V^2}{R} &= -\frac{1}{\rho} |\nabla_h p| + |f|\, V \\ \Leftrightarrow V &= \frac{|f|\, R}{2} \pm \sqrt{\frac{f^2 R^2}{4} - R\frac{1}{\rho} |\nabla_h p|}. \end{aligned} \tag{4.48}$$

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 Audruck unter der Wurzel ist positiv, also

$$|\nabla_h p| \leq \frac{\rho f^2 R}{4}. \tag{4.49}$$

Antizyklonen werden sind also in Kernnähe gradientenschwächer, solch eine Beschränkung gibt es für Zyklonen nicht. Dies ist wegen

$$\frac{\rho f^2 R}{4} \sim 10\ \frac{\text{hPa}}{1000\ \text{km}} \tag{4.50}$$

auf der synoptischen Skala tatsächlich bedeutsam.

4.7 Reibungswind

Nimmt man eine Druckgradientbeschleunigung

$$P := \frac{1}{\rho} |\nabla p| \tag{4.51}$$

an, die in y-Richtung zeigt und zusätzlich eine Reibungskraft $-\mu \boldsymbol{v}_h$ und setzt die Beschleunigung gleich Null, erhält man

$$0 = fV\sin(\psi) - \mu V\cos(\psi) \overset{\psi\in[0,\pi/2]}{\Rightarrow} \psi = \arctan\left(\frac{\mu}{f}\right), \tag{4.52}$$

$$0 = P - fV\cos(\psi) - \mu V\sin(\psi) \Rightarrow V = \frac{P}{f\cos(\psi) + \mu\sin(\psi)}, \tag{4.53}$$

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 $\psi \sim 30°$ ab durch

$$\frac{\partial p}{\partial t} \sim \frac{g}{\pi r^2}\frac{dm}{dt} \sim \frac{g}{\pi r^2} 2\pi r H \rho V \frac{1}{2} = \frac{gVH\rho}{r} \sim 4 \text{ hPa/hr} \tag{4.54}$$

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

$$\boldsymbol{v}_h = -t\frac{1}{\rho}\nabla p. \tag{4.55}$$

4.9 Zyklostrophischer Wind

Der *zyklostrophische Wind* ist gegeben, wenn ein Druckgradient eine Zentripetalkraft aufbringt:

$$\left|\frac{\partial p}{\partial r}\right| = \frac{\rho V^2}{|R|} \tag{4.56}$$

Er gilt in *Tornados* und *Staubteufeln*.

5 Vorticity und Divergenz

Sei ein beliebiges Vektorfeld $\boldsymbol{v}$ gegeben. Der Ansatz

$$\boldsymbol{v} = \Delta \boldsymbol{v} \tag{5.1}$$

mit den Randbedingungen

$$\lim_{|\boldsymbol{r}| \to \infty} \boldsymbol{v} = 0 \tag{5.2}$$

mit einem Vektorfeld $\boldsymbol{v}$ ist für stetige $\boldsymbol{v}$ eindeutig lösbar, es handelt sich nämlich um drei unabhängige *Poisson-Gleichungen*

$$U_i = \Delta v_i. \tag{5.3}$$

Nach Glg. (B.58) gilt

$$\Delta \boldsymbol{v} = \nabla \left(\nabla \cdot \boldsymbol{v} \right) - \nabla \times \left(\nabla \times \boldsymbol{v} \right). \tag{5.4}$$

Man definiert

$$\chi := \nabla \cdot \boldsymbol{v} \tag{5.5}$$

als *Geschwindigkeitspotential*, weiterhin definiert man

$$\boldsymbol{A} := -\nabla \times \boldsymbol{v} \tag{5.6}$$

als Vektorpotential, dann gilt

$$\boldsymbol{v} = \nabla \chi + \nabla \times \boldsymbol{A}. \tag{5.7}$$

Man hat also eine *eindeutige* Zerlegung

$$\boldsymbol{v} = \boldsymbol{v}_{\text{nonrot}} + \boldsymbol{v}_{\text{nondiv}}, \tag{5.8}$$

$$\nabla \times \boldsymbol{v}_{\text{nonrot}} = 0, \tag{5.9}$$

$$\nabla \cdot \boldsymbol{v}_{\text{nondiv}} = 0 \tag{5.10}$$

vorgenommen. Dass dies immer möglich ist, ist der *Hauptsatz der Vektoranalysis*. χ und $\boldsymbol{A}$ haben insgesamt vier Komponenten, das Windfeld jedoch nur drei. Daher kann man eine weitere lineare Bedingung stellen, hier wird

$$\nabla \cdot \boldsymbol{A} = 0 \tag{5.11}$$

gewählt, daraus folgt

$$\nabla \times \boldsymbol{v} = \Delta \boldsymbol{A}. \tag{5.12}$$

Betrachtet man nur das horizontale Windfeld

$$\boldsymbol{v}_h := \boldsymbol{v} - w\boldsymbol{k}, \tag{5.13}$$

so gilt dies natürlich auch. An das Vektorpotential stellt man nun statt der Bedingung $\nabla \cdot \boldsymbol{A} \overset{!}{=} 0$ die algebraische Bedingung

$$\boldsymbol{A} \overset{!}{=} \left(\boldsymbol{k} \cdot \boldsymbol{A} \right) \boldsymbol{k} \tag{5.14}$$

und definiert eine *Stromfunktion* $\psi = \psi\left(\varphi, \lambda\right) := -\boldsymbol{k} \cdot \boldsymbol{A}$. Dann gilt

$$\boldsymbol{v}_{h,\text{nondiv}} = \nabla \times \left[-\boldsymbol{k}\psi \right] \overset{\text{(B.55)}}{=} \boldsymbol{k} \times \nabla \psi. \tag{5.15}$$

Zur Überprüfung rechnet man

$$\nabla \cdot \left(\boldsymbol{k} \times \nabla \psi \right) \overset{\text{Glg. (B.59)}}{=} \nabla \psi \cdot \left(\nabla \times \boldsymbol{k} \right) - \boldsymbol{k} \cdot \left(\nabla \times \nabla \psi \right) = 0. \tag{5.16}$$

Man definiert

$$\boldsymbol{\xi} := \nabla \times \boldsymbol{v}. \tag{5.17}$$

Es gilt

$$\zeta \quad := \quad \boldsymbol{k} \cdot (\nabla \times \boldsymbol{v}_h) = \boldsymbol{k} \cdot \left[\nabla \times \left(\boldsymbol{k} \times \nabla \psi\right)\right] \overset{\text{Glg. (B.57)}}{=} \Delta \psi. \tag{5.18}$$

Für die Divergenz gilt weiterhin

$$\nabla \cdot \boldsymbol{v}_h = \Delta \chi. \tag{5.19}$$

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 $\boldsymbol{e}_x, \boldsymbol{e}_y, \boldsymbol{e}_z$ bezeichnet, das Geschwindigkeitsfeld schreibt sich damit als

$$\boldsymbol{v} = u_x \boldsymbol{e}_x + u_y \boldsymbol{e}_y + u_z \boldsymbol{e}_z. \tag{5.20}$$

Schreibt man

$$\boldsymbol{U}' = \boldsymbol{\omega} \times \boldsymbol{r} + \boldsymbol{v}, \tag{5.21}$$

so ist $\boldsymbol{U}'$ das Feld der Teilchengeschwindigkeiten in ruhenden Koordinaten. Es setzt sich zusammen aus dem Anteil der Erdrotation $\boldsymbol{\omega} \times \boldsymbol{r}$ und dem relativ zur rotierenden Erde gemessenen Windfeld $\boldsymbol{v}$. Damit folgt

$$\boldsymbol{\eta} := \nabla \times \boldsymbol{v}' = \nabla \times \boldsymbol{v} + \nabla \times (\boldsymbol{\omega} \times \boldsymbol{r}) = \boldsymbol{\xi} + \boldsymbol{f}, \tag{5.22}$$

es wurde

$$\nabla \times (\boldsymbol{\omega} \times \boldsymbol{r}) \overset{\text{(B.57)}}{=} \boldsymbol{\omega} (\nabla \cdot \boldsymbol{r}) - (\boldsymbol{\omega} \cdot \nabla) \boldsymbol{r} = 3\boldsymbol{\omega} - \left(\omega \frac{\partial}{\partial z}\right) \boldsymbol{r} = 3\boldsymbol{\omega} - \boldsymbol{\omega} = 2\boldsymbol{\omega} = \boldsymbol{f} \tag{5.23}$$

eingesetzt. Man definiert die absolute Vorticity η durch die Vertikalkomponente der Rotation von $\boldsymbol{v}'$. Diese erhält man als Skalarprodukt von $\nabla \times \boldsymbol{v}'$ mit dem vertikalen Einheitsvektor $\boldsymbol{k}$:

$$\eta := \boldsymbol{k} \cdot (\nabla \times \boldsymbol{v}) + \boldsymbol{k} \cdot \boldsymbol{f} = \zeta + f \tag{5.24}$$

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 $\boldsymbol{v} = (y, 0, 0)^T$. Die Stromlinien dieses Feldes sind nicht gekrümmt. Trotzdem gilt $\nabla \times \boldsymbol{v} = (0, 0, -1)^T \neq 0$.

- Nehme das Feld $\boldsymbol{v} = \frac{1}{x^2+y^2} (-y, x, 0)^T$. Das Feld sieht sehr stark nach einem rotationsbehafteten Feld aus (s. Abb. 5.1). Trotzdem gilt

$$\begin{aligned} \nabla \times \boldsymbol{v} &= \left(\frac{\partial}{\partial x} \frac{x}{x^2+y^2} + \frac{\partial}{\partial y} \frac{y}{x^2+y^2}\right) \boldsymbol{e}_z \\ &= \left(\frac{1}{x^2+y^2} - x 2x \frac{1}{(x^2+y^2)^2} + \frac{1}{x^2+y^2} - y 2y \frac{1}{(x^2+y^2)^2}\right) \boldsymbol{e}_z = 0. \end{aligned} \tag{5.25}$$

Um die wahre Bedeutung der Vorticity zu verstehen, stellt man sich am besten ein 2D-Vektorfeld $\boldsymbol{v}_h = (u, v)^T$ vor (in kartesischen Koordinaten). Nehme ein Rechteck $[-a, a] \times [-b, b]$. $\boldsymbol{s}$ sei eine Kurve, die im positiven mathema-

Abbildung 5.1: Die Vorticity dieses Vektorfeldes $\boldsymbol{v}$ ist gleich Null.

tischen Drehsinn diese Menge umschließt. Dann gilt näherungsweise mit (u, v) als Vektor am Ursprung

$$\begin{aligned}\int_{\boldsymbol{s}} \boldsymbol{v}_h \cdot d\boldsymbol{s} &\approx 2a\left(u - b\frac{\partial u}{\partial y}\right) + 2b\left(v + a\frac{\partial v}{\partial x}\right) - 2a\left(u + b\frac{\partial u}{\partial y}\right) - 2b\left(v - a\frac{\partial v}{\partial x}\right) \\ &= -2ba\frac{\partial u}{\partial y} + 2ba\frac{\partial v}{\partial x} - 2ab\frac{\partial u}{\partial y} + 2ba\frac{\partial v}{\partial x} = -4ba\frac{\partial u}{\partial y} + 4ab\frac{\partial v}{\partial x} = 4ab\left(\frac{\partial v}{\partial x} - \frac{\partial u}{\partial y}\right). \quad (5.26)\end{aligned}$$

Der Flächeninhalt der Fläche ist $4ab$. Betrachtet man die Zirkulation des Vektorfelds um ein Teilchen, bildet also

$$\lim_{a,b\to 0} \frac{\int_{\boldsymbol{s}} \boldsymbol{v}_h \cdot d\boldsymbol{s}}{4ab} = \frac{\partial v}{\partial x} - \frac{\partial u}{\partial y}, \quad (5.27)$$

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:*

$$\int_A \nabla \times \boldsymbol{v} \cdot d\boldsymbol{f} = \int_{\partial A} \boldsymbol{v} \cdot d\boldsymbol{s}. \quad (5.28)$$

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 $\boldsymbol{s}, \boldsymbol{n}, \boldsymbol{k}$, bei der $\boldsymbol{s}$ am Ursprung parallel zum Horizontalwind ist. Damit gilt

$$\boldsymbol{v} = \begin{pmatrix} V\cos(\beta) \\ V\sin(\beta) \\ w \end{pmatrix} \quad (5.29)$$

mit der horizontalen Windgeschwindigkeit V und dem Vertikalwind w. β ist hier die horizontale Windrichtung relativ zu $\boldsymbol{s}$. 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 gekrümmt 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 $\boldsymbol{v}$ um A zur Zeit t durch

$$S(t) := \int_{\partial A} \boldsymbol{v} \cdot d\boldsymbol{s} = \int_0^1 \boldsymbol{v}(\boldsymbol{r}(\tau), t) \cdot \frac{d\boldsymbol{r}}{d\tau} d\tau, \tag{5.32}$$

wobei $\boldsymbol{r}(\tau)$ 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

$$\frac{DS}{Dt} = \frac{D}{Dt}\int_0^1 \boldsymbol{v}(\boldsymbol{r}(\tau), t) \cdot \frac{d\boldsymbol{r}}{d\tau} d\tau = \int_0^1 \frac{D\boldsymbol{v}}{Dt} \cdot \frac{d\boldsymbol{r}}{d\tau} d\tau + \int_0^1 \boldsymbol{v} \cdot \frac{D}{Dt}\left(\frac{d\boldsymbol{r}}{d\tau}\right) d\tau. \tag{5.33}$$

Um das zweite Integral näher zu bestimmen, stellt man vorbereitend

$$\begin{aligned} \frac{d\boldsymbol{r}}{d\tau} &= \lim_{\Delta\to 0} \frac{\boldsymbol{r}(\tau+\Delta) - \boldsymbol{r}(\tau)}{\Delta} \\ \Rightarrow \frac{D}{Dt}\frac{d\boldsymbol{r}}{d\tau} &= \lim_{\Delta\to 0} \frac{\frac{D\boldsymbol{r}}{Dt}(\tau+\Delta) - \frac{D\boldsymbol{r}}{Dt}(\tau)}{\Delta} = \lim_{\Delta\to 0} \frac{\boldsymbol{v}(\boldsymbol{r}(\tau+\Delta)) - \boldsymbol{v}(\boldsymbol{r}(\tau))}{\Delta} \\ &= \left(\frac{d\boldsymbol{r}}{d\tau} \cdot \nabla\right) \boldsymbol{v} \end{aligned} \tag{5.34}$$

fest. Definiere $\boldsymbol{v}(\tau) := \boldsymbol{v}(\boldsymbol{r}(\tau), t)$, dann gilt

$$\left(\frac{d\boldsymbol{r}}{d\tau} \cdot \nabla\right) \boldsymbol{v} = \frac{d\boldsymbol{v}}{d\tau}, \tag{5.35}$$

womit man

$$\int_0^1 \boldsymbol{v} \cdot \frac{D}{Dt}\left(\frac{d\boldsymbol{r}}{d\tau}\right) d\tau = \int_0^1 \boldsymbol{v} \cdot \frac{d\boldsymbol{v}}{d\tau} d\tau = \frac{1}{2}\left[\boldsymbol{v}^2\right]_0^1 = 0 \tag{5.36}$$

erhält, da aufgrund der Geschlossenheit der Kurve $\boldsymbol{v}(0) = \boldsymbol{v}(1)$ gilt. Mit dem Stokes'schen Satz folgt

$$\frac{DS}{Dt} = \int_A \nabla \times \boldsymbol{F} \cdot d\boldsymbol{n}, \tag{5.37}$$

wobei $\boldsymbol{F}$ die Summe aller wirkenden Kräfte ist. Konservative Kräfte ändern die Zirkulation also nicht. Mit

$$\nabla \times \left(-\frac{1}{\varrho}\nabla p\right) \overset{\text{Glg. (B.55)}}{=} \frac{1}{\varrho^2}\nabla\varrho \times \nabla p, \tag{5.38}$$

$$\nabla \times \boldsymbol{v} \times \boldsymbol{f} \overset{\text{Glg. (B.57)}}{=} (\boldsymbol{f}\cdot\nabla)\,\boldsymbol{v} - \boldsymbol{f}\nabla\cdot\boldsymbol{v} \tag{5.39}$$

folgt

$$\frac{DS}{Dt} = \int_A \left(\frac{1}{\varrho^2}\nabla\varrho \times \nabla p + (\boldsymbol{f}\cdot\nabla)\,\boldsymbol{v} - \boldsymbol{f}\nabla\cdot\boldsymbol{v} + \nabla\times\boldsymbol{F}_R\right)\cdot d\boldsymbol{n} \tag{5.40}$$

In IS gilt also in barotropen idealen Medien

$$\frac{DS}{Dt} = 0 \Leftrightarrow S = \text{const.} \tag{5.41}$$

5.1.3 Vorticitygleichung

Die Impulsgleichung Glg. (3.113) lautet

$$\frac{\partial \boldsymbol{v}}{\partial t} = -\frac{1}{\varrho}\nabla p + \boldsymbol{v}\times\boldsymbol{\eta} - \nabla k + \boldsymbol{g} + \boldsymbol{F}_R. \tag{5.42}$$

Nun wendet man auf die einzelnen Terme den Operator $\nabla\times$ an:

$$\nabla \times \frac{\partial \boldsymbol{v}}{\partial t} \overset{\text{(B.54)}}{=} \frac{\partial}{\partial t}\nabla\times\boldsymbol{v} \tag{5.43}$$

$$\nabla \times \left(-\frac{1}{\varrho}\nabla p\right) \overset{\text{(B.55)}}{=} -\frac{1}{\varrho^2}\nabla p \times \nabla\varrho \tag{5.44}$$

$$\nabla \times (\boldsymbol{v}\times\boldsymbol{\eta}) \overset{\text{(B.57)}}{=} -(\boldsymbol{v}\cdot\nabla)\,\boldsymbol{\eta} - \boldsymbol{\eta}\nabla\cdot\boldsymbol{v} + (\boldsymbol{\eta}\cdot\nabla)\,\boldsymbol{v} \tag{5.45}$$

$$\nabla\times\boldsymbol{g} \overset{\text{(B.51)}}{=} 0 \tag{5.46}$$

$$\nabla\times\nabla k \overset{\text{(B.51)}}{=} 0. \tag{5.47}$$

Somit gilt

$$\frac{\partial}{\partial t}\mathrm{rot}\,(\boldsymbol{v}) = \frac{1}{\varrho^2}\nabla\varrho\times\nabla p - (\boldsymbol{v}\cdot\nabla)\,\boldsymbol{\eta} - \boldsymbol{\eta}\nabla\cdot\boldsymbol{v} + (\boldsymbol{\eta}\cdot\nabla)\,\boldsymbol{v} + \nabla\times\boldsymbol{F}_R. \tag{5.48}$$

Durch Projektion auf die lokale Senkrechte erhält man

$$\begin{aligned}\frac{\partial\zeta}{\partial t} &= \frac{1}{\varrho^2}\boldsymbol{k}\cdot\left(\nabla\varrho\times\nabla p\right) - \eta\nabla\cdot\boldsymbol{v} \\ &\quad + \boldsymbol{k}\cdot[(\boldsymbol{\eta}\cdot\nabla)\,\boldsymbol{v}] - \boldsymbol{k}\cdot[(\boldsymbol{v}\cdot\nabla)\,\boldsymbol{\eta}] + \boldsymbol{k}\cdot\nabla\times\boldsymbol{F}_R.\end{aligned} \tag{5.49}$$

Man rechnet zunächst mit Glg. (B.62)

$$\begin{aligned}(\boldsymbol{\eta}\cdot\nabla)\,w = (\boldsymbol{\eta}\cdot\nabla)\,(\boldsymbol{v}\cdot\boldsymbol{k}) &= \boldsymbol{k}\cdot[(\boldsymbol{\eta}\cdot\nabla)\,\boldsymbol{v}] + \boldsymbol{v}\cdot[(\boldsymbol{\eta}\cdot\nabla)\,\boldsymbol{k}] \\ \Rightarrow \boldsymbol{k}\cdot[(\boldsymbol{\eta}\cdot\nabla)\,\boldsymbol{v}] &= (\boldsymbol{\eta}\cdot\nabla)\,w - \boldsymbol{v}\cdot[(\boldsymbol{\eta}\cdot\nabla)\,\boldsymbol{k}]\,,\end{aligned} \tag{5.50}$$

$$\begin{aligned}\boldsymbol{v}\cdot\nabla\eta = (\boldsymbol{v}\cdot\nabla)\,(\boldsymbol{\eta}\cdot\boldsymbol{k}) &= \boldsymbol{\eta}\cdot[(\boldsymbol{v}\cdot\nabla)\,\boldsymbol{k}] + \boldsymbol{k}\cdot[(\boldsymbol{v}\cdot\nabla)\,\boldsymbol{\eta}] \\ \Rightarrow \boldsymbol{k}\cdot[(\boldsymbol{v}\cdot\nabla)\,\boldsymbol{\eta}] &= \boldsymbol{v}\cdot\nabla\eta - \boldsymbol{\eta}\cdot[(\boldsymbol{v}\cdot\nabla)\,\boldsymbol{k}]\,.\end{aligned} \tag{5.51}$$

Somit gilt

$$\begin{aligned}\frac{\partial\zeta}{\partial t} &= \frac{1}{\varrho^2}\boldsymbol{k}\cdot\left(\nabla\varrho\times\nabla p\right) - \eta\nabla\cdot\boldsymbol{v} + (\boldsymbol{\eta}\cdot\nabla)\,w - \boldsymbol{v}\cdot[(\boldsymbol{\eta}\cdot\nabla)\,\boldsymbol{k}] - \boldsymbol{v}\cdot\nabla\eta \\ &\quad + \boldsymbol{\eta}\cdot[(\boldsymbol{v}\cdot\nabla)\,\boldsymbol{k}] + \boldsymbol{k}\cdot\nabla\times\boldsymbol{F}_R.\end{aligned} \tag{5.52}$$

Es gelten mit den Feststellungen in Absch. B.2.1

$$\frac{\partial \boldsymbol{k}}{\partial x} = \frac{\boldsymbol{i}}{r}, \tag{5.53}$$

$$\frac{\partial \boldsymbol{k}}{\partial y} = \frac{\boldsymbol{j}}{r}, \tag{5.54}$$

$$\frac{\partial \boldsymbol{k}}{\partial z} = 0. \tag{5.55}$$

Somit folgt

$$\frac{\partial \zeta}{\partial t} = \frac{1}{\varrho^2}\boldsymbol{k}\cdot\left(\nabla\varrho\times\nabla p\right) - \eta\nabla\cdot\boldsymbol{v} + \boldsymbol{\eta}\cdot\nabla w - \frac{u\eta_x}{r} - \frac{v\eta_y}{r} - \boldsymbol{v}\cdot\nabla\eta + \frac{\eta_x u}{r} + \frac{\eta_y v}{r} + \boldsymbol{k}\cdot\nabla\times\boldsymbol{F}_R. \tag{5.56}$$

Die Vorticitygleichung lautet schlussendlich

$$\boxed{\frac{\partial \zeta}{\partial t} = -\boldsymbol{v}\cdot\nabla\eta - \eta\nabla\cdot\boldsymbol{v} + \boldsymbol{\eta}\cdot\nabla w + \frac{1}{\varrho^2}\boldsymbol{k}\cdot\left(\nabla\varrho\times\nabla p\right) + \boldsymbol{k}\cdot\nabla\times\boldsymbol{F}_R.} \tag{5.57}$$

Geht man von einem Flachgeofluid aus, vernachlässigt die Reibung und führt einen horizontalen Windvektor $\boldsymbol{v}_h$ ein, folgt

$$\frac{\partial \zeta}{\partial t} = -\boldsymbol{v}_h\cdot\nabla\eta - w\frac{\partial \zeta}{\partial z} - \eta\nabla\cdot\boldsymbol{v} + \boldsymbol{\eta}\cdot\nabla w + \frac{1}{\varrho^2}\boldsymbol{k}\cdot\left(\nabla\varrho\times\nabla p\right). \tag{5.58}$$

Im barotropen Fall fällt hier der sogenannte *Solenoidterm*, der $\nabla\varrho\times\nabla p$ enthält, weg, vernachlässigt man außerdem die vertikale Scherung des Horizontalwindes (s. Absch. 4.2), folgt

$$\boxed{\frac{\partial \zeta}{\partial t} = -\boldsymbol{v}_h\cdot\nabla\eta - \eta\nabla\cdot\boldsymbol{v} + \boldsymbol{\eta}\cdot\nabla w.} \tag{5.59}$$

Dies ist die sogenannte *barotrope Vorticitygleichung*. Im Fall von Inkompressibilität, insbesondere im Fall der SWEs, ist $\nabla\cdot\boldsymbol{v} = 0$, woraus folgt

$$\frac{\partial \zeta}{\partial t} = -\boldsymbol{v}_h\cdot\nabla\eta + \boldsymbol{\eta}\cdot\nabla w \Rightarrow \frac{d\eta}{dt} = \boldsymbol{\eta}\cdot\nabla w. \tag{5.60}$$

Vernachlässigt man die horizontalen Gradienten von w, folgt

$$\frac{d\eta}{dt} = \eta\frac{\partial w}{\partial z}. \tag{5.61}$$

Setzt man

$$\nabla\cdot\boldsymbol{v} = \nabla\cdot\boldsymbol{v}_h + \frac{\partial w}{\partial z} = 0 \tag{5.62}$$

ein, wobei ein breitenunabhängiger Krümmungsterm $\propto \frac{w}{r}$ vernachlässigt wurde, folgt

$$\frac{d\eta}{dt} = -\eta\nabla\cdot\boldsymbol{v}_h. \tag{5.63}$$

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 (3.167) - (3.168) im p-System lauten vektoriell

$$\frac{\partial \boldsymbol{v}_h}{\partial t} = -\nabla\varphi - \frac{1}{2}\nabla\left(\boldsymbol{v}_h\cdot\boldsymbol{v}_h\right) + \boldsymbol{v}_h\times\boldsymbol{\eta}' - \omega\frac{\partial \boldsymbol{v}_h}{\partial p} + \nabla\times\boldsymbol{F}_R^{(H)}. \tag{5.64}$$

Dabei wurde die modifizierte absolute Vorticity $\boldsymbol{\eta}'$ durch

$$\boldsymbol{\eta}' := f\boldsymbol{k} + \nabla\times\boldsymbol{v}_h \tag{5.65}$$

definiert. Nun wendet man auf die einzelnen Terme den Operator $\nabla\times$ an:

$$\nabla\times\frac{\partial \boldsymbol{v}_h}{\partial t} \overset{(B.54)}{=} \frac{\partial}{\partial t}\nabla\times\boldsymbol{v}_h \tag{5.66}$$

$$\nabla\times\nabla\varphi \overset{(B.51)}{=} 0 \tag{5.67}$$

$$\nabla\times\boldsymbol{g} \overset{(B.51)}{=} 0 \tag{5.68}$$

$$\nabla\times\nabla\left(\boldsymbol{v}_h\cdot\boldsymbol{v}_h\right) \overset{(B.51)}{=} 0 \tag{5.69}$$

$$\nabla\times\left(\boldsymbol{v}_h\times\boldsymbol{\eta}'\right) \overset{(B.57)}{=} -\left(\boldsymbol{v}_h\cdot\nabla\right)\boldsymbol{\eta}' - \boldsymbol{\eta}'\nabla\cdot\boldsymbol{v}_h + \left(\boldsymbol{\eta}'\cdot\nabla\right)\boldsymbol{v}_h \tag{5.70}$$

$$\nabla\times\left(\omega\frac{\partial \boldsymbol{v}_h}{\partial p}\right) \overset{(B.55)}{=} \omega\nabla\times\frac{\partial \boldsymbol{v}_h}{\partial p} - \frac{\partial \boldsymbol{v}_h}{\partial p}\times\nabla\omega \tag{5.71}$$

Somit gilt

$$\frac{\partial}{\partial t}\nabla\times\boldsymbol{v}_h = -\left(\boldsymbol{v}_h\cdot\nabla\right)\boldsymbol{\eta}' - \boldsymbol{\eta}'\nabla\cdot\boldsymbol{v}_h + \left(\boldsymbol{\eta}'\cdot\nabla\right)\boldsymbol{v}_h + \omega\nabla\times\frac{\partial \boldsymbol{v}_h}{\partial p} - \frac{\partial \boldsymbol{v}_h}{\partial p}\times\nabla\omega + \nabla\times\boldsymbol{F}_R^{(H)}. \tag{5.72}$$

Durch Projektion auf die lokale Senkrechte $\boldsymbol{k}$ erhält man

$$\begin{aligned}\frac{\partial\zeta}{\partial t} &= -\boldsymbol{k}\cdot\left[\left(\boldsymbol{v}_h\cdot\nabla\right)\boldsymbol{\eta}'\right] - \left(f+\zeta\right)\nabla\cdot\boldsymbol{v}_h + \boldsymbol{k}\cdot\left[\left(\boldsymbol{\eta}'\cdot\nabla\right)\boldsymbol{v}_h\right]\\ &\quad -\omega\frac{\partial\zeta}{\partial p} + \boldsymbol{k}\cdot\left[\frac{\partial \boldsymbol{v}_h}{\partial p}\times\nabla\omega\right] + \boldsymbol{k}\cdot\nabla\times\boldsymbol{F}_R^{(H)}.\end{aligned} \tag{5.73}$$

Man rechnet zunächst mit Glg. (B.62)

$$\begin{aligned}0 = \left(\boldsymbol{\eta}'\cdot\nabla\right)\left(\boldsymbol{v}_h\cdot\boldsymbol{k}\right) &= \boldsymbol{k}\cdot\left[\left(\boldsymbol{\eta}'\cdot\nabla\right)\boldsymbol{v}_h\right] + \boldsymbol{v}_h\cdot\left[\left(\boldsymbol{\eta}'\cdot\nabla\right)\boldsymbol{k}\right]\\ \Rightarrow \boldsymbol{k}\cdot\left[\left(\boldsymbol{\eta}'\cdot\nabla\right)\boldsymbol{v}_h\right] &= -\boldsymbol{v}_h\cdot\left[\left(\boldsymbol{\eta}'\cdot\nabla\right)\boldsymbol{k}\right],\end{aligned} \tag{5.74}$$

$$\begin{aligned}\boldsymbol{v}_h\cdot\nabla\eta = \left(\boldsymbol{v}_h\cdot\nabla\right)\left(\boldsymbol{\eta}'\cdot\boldsymbol{k}\right) &= \boldsymbol{\eta}'\cdot\left[\left(\boldsymbol{v}_h\cdot\nabla\right)\boldsymbol{k}\right] + \boldsymbol{k}\cdot\left[\left(\boldsymbol{v}_h\cdot\nabla\right)\boldsymbol{\eta}'\right]\\ \Rightarrow \boldsymbol{k}\cdot\left[\left(\boldsymbol{v}_h\cdot\nabla\right)\boldsymbol{\eta}'\right] &= \boldsymbol{v}_h\cdot\nabla\eta - \boldsymbol{\eta}'\cdot\left[\left(\boldsymbol{v}_h\cdot\nabla\right)\boldsymbol{k}\right].\end{aligned} \tag{5.75}$$

Es gelten mit den Feststellungen in Absch. B.2.1

$$\frac{\partial\boldsymbol{k}}{\partial x} = \frac{\boldsymbol{i}}{r}, \tag{5.76}$$

$$\frac{\partial\boldsymbol{k}}{\partial y} = \frac{\boldsymbol{j}}{r}, \tag{5.77}$$

$$\frac{\partial\boldsymbol{k}}{\partial z} = 0. \tag{5.78}$$

Somit folgt

$$\boldsymbol{v}_h\cdot\left[\left(\boldsymbol{\eta}'\cdot\nabla\right)\boldsymbol{k}\right] = \boldsymbol{\eta}'\cdot\left[\left(\boldsymbol{v}_h\cdot\nabla\right)\boldsymbol{k}\right]. \tag{5.79}$$

Die Vorticitygleichung im p-System lautet somit

$$\boxed{\frac{\partial \zeta}{\partial t} = -v\beta - (f+\zeta)\,\nabla\cdot\boldsymbol{v}_h - \boldsymbol{v}_h\cdot\nabla\zeta - \omega\frac{\partial\zeta}{\partial p} + \boldsymbol{k}\cdot\left[\frac{\partial \boldsymbol{v}_h}{\partial p}\times\nabla\omega\right] + \boldsymbol{k}\cdot\nabla\times\boldsymbol{F}_R^{(H)}.} \tag{5.80}$$

Berechnet man die Vorticity des geostrophischen Windfeldes erhält man

$$\zeta_g = \frac{1}{f}\frac{\partial^2\varphi}{\partial x^2} + \frac{1}{f}\frac{\partial^2\varphi}{\partial y^2} - \frac{\beta}{f^2}\frac{\partial\varphi}{\partial y} + \frac{\tan(\varphi)\,u}{r} = \frac{1}{f}\Delta_h\varphi + \frac{\beta}{f}u + \frac{\tan(\varphi)\,u}{r}. \tag{5.81}$$

Für den ersten Term gilt

$$\mathcal{O}\left(\frac{1}{f}\Delta\varphi\right) = \mathcal{O}\left(\frac{1}{f}\frac{\Delta p}{\rho L^2}\right) = 10^{-5}\,\frac{1}{\mathrm{s}}. \tag{5.82}$$

Der Term des $\beta-$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 $\beta-$Effektes vernachlässigen.

5.1.4 Barotrope potentielle Vorticity

In der Dynamik der SWEs ist die *barotrope potentielle Vorticity* (barotrope PV) q definiert durch

$$q := \frac{\eta}{h} = \frac{\zeta+f}{h} = \frac{\boldsymbol{k}\cdot\nabla\times\boldsymbol{v}_h + f}{h}, \tag{5.83}$$

hierbei ist h die Tiefe. Nach Glg. (B.61) gilt

$$(\boldsymbol{v}_h\cdot\nabla)\,\boldsymbol{v}_h = \nabla k - \boldsymbol{v}_h\times(\nabla\times\boldsymbol{v}_h) \tag{5.84}$$

mit der spezifischen kinetischen Energie $k = \frac{1}{2}\boldsymbol{v}_h^2$. Für den zweiten Term gilt mit Glg. (B.125)

$$\boldsymbol{v}_h\times(\nabla\times\boldsymbol{v}_h) = \boldsymbol{v}_h\times\left[-\frac{v}{r}\boldsymbol{i} + \frac{u\tan(\varphi)}{r}\boldsymbol{k} + \frac{u}{r}\boldsymbol{j} + \boldsymbol{k}\left(\frac{\partial v}{\partial x} - \frac{\partial u}{\partial y}\right) + \boldsymbol{j}\frac{\partial u}{\partial z} - \boldsymbol{i}\frac{\partial v}{\partial z}\right]. \tag{5.85}$$

Aufgrund des Verschwindens vertikaler Scherung im barotropen Fall gilt

$$\begin{aligned}
\boldsymbol{v}_h\times(\nabla\times\boldsymbol{v}_h) &= \boldsymbol{v}_h\times\left[-\frac{v}{r}\boldsymbol{i} + \frac{u\tan(\varphi)}{r}\boldsymbol{k} + \frac{u}{r}\boldsymbol{j} + \boldsymbol{k}\left(\frac{\partial v}{\partial x} - \frac{\partial u}{\partial y}\right)\right] \\
&= \boldsymbol{v}_h\times\boldsymbol{k}\zeta + \frac{u^2}{r}\boldsymbol{i}\times\boldsymbol{j} + \frac{v^2}{r}\boldsymbol{i}\times\boldsymbol{j} = \boldsymbol{v}_h\times\boldsymbol{k}\zeta + \frac{u^2}{r}\boldsymbol{k} - +\frac{v^2}{r}\boldsymbol{k} \\
&= -\boldsymbol{k}\times\zeta\boldsymbol{v}_h + \frac{\boldsymbol{k}}{r}\left(u^2+v^2\right).
\end{aligned} \tag{5.86}$$

Die Vertikalkomponente interessiert hier nicht weiter. Nun kann man für die Impulsgleichung der Flachwassergleichungen Glg. (3.146) unter Vernachlässigung der Reibung schreiben

$$\begin{aligned}
\frac{\partial\boldsymbol{v}_h}{\partial t} + \boldsymbol{k}\times\zeta\boldsymbol{v}_h &= -g\nabla(h+b) - \nabla k - f\boldsymbol{k}\times\boldsymbol{v}_h \\
\Leftrightarrow \frac{\partial\boldsymbol{v}_h}{\partial t} + qh\boldsymbol{k}\times\boldsymbol{v}_h &= -g\nabla(h+b) - \nabla k.
\end{aligned} \tag{5.87}$$

Es gilt

$$\boxed{\frac{Dq}{Dt} = \frac{1}{h}\frac{D\eta}{Dt} - \frac{\eta}{h^2}\frac{Dh}{Dt} \overset{(3.147)}{=} -\frac{\eta}{h}\nabla_h\cdot\boldsymbol{v}_h - \frac{\eta}{h^2}\left(-h\nabla_h\cdot\boldsymbol{v}_h\right) = 0.} \tag{5.88}$$

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

$$h \downarrow \Rightarrow (\zeta + f) \downarrow \Rightarrow \zeta \downarrow, \tag{5.89}$$

wobei von einem postiven 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

$$\delta := \nabla \cdot \boldsymbol{v}_h. \tag{5.90}$$

Nach Glg. (B.123) gilt

$$\delta = \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} - v\frac{\tan(\varphi)}{a+z}. \tag{5.91}$$

Die Divergenz des Gesamtwindfeldes wird mit

$$\xi := \nabla \cdot \boldsymbol{v} \tag{5.92}$$

bezeichnet. Mit Glg. (B.123) kann man

$$\xi = \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} + \frac{\partial w}{\partial z} - v\frac{\tan(\varphi)}{a+z} + \frac{2w}{a+z} \tag{5.93}$$

notieren. Im Falle wirbelfreier nichtviskoser inkompressibler Strömungen gilt mit Glg. (3.113) für eine Stromfunktion χ in IS

$$\nabla\left(\frac{\partial \chi}{\partial t} + k + \varphi + \frac{p}{\rho}\right) = 0, \tag{5.94}$$

$$\Leftrightarrow \frac{\partial \chi}{\partial t} + \frac{1}{2}\boldsymbol{v}^2 + gz + \frac{p}{\rho} = \text{homogen}, \tag{5.95}$$

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:

$$\begin{aligned} \delta &= \frac{\partial}{\partial s}\left(V\cos(\beta)\right) + \frac{\partial}{\partial n}\left(V\sin(\beta)\right) \\ &= \cos(\beta)\frac{\partial V}{\partial s} - V\sin(\beta)\frac{\partial \beta}{\partial s} + \sin(\beta)\frac{\partial V}{\partial n} + V\cos(\beta)\frac{\partial \beta}{\partial n} \end{aligned} \tag{5.96}$$

Betrachtet man den Koordinatenursprung, so folgt mit $\beta = 0$

$$\delta = \frac{\partial V}{\partial s} + V\frac{\partial \beta}{\partial n}. \tag{5.97}$$

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.

Abbildung 5.3: Geschwindigkeitsdivergenz (links) und Richtungsdivergenz (rechts).

5.2.2 Divergenzgleichung

Es gibt auch eine prognostische Gleichung für die Divergenz, die sogenannte *Divergenzgleichung*. Die Impulsgleichung Glg. (3.113) lautet

$$\frac{\partial \boldsymbol{v}}{\partial t} = -\frac{1}{\varrho}\nabla p + \boldsymbol{v}\times\boldsymbol{f} - (\boldsymbol{v}\cdot\nabla)\,\boldsymbol{v} + \boldsymbol{g} + \boldsymbol{F}_R. \tag{5.98}$$

Nun wendet man auf die einzelnen Terme den Operator $\nabla\cdot$ an:

$$\nabla\cdot\frac{\partial \boldsymbol{v}}{\partial t} \overset{\text{(B.54)}}{=} \frac{\partial \xi}{\partial t} \tag{5.99}$$

$$\nabla\cdot\left(-\frac{1}{\varrho}\nabla p\right) \overset{\text{(B.53)}}{=} \frac{1}{\varrho^2}\nabla\varrho\cdot\nabla p - \frac{1}{\varrho}\Delta p \tag{5.100}$$

$$\nabla\cdot(\boldsymbol{v}\times\boldsymbol{f}) \overset{\text{(B.59)}}{=} \boldsymbol{f}\cdot\boldsymbol{\zeta} \tag{5.101}$$

Die Divergenz von $\boldsymbol{g}$ besteht aufgrund der Poisson-Gleichung nur aus dem Zentrifugalanteil. Da man in der Meteorologie jedoch für analytische Herleitungen meist von einem radialsymmetrischen Schwerefeld ausgeht, wird auch dieser Anteil vernachlässigt. Es gilt also

$$\boxed{\frac{\partial \xi}{\partial t} = \frac{1}{\varrho^2}\nabla\varrho\cdot\nabla p - \frac{1}{\varrho}\Delta p + \boldsymbol{f}\cdot\boldsymbol{\zeta} - \nabla\cdot[(\boldsymbol{v}\cdot\nabla)\,\boldsymbol{v}] + \nabla\cdot\boldsymbol{F}_R.} \tag{5.102}$$

Dies ist die Divergenzgleichung. Mit der Lamb-Transformation erhält man

$$\begin{aligned}\nabla\cdot[(\boldsymbol{v}\cdot\nabla)\,\boldsymbol{v}] &= \Delta k - \nabla\cdot[\boldsymbol{v}\times(\nabla\times\boldsymbol{v})] \overset{\text{Glg. (B.59)}}{=} \Delta k - \boldsymbol{\zeta}^2 + \boldsymbol{v}\cdot(\nabla\times\boldsymbol{\zeta}) \\ &\overset{\text{Glg. (B.58)}}{=} \Delta k - \boldsymbol{\zeta}^2 - \boldsymbol{v}\cdot(\Delta\boldsymbol{v}) + \boldsymbol{v}\cdot\nabla\xi.\end{aligned} \tag{5.103}$$

Dies führt auf eine weitere Form der Divergenzgleichung:

$$\boxed{\begin{aligned}\frac{\partial \xi}{\partial t} = {} & \frac{1}{\varrho^2}\nabla\varrho\cdot\nabla p - \frac{1}{\varrho}\Delta p + \boldsymbol{f}\cdot\boldsymbol{\zeta} - \Delta k + \boldsymbol{\zeta}^2 \\ & + \boldsymbol{v}\cdot(\Delta\boldsymbol{v}) - \boldsymbol{v}\cdot\nabla\xi + \nabla\cdot\boldsymbol{F}_R\end{aligned}} \tag{5.104}$$

5.2.2.1 Divergenzgleichung im p-System

Die Impulsgleichungen Glg.en (3.167) - (3.168) im p-System lauten vektoriell

$$\frac{\partial \boldsymbol{v}_h}{\partial t} = -\nabla\varphi - f\boldsymbol{k}\times\boldsymbol{v}_h - (\boldsymbol{v}_h\cdot\nabla)\,\boldsymbol{v}_h - \omega\frac{\partial \boldsymbol{v}_h}{\partial p} + \nabla\cdot\boldsymbol{F}_R^{(H)}. \tag{5.105}$$

Es ist für die Hereitung sinnvoll, hier ein $\boldsymbol{g}$ zu addieren und $-\nabla\varphi$ als dreidimensionalen Vektor zu interpretieren mit $-g$ in der z-Komponente. Somit ergibt eine Anwendung von $\nabla\cdot$ auf $-\nabla\varphi + \boldsymbol{g} = -\Delta_h\varphi$, wofür aber in der weiteren Herleitung einfach $\Delta\varphi$ notiert wird. Durch Applizieren des Operators $\nabla\cdot$ auf die einzelnen Terme erhält man somit

$$\begin{aligned}
\nabla\cdot\frac{\partial \boldsymbol{v}_h}{\partial t} &\overset{\text{(B.54)}}{=} \frac{\partial\delta}{\partial t},\\
-\nabla\cdot\nabla\varphi &= -\Delta\varphi,\\
-\nabla\cdot(f\boldsymbol{k}\times\boldsymbol{v}_h) &\overset{\text{(B.59)}}{=} -\boldsymbol{v}_h\cdot[\nabla\times(f\boldsymbol{k})] + f\boldsymbol{k}\cdot(\nabla\times\boldsymbol{v}_h) \overset{\text{(B.55)}}{=} -\boldsymbol{v}_h\cdot[-\boldsymbol{k}\times\nabla f + f\nabla\times\boldsymbol{k}] + f\zeta\\
&= \boldsymbol{v}_h\cdot\left(\boldsymbol{k}\times\beta\boldsymbol{j}\right) + f\zeta = -u\beta + f\zeta,\\
\nabla\cdot\left(-\omega\frac{\partial\boldsymbol{v}_h}{\partial p}\right) &\overset{\text{(B.53)}}{=} -\omega\frac{\partial\delta}{\partial p} - \frac{\partial\boldsymbol{v}_h}{\partial p}\cdot\nabla\omega.
\end{aligned} \tag{5.106}$$

Somit folgt

$$\boxed{\frac{\partial\delta}{\partial t} = -\Delta\varphi - u\beta + f\zeta - \nabla\cdot[(\boldsymbol{v}_h\cdot\nabla)\,\boldsymbol{v}_h] - \omega\frac{\partial\delta}{\partial p} - \frac{\partial\boldsymbol{v}_h}{\partial p}\cdot\nabla\omega + \nabla\cdot\boldsymbol{F}_R^{(H)}.} \tag{5.107}$$

Dies ist die Divergenzgleichung im p-System. Mit der Lamb-Transformation erhält man

$$\begin{aligned}
\nabla\cdot[(\boldsymbol{v}_h\cdot\nabla)\,\boldsymbol{v}_h] &= \Delta k - \nabla\cdot[\boldsymbol{v}_h\times(\nabla\times\boldsymbol{v}_h)] \overset{\text{Glg. (B.59)}}{=} \Delta k - (\nabla\times\boldsymbol{v}_h)^2 + \boldsymbol{v}_h\cdot(\nabla\times(\nabla\times\boldsymbol{v}_h))\\
&\overset{\text{Glg. (B.58)}}{=} \Delta k - (\nabla\times\boldsymbol{v}_h)^2 - \boldsymbol{v}_h\cdot(\Delta\boldsymbol{v}_h) + \boldsymbol{v}_h\cdot\nabla\delta.
\end{aligned} \tag{5.108}$$

Dies führt auf eine weitere Form der Divergenzgleichung:

$$\boxed{\begin{aligned}
\frac{\partial\delta}{\partial t} = &-\Delta\varphi - u\beta + f\zeta - \Delta k + (\nabla\times\boldsymbol{v}_h)^2 + \boldsymbol{v}_h\cdot(\Delta\boldsymbol{v}_h) - \boldsymbol{v}_h\cdot\nabla\delta\\
&-\omega\frac{\partial\delta}{\partial p} - \frac{\partial\boldsymbol{v}_h}{\partial p}\cdot\nabla\omega + \nabla\cdot\boldsymbol{F}_R^{(H)}
\end{aligned}} \tag{5.109}$$

Setzt man hier $\delta = \omega = 0$ ein, folgt die *Balancegleichung*

$$\Delta\varphi = -u\beta + f\zeta - \Delta k + (\nabla\times\boldsymbol{v}_h)^2 + \boldsymbol{v}_h\cdot(\Delta\boldsymbol{v}_h)\,. \tag{5.110}$$

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 divergenuzfrei. 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

$$P_\psi := a\boldsymbol{\eta}\cdot\nabla\psi, \tag{5.113}$$

wobei a das spezifische Volumen sei und ψ eine beliebige Funktion von Ort und Zeit. Differenziert man dies partiell nach der Zeit, erhält man

$$\frac{\partial P_\psi}{\partial t} = \frac{\partial a}{\partial t}\boldsymbol{\eta}\cdot\nabla\psi + a\frac{\partial\left(\nabla\times\boldsymbol{v}\right)}{\partial t}\cdot\nabla\psi + a\boldsymbol{\eta}\cdot\nabla\frac{\partial\psi}{\partial t}. \tag{5.114}$$

Zunächst wird Glg. (5.48) in Termen von a notiert

$$\frac{\partial}{\partial t}\mathrm{rot}\left(\boldsymbol{v}\right) = \nabla p\times\nabla a - \left(\boldsymbol{v}\cdot\nabla\right)\boldsymbol{\eta} - \boldsymbol{\eta}\nabla\cdot\boldsymbol{v} + \left(\boldsymbol{\eta}\cdot\nabla\right)\boldsymbol{v} + \nabla\times\boldsymbol{F}_R \tag{5.115}$$

In Absch. 5.1.3 hat man durch Projektion dieser Gleichung auf die lokale Senkrechte $\boldsymbol{k}$ eine Gleichung für $\frac{\partial\zeta}{\partial t}$ hergeleitet, analog wird hier mit einer Projektion auf $\nabla\psi$ verfahren. Man rechnet zunächst mit Glg. (B.62)

$$\begin{aligned}
\left(\boldsymbol{\eta}\cdot\nabla\right)\left(\boldsymbol{v}\cdot\nabla\psi\right) &= \nabla\psi\cdot\left[\left(\boldsymbol{\eta}\cdot\nabla\right)\boldsymbol{v}\right] + \boldsymbol{v}\cdot\left[\left(\boldsymbol{\eta}\cdot\nabla\right)\nabla\psi\right] \\
\Rightarrow \nabla\psi\cdot\left[\left(\boldsymbol{\eta}\cdot\nabla\right)\boldsymbol{v}\right] &= \left(\boldsymbol{\eta}\cdot\nabla\right)\left(\boldsymbol{v}\cdot\nabla\psi\right) - \boldsymbol{v}\cdot\left[\left(\boldsymbol{\eta}\cdot\nabla\right)\nabla\psi\right], && (5.116)\\
\left(\boldsymbol{v}\cdot\nabla\right)\left(\boldsymbol{\eta}\cdot\nabla\psi\right) &= \boldsymbol{\eta}\cdot\left[\left(\boldsymbol{v}\cdot\nabla\right)\nabla\psi\right] + \nabla\psi\cdot\left[\left(\boldsymbol{v}\cdot\nabla\right)\boldsymbol{\eta}\right] \\
\Rightarrow \nabla\psi\cdot\left[\left(\boldsymbol{v}\cdot\nabla\right)\boldsymbol{\eta}\right] &= \left(\boldsymbol{v}\cdot\nabla\right)\left(\boldsymbol{\eta}\cdot\nabla\psi\right) - \boldsymbol{\eta}\cdot\left[\left(\boldsymbol{v}\cdot\nabla\right)\nabla\psi\right]. && (5.117)
\end{aligned}$$

Man erhält somit

$$\begin{aligned}
a\frac{\partial\left(\nabla\times\boldsymbol{v}\right)}{\partial t}\cdot\nabla\psi &= a\left(\nabla p\times\nabla a\right)\cdot\nabla\psi - a\left(\boldsymbol{v}\cdot\nabla\right)\left(\boldsymbol{\eta}\cdot\nabla\psi\right) + a\boldsymbol{\eta}\cdot\left[\left(\boldsymbol{v}\cdot\nabla\right)\nabla\psi\right] \\
&\quad -a\left(\nabla\psi\cdot\boldsymbol{\eta}\right)\nabla\cdot\boldsymbol{v} + a\left(\boldsymbol{\eta}\cdot\nabla\right)\left(\boldsymbol{v}\cdot\nabla\psi\right) - a\boldsymbol{v}\cdot\left[\left(\boldsymbol{\eta}\cdot\nabla\right)\nabla\psi\right] + a\boldsymbol{F}_R\cdot\nabla\psi. && (5.118)
\end{aligned}$$

Es folgt

$$\begin{aligned}
\frac{\partial P_\psi}{\partial t} &= a\boldsymbol{\eta}\cdot\nabla\left(\frac{\partial\psi}{\partial t}\right) + a\left(\nabla p\times\nabla a\right)\cdot\nabla\psi - a\left(\boldsymbol{v}\cdot\nabla\right)\left(\boldsymbol{\eta}\cdot\nabla\psi\right) + a\boldsymbol{\eta}\cdot\left[\left(\boldsymbol{v}\cdot\nabla\right)\nabla\psi\right] \\
&\quad -a\left(\nabla\psi\cdot\boldsymbol{\eta}\right)\nabla\cdot\boldsymbol{v} + a\left(\boldsymbol{\eta}\cdot\nabla\right)\left(\boldsymbol{v}\cdot\nabla\psi\right) - a\boldsymbol{v}\cdot\left[\left(\boldsymbol{\eta}\cdot\nabla\right)\nabla\psi\right] \\
&\quad +\frac{\partial a}{\partial t}\boldsymbol{\eta}\cdot\nabla\psi + a\boldsymbol{F}_R\cdot\nabla\psi \\
&= a\boldsymbol{\eta}\cdot\nabla\left(\frac{\partial\psi}{\partial t}\right) + a\left(\nabla p\times\nabla a\right)\cdot\nabla\psi - a\left(\boldsymbol{v}\cdot\nabla\right)\left(\boldsymbol{\eta}\cdot\nabla\psi\right) + a\boldsymbol{\eta}\cdot\left[\left(\boldsymbol{v}\cdot\nabla\right)\nabla\psi\right] \\
&\quad +a\left(\boldsymbol{\eta}\cdot\nabla\right)\left(\boldsymbol{v}\cdot\nabla\psi\right) - a\boldsymbol{v}\cdot\left[\left(\boldsymbol{\eta}\cdot\nabla\right)\nabla\psi\right] - \left(\boldsymbol{v}\cdot\nabla a\right)\left(\boldsymbol{\eta}\cdot\nabla\psi\right) + a\boldsymbol{F}_R\cdot\nabla\psi. && (5.119)
\end{aligned}$$

Mit Glg. (B.60) folgt

$$\boldsymbol{\eta}\cdot\left[\left(\boldsymbol{v}\cdot\nabla\right)\nabla\psi\right] - \boldsymbol{v}\cdot\left[\left(\boldsymbol{\eta}\cdot\nabla\right)\nabla\psi\right] = 0. \tag{5.120}$$

Der *Ertel'sche Wirbelsatz* lautet somit

$$\boxed{\begin{aligned}
\frac{\partial P_\psi}{\partial t} &= a\boldsymbol{\eta}\cdot\nabla\left(\frac{\partial\psi}{\partial t}\right) + a\left(\nabla p\times\nabla a\right)\cdot\nabla\psi - a\left(\boldsymbol{v}\cdot\nabla\right)\left(\boldsymbol{\eta}\cdot\nabla\psi\right) \\
&\quad +a\left(\boldsymbol{\eta}\cdot\nabla\right)\left(\boldsymbol{v}\cdot\nabla\psi\right) - \left(\boldsymbol{v}\cdot\nabla a\right)\left(\boldsymbol{\eta}\cdot\nabla\psi\right) + a\boldsymbol{F}_R\cdot\nabla\psi. && (5.121)
\end{aligned}}$$

Mit der materiellen Ableitung kann man dies zu

$$\boxed{\frac{DP_\psi}{Dt} = a\boldsymbol{\eta}\cdot\nabla\left(\frac{D\psi}{Dt}\right) + a\left(\nabla p\times\nabla a\right)\cdot\nabla\psi + a\boldsymbol{F}_R\cdot\nabla\psi \qquad (5.122)}$$

umformulieren.

5.3.2 Definition und Eigenschaften der PV

Die *potentielle Vorticity* P ist definiert durch

$$P := a\boldsymbol{\eta}\cdot\nabla\theta, \qquad (5.123)$$

sie entsteht also, indem man in Glg. (5.113) für ψ die potentielle Temperatur θ einsetzt. Diese ist eine Funktion von Druck and spezifischem Volumen, also verschindet in Glg. (5.121) der Term mit dem Vektorprodukt. Bei adiabatischen Prozessen gilt also,

$$\boxed{\frac{\partial P}{\partial t} = -a\left(\boldsymbol{v}\cdot\nabla\right)\left(\boldsymbol{\eta}\cdot\nabla\psi\right) - \left(\boldsymbol{\eta}\cdot\nabla\psi\right)\left(\boldsymbol{v}\cdot\nabla a\right) + a\boldsymbol{F}_R\cdot\nabla\theta. \qquad (5.124)}$$

in diesem Fall ist die potentielle Vorticity also bis auf die Reibung eine Erhaltungsgröße:

$$\boxed{\frac{DP}{Dt} = a\boldsymbol{F}_R\cdot\nabla\theta \qquad (5.125)}$$

Für die potentielle Vorticity gilt mit Glg. (B.126)

$$\begin{aligned} P &= a\boldsymbol{\eta}\cdot\nabla\theta = a\boldsymbol{f}\cdot\nabla\theta \\ &\quad + a\left[\left(\frac{\partial w}{\partial y} - \frac{\partial v}{\partial z} - \frac{v}{r}\right)\frac{\partial\theta}{\partial x} + \left(\frac{\partial u}{\partial z} - \frac{\partial w}{\partial x} + \frac{u}{r}\right)\frac{\partial\theta}{\partial y} + \left(\frac{\partial v}{\partial x} - \frac{\partial u}{\partial y} - \frac{u\tan(\varphi)}{r}\right)\frac{\partial\theta}{\partial z}\right]. \end{aligned} \qquad (5.126)$$

Hier macht man nun folgende Näherungen:

- Näherung für Flachgeofluide (s. Absch. 3.4.5.2)
- Vernachlässigung der Vertikalgeschwindigkeit bei der Berechnung der Rotation des Windfeldes

Dann erhält man

$$P = a\eta\frac{\partial\theta}{\partial z} + a\left[-\frac{\partial v}{\partial z}\frac{\partial\theta}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial z}\frac{\partial\theta}{\partial y}\right]. \qquad (5.127)$$

In einer hydrostatischen Atmosphäre kann man in Glg. (5.127) die vertikalen Ableitungen ins p-System transformieren:

$$P = -gf\frac{\partial\theta}{\partial p} - g\left(\frac{\partial v}{\partial x} - \frac{\partial u}{\partial y} - \frac{u\tan(\varphi)}{a}\right)\frac{\partial\theta}{\partial p} + g\left[\frac{\partial v}{\partial p}\frac{\partial\theta}{\partial x} - \frac{\partial u}{\partial p}\frac{\partial\theta}{\partial y}\right] \qquad (5.128)$$

Transformiert man hier die horizontalen Ableitungen mit Glg. (3.156) auf eine generalisierte Vertikalkoordinte μ, folgt

$$\frac{P}{g} = \ldots\Big|_\mu - \left(\frac{\partial\mu}{\partial x}\right)_z\frac{\partial v}{\partial\mu}\frac{\partial\theta}{\partial p} + \left(\frac{\partial\mu}{\partial y}\right)_z\frac{\partial u}{\partial\mu}\frac{\partial\theta}{\partial p} + \frac{\partial v}{\partial p}\frac{\partial\theta}{\partial\mu}\left(\frac{\partial\mu}{\partial x}\right)_z - \frac{\partial u}{\partial p}\frac{\partial\theta}{\partial\mu}\left(\frac{\partial\mu}{\partial y}\right)_z, \qquad (5.129)$$

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

$$P = -g\eta_p\frac{\partial\theta}{\partial p} + g\left[\frac{\partial v}{\partial p}\left(\frac{\partial\theta}{\partial x}\right)_p - \frac{\partial u}{\partial p}\left(\frac{\partial\theta}{\partial y}\right)_p\right], \qquad (5.130)$$

wobei der Index p bedeutet, dass partielle Ableitungen im p-System zu bilden sind. In isentropen Koordinaten bleibt nur der erste Term bestehen,

$$P = -g\eta_\theta \left(\frac{\partial p}{\partial \theta}\right)^{-1} \equiv \frac{\eta_\theta}{\sigma_\theta}, \tag{5.131}$$

wobei die *hydrostatische Stabilität im θ−System*, definiert durch

$$\sigma_\theta := -\frac{1}{g}\frac{\partial p}{\partial \theta}, \tag{5.132}$$

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

$$\omega := 2\pi f = \frac{2\pi}{T}. \tag{6.1}$$

Analog ist die Wellenlänge $\lambda > 0$ die Länge, nach der sich das Bewegungsmuster wiederholt. Wellenzahl $\varkappa$ und Kreiswellenzahl k sind anlog zu Frequenz und Kreisfrequenz definiert durch

$$\varkappa := \frac{1}{\lambda}, \tag{6.2}$$

$$k := \frac{2\pi}{\lambda}. \tag{6.3}$$

Eine Welle der Größe a wird beschrieben durch eine Gleichung der Form

$$a\left(x,t\right) = Af\left(kx - \omega t + \varphi\right). \tag{6.4}$$

Dabei ist f eine reell- oder komplexwertige, $2\pi-$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. *evaneszente 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

$$a\left(\boldsymbol{r},t\right) = Af\big(\varphi\left(\boldsymbol{r},t\right)\big) \tag{6.5}$$

mit $\varphi = \varphi\left(\boldsymbol{r},t\right)$ als Phasenfunktion. Die Phasenfunktion kann zum Beispiel die Gestalt

$$\varphi\left(\boldsymbol{r},t\right) = \boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r} - \omega t \tag{6.6}$$

haben, hierbei bezeichnet man $\boldsymbol{k} = \left(k_x, k_y, k_z\right)^T$ 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

$$\frac{d\varphi\left(\boldsymbol{r},t\right)}{dt} = \boldsymbol{k}\cdot\frac{d\boldsymbol{r}}{dt} - \omega \tag{6.7}$$

Setzt man die linke Seite gleich Null, bewegt sich also mit einem Punkt konstanter Phase mit, und wählt eine Trajektorie parallel zu $\boldsymbol{k}$, so erhält man die Phasengeschwindigkeit

$$c = \frac{\omega}{k} = \frac{\lambda}{T} = \lambda f. \tag{6.8}$$

Die Abhängigkeit

$$\omega = \omega(k) \tag{6.9}$$

bezeichnet man als *Dispersionsrelation*. Nun betrachtet man die Übelagerung $f(x,t) = f_1(x,t) + f_2(x,t)$ zweier Wellen:

$$\begin{aligned} f_1(x,t) &= -\cos(k_1 x - \omega_1 t) && (6.10)\\ f_1(x,t) &= \cos(k_2 x - \omega_2 t) && (6.11)\\ f(x,t) &= -\cos(k_1 x - \omega_1 t) + \cos(k_2 x - \omega_2 t) && (6.12) \end{aligned}$$

Mit Glg. (A.68) folgt

$$\begin{aligned} -\cos(\alpha) + \cos(\beta) &= 1 - \cos(\alpha) - 1 + \cos(\beta) = 2\sin^2\left(\frac{\alpha}{2}\right) - 2\sin^2\left(\frac{\beta}{2}\right)\\ &= 2\sin^2\left(\frac{\alpha}{2}\right) - 2\sin^2\left(\frac{\alpha}{2}\right)\sin^2\left(\frac{\beta}{2}\right) - 2\sin^2\left(\frac{\beta}{2}\right) + 2\sin^2\left(\frac{\alpha}{2}\right)\sin^2\left(\frac{\beta}{2}\right)\\ &= 2\left[\sin^2\left(\frac{\alpha}{2}\right)\cos^2\left(\frac{\beta}{2}\right) - \cos^2\left(\frac{\alpha}{2}\right)\sin^2\left(\frac{\beta}{2}\right)\right]\\ &= 2\left[\sin\left(\frac{\alpha}{2}\right)\cos\left(\frac{\beta}{2}\right) - \cos\left(\frac{\alpha}{2}\right)\sin\left(\frac{\beta}{2}\right)\right]\left[\sin\left(\frac{\alpha}{2}\right)\cos\left(\frac{\beta}{2}\right) + \cos\left(\frac{\alpha}{2}\right)\sin\left(\frac{\beta}{2}\right)\right]\\ &= 2\sin\left(\frac{\alpha-\beta}{2}\right)\sin\left(\frac{\alpha+\beta}{2}\right). && (6.13) \end{aligned}$$

Es gilt also

$$f(x,t) = 2\sin\left(\frac{\Delta k x - \Delta\omega t}{2}\right)\sin\left(\overline{k}x - \overline{\omega}t\right) \tag{6.14}$$

mit

$$\begin{aligned} \Delta k &:= k_2 - k_1, && (6.15)\\ \Delta\omega &:= \omega_2 - \omega_1, && (6.16)\\ \overline{k} &:= \frac{k_1 + k_2}{2}, && (6.17)\\ \overline{\omega} &:= \frac{\omega_1 + \omega_2}{2}. && (6.18) \end{aligned}$$

Die Einhüllende $\sin\left(\frac{\Delta k x - \Delta\omega t}{2}\right)$ bewegt sich also mit der Geschwindigkeit

$$v_e = \frac{\Delta\omega}{\Delta k}. \tag{6.19}$$

Man definiert daher die *Gruppengeschwindigkeit* c_{gr} durch

$$c_{\mathrm{gr}} := \frac{\partial\omega}{\partial k}. \tag{6.20}$$

Sie kann also aus der Dipersionsrelation abgeleitet werden. Es ist die Geschwindigkeit, mit der sich Wellenpakete bewegen, mit der also Energie transportiert wird. Ist

$$c_{\mathrm{gr}} = c \tag{6.21}$$

unabhängig von k, so bezeichnet man die Welle als *dispersionsfrei*. Man kann die Gruppengeschwindigkeit vektoriell zu

$$c_{\mathrm{gr}} = \nabla_{\boldsymbol{k}}\omega. \tag{6.22}$$

verallgemeinern. Mit $\omega = ck$ kann man schreiben

$$c_{\mathrm{gr}} = \frac{d\omega}{dk} = c + k\frac{dc}{dk} = c + k\frac{d\lambda}{dk}\frac{dc}{d\lambda} = c - \frac{2\pi}{k}\frac{dc}{dy} = c - \lambda\frac{dc}{d\lambda}. \tag{6.23}$$

Im Fall $dc/d\lambda < 0$ spricht man von *anormaler Dispersion*. In diesem Fall propagiert die Energie schneller als die Phasengeschwindigkeit. Im Fall

$$\frac{dc}{d\lambda}\lambda > c \Leftrightarrow \frac{dc}{d\lambda} > \frac{c}{\lambda} = f \tag{6.24}$$

bzw.

$$\frac{d\omega}{dk} < 0 \tag{6.25}$$

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

$$S := \frac{H}{\lambda} \tag{6.26}$$

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 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

$$f(A+B) \neq f(A) + f(B)\,, \tag{6.27}$$

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

$$\mathcal{O}(A_0) = \mathcal{O}(A') + 1, \tag{6.28}$$

daher gilt

$$\mathcal{O}(A'^2) = \mathcal{O}(A_0) - 2. \tag{6.29}$$

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

$$\mathcal{O}\left(\frac{\partial A'}{\partial t}\right) = \mathcal{O}\left(\omega A'\right), \tag{6.30}$$

$$\mathcal{O}\left(\frac{\partial A'}{\partial x}\right) = \mathcal{O}\left(kA'\right) \tag{6.31}$$

$$\mathcal{O}\left(\frac{\frac{\partial A'}{\partial t}}{A\frac{\partial A'}{\partial x}}\right) = \mathcal{O}\left(\frac{\omega}{Ak}\right) = \mathcal{O}\left(\frac{c}{A}\right). \tag{6.32}$$

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 Adiabatie Drücke und Dichten eindeutig aufeinander abbilden. Es wird eine sich in x-Richtung ausbreitende Welle betrachtet. Der Störungsansatz für Geschwindigkeit und Dichte lautet

$$u = U + u', \tag{6.33}$$

$$\varrho = \varrho_0 + \varrho'. \tag{6.34}$$

Das Gleichungssystem lautet mit den abkürzenden Ersetzungen

$$\varrho' \rightarrow \varrho, \tag{6.35}$$

$$u' \rightarrow u \tag{6.36}$$

und den im vorigen Abschnitt hergeleiteten Näherungen somit

$$\frac{\partial u}{\partial t} + U\frac{\partial u}{\partial x} = -\frac{1}{\varrho_0}\frac{\partial p}{\partial x} \tag{6.37}$$

$$\frac{\partial \varrho}{\partial t} + U\frac{\partial \varrho}{\partial x} = -\varrho_0\frac{\partial u}{\partial x} \tag{6.38}$$

$$\varrho(p) = \varrho_0\left(\frac{p}{p_0}\right)^{c_v/c_p} \tag{6.39}$$

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. (3.212). Um in Glg. (6.38) die Dichteänderung durch den Druck auszudrücken, benutzt man die Kettenregel:

$$\frac{\partial \varrho}{\partial t} = \frac{\partial \varrho}{\partial p}\frac{\partial p}{\partial t} = \frac{\varrho_0 c_v}{p_0 c_p}\left(\frac{p}{p_0}\right)^{c_v/c_p - 1}\frac{\partial p}{\partial t} = \frac{\varrho_0 c_v}{p_0 c_p}\frac{\partial p}{\partial t}, \tag{6.40}$$

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

$$u = u_0 \exp\left[i\left(kx - \omega t\right)\right], \tag{6.41}$$

$$p = P \exp\left[i\left(kx - \omega t\right)\right] \tag{6.42}$$

mit eventuell komplexen Amplituden u_0, P. Setzt man dies in das Gleichungssystem ein, folgt

$$\begin{aligned} -i\omega u_0 + Uiku_0 &= -\frac{1}{\rho_0} ikP, && (6.43)\\ -\frac{\rho_0 c_v}{p_0 c_p} i\omega P + Uik\frac{\rho_0 c_v}{p_0 c_p} P &= -\rho_0 iku_0 \\ \Leftrightarrow -i\omega P + UikP &= -\frac{p_0 c_p}{c_v} iku_0. && (6.44) \end{aligned}$$

Als Matrixgleichung wird dies zu

$$\begin{pmatrix} -i\omega + Uik & \frac{1}{\rho_0} ik \\ ik\frac{p_0 c_p}{c_v} & -i\omega + Uik \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_0 \\ P \end{pmatrix} = 0. \tag{6.45}$$

Nichttriviale Lösungen existieren für

$$(\omega - Uk)^2 - k^2 \frac{p_0 c_p}{\rho_0 c_v} = 0 \Leftrightarrow \omega = Uk \pm k\sqrt{\frac{p_0 c_p}{\rho_0 c_v}}. \tag{6.46}$$

Für die Phasengeschwindigkeit c folgt also

$$c = U \pm \sqrt{R_d T \varkappa}. \tag{6.47}$$

Hierbei wurde die Zustandsgleichung eingesetzt, T ist die Gleichgewichtstemperatur und $\varkappa = c_p/c_v > 1$ 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

$$\begin{aligned} \frac{\partial u}{\partial t} &= -g\frac{\partial \eta}{\partial x}, && (6.48)\\ \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial w}{\partial z} &= 0 && (6.49) \end{aligned}$$

lautet. Man geht von einer homogenen Tiefe $D > 0$ aus und fordert als Randbedingung

$$w(z = -D) \overset{!}{=} 0. \tag{6.50}$$

Es werden nun die Ansätze

$$\begin{aligned} u &= U(z)\exp(ikx - i\omega t), && (6.51)\\ w &= W(z)\exp(ikx - i\omega t). && (6.52) \end{aligned}$$

Die Oberflächenauslenkung η und die Vertikalgeschwindigkeit w hängen über

$$\begin{aligned} \frac{\partial \eta}{\partial t}(z = 0) &\overset{!}{=} w(z = 0), && (6.53)\\ \Rightarrow -i\omega\hat{\eta} &= W(0) && (6.54) \end{aligned}$$

zusammen, wobei $\hat{\eta}$ die Amplitude der Oberflächenauslenkung ist. Glg. (6.48) ergibt somit bei $z = 0$

$$\begin{aligned} -i\omega U(0) &= g\frac{k}{\omega}W(0) \\ \Rightarrow \omega^2 &= igk\frac{W(0)}{U(0)}. \end{aligned} \tag{6.55}$$

Aus Glg. (6.49) folgt

$$ikU(z) + W' = 0 \Rightarrow W' = -ikU. \tag{6.56}$$

Dies und die Glg.en (6.50) und (6.54) ist durch

$$U(z) = \frac{\hat{\eta}\omega}{\sinh(kD)}\cosh[k(D+z)], \tag{6.57}$$

$$W(z) = -\frac{i\hat{\eta}\omega}{\sinh(kD)}\sinh[k(D+z)]. \tag{6.58}$$

erfüllt. Somit folgt aus Glg. (6.55) die Disperionsrelation

$$\omega^2 = gk\tanh(kD). \tag{6.59}$$

Im Falle einer Dichtediskontinuität $\rho_1 < \rho_2$ mit einem leichteren Fluid über einem schwereren Fluid lautet der Druckgradientterm unterhalb der Welle

$$\frac{1}{\rho_2}\frac{\partial p}{\partial x} = \frac{1}{\rho_2}\frac{\partial\left(g\rho_2\eta - g\rho_1\eta\right)}{\partial x} = g\frac{\Delta\rho}{\rho_2}\frac{\partial\eta}{\partial x} \tag{6.60}$$

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 $g \to g' := g\frac{\Delta\rho}{\rho_2}$ vorzunehmen ist. Für die Dispersionsrelation erhält man

$$\omega^2 = g'k\tanh(k(z_w - z_0)). \tag{6.61}$$

wobei z_w die Position der Dichtediskontinuität und z_0 die Tiefenkoordinate des Grunds bezeichnet. Im Fall $\lambda \gg D$ folgt hieraus

$$\omega^2 = k^2 gD \tag{6.62}$$

als Dispersionsrelation der sogenannten *Flachwasserwellen*. Im umgekehrten Fall $\lambda \ll D$ folgt die Dispersionsrelation der *Tiefwasserwellen*

$$\omega^2 = gk. \tag{6.63}$$

6.3.1.1 Stokes-Drift

Definiere

$$\gamma := \frac{\hat{\eta}\omega}{\sinh(kD)}, \tag{6.64}$$

dann lässt sich Glg. (6.57) als

$$U(z) = \gamma\cosh[k(D+z)] \tag{6.65}$$

notieren. Integriert man dies von $z = -D$ bis $z = \eta$, folgt

$$\int_{-D}^{\eta}\gamma\cosh[k(D+z)]\,dz = \frac{\gamma}{k}\sinh(k(D+\eta)) \overset{\text{Glg. (A.63)}}{=} \frac{\gamma}{k}\left[\sinh(kD)\cosh(k\eta) + \cosh(kD)\sinh(k\eta)\right]. \tag{6.66}$$

Entwickelt man dies in erster Ordnung in $k\eta$ (Steilheit $\ll 1$), folgt

$$\int_{-D}^{\eta} \gamma \cosh\left[k\left(D+z\right)\right] dz \approx \frac{\gamma}{k}\left[\sinh\left(kD\right)+\cosh\left(kD\right)k\eta\right]. \tag{6.67}$$

Multipliziert man dies mit dem Realtail von $\exp\left(ikx-iwt\right)$, erhält man den Ausdruck

$$\frac{d\dot{v}_h}{dy} = \frac{\gamma}{k}\left[\sinh\left(kD\right)+\cosh\left(kD\right)k\eta\right]\cos\left(kx-\omega t\right) \tag{6.68}$$

für die vertial integrierte Volumenflussdichte. Setzt man den Realteil der Obeflächenauslenkung $\eta = \hat{\eta}e^{ikx-i\omega t}$ ein, erhält man

$$\frac{d\dot{v}_h}{dy} = \frac{\gamma}{k}\left[\sinh\left(kD\right)+\cosh\left(kD\right)k\hat{\eta}\cos\left(kx-\omega t\right)\right]\cos\left(kx-\omega t\right). \tag{6.69}$$

Integriert man dies über eine Periode folgt

$$\frac{d\dot{v}_h}{dy} = \frac{\gamma}{k}\cosh\left(kD\right)k\hat{\eta}\frac{1}{2} = \frac{\hat{\eta}^2\omega}{2\tanh\left(kD\right)} = \frac{\hat{\eta}^2}{2}\sqrt{\frac{gk}{\tanh\left(kD\right)}}. \tag{6.70}$$

Diesen Volumenstrom in Richtung des Wellenvektors bezeichnet man als *Stokes-Drift*. Wegen

$$\overline{u}\left(z\right) = 0 \tag{6.71}$$

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

$$\begin{aligned}
\frac{\partial u}{\partial t} &= fv - g\frac{\partial \eta}{\partial x}, && (6.72)\\
\frac{\partial v}{\partial t} &= -fu - g\frac{\partial \eta}{\partial y}, && (6.73)\\
\frac{\partial \eta}{\partial t} &= -H\left(\frac{\partial u}{\partial x}+\frac{\partial v}{\partial y}\right). && (6.74)
\end{aligned}$$

Hierbei wird von der f-Ebenen-Approximation ausgegangen. Man macht einen Ansatz

$$\begin{aligned}
u &= u_0 \exp\left[i\left(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}-\omega t\right)\right], && (6.75)\\
v &= v_0 \exp\left[i\left(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}-\omega t\right)\right], && (6.76)\\
\eta &= \hat{\eta} \exp\left[i\left(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}-\omega t\right)\right]. && (6.77)
\end{aligned}$$

mit einem horizontalen Wellenvektor $\boldsymbol{k} = \left(k_x, k_y\right)^T$ sowie eventuell komplexen Amplituden u_0, v_0, η_0. Setzt man dies ein, erhält man

$$\begin{aligned}
-i\omega u_0 &= fv_0 - gik_x\hat{\eta}, && (6.78)\\
-i\omega v_0 &= -fu_0 - gik_y\hat{\eta}, && (6.79)\\
-i\omega\hat{\eta} &= -Hik_x u_0 - Hik_y v_0. && (6.80)
\end{aligned}$$

In Matrixschreibweise lautet dies

$$\begin{pmatrix} -i\omega & -f & gik_x \\ f & -i\omega & gik_y \\ Hik_x & Hik_y & -i\omega \end{pmatrix}\begin{pmatrix} u_0 \\ v_0 \\ \hat{\eta} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}. \tag{6.81}$$

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:

$$\begin{aligned} & (-i\omega)\left[(-i\omega)^2 + Hgk_y^2\right] - f\left[-f(-i\omega) + Hgk_xk_y\right] + Hik_x\left[-fgik_y - (-i\omega)\,gik_x\right] = 0 \\ \Leftrightarrow \quad & -\omega\left[-\omega^2 + Hgk_y^2\right] + f\left[-f\omega + iHgk_xk_y\right] + Hk_x\left[-fgik_y - \omega gk_x\right] = 0 \end{aligned} \tag{6.82}$$

Also lautet die Dispersionsrelation der Poincaré-Wellen

$$\omega^2 = f^2 + Hgk^2. \tag{6.83}$$

Es ist $\omega^2 \geq f^2$, der Betrag des Coriolis-Parameters ist eine untere Schranke der Kreisfrequenz. Für die Phasengeschwindigkeit gilt

$$c^2 = \frac{\omega^2}{k^2} = gH + \frac{f^2}{k^2} = gH + f^2L^2\frac{1}{4\pi^2} \tag{6.84}$$

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 $f^2L^2\frac{1}{4\pi^2}$ höher. Um eine Grenzwellenlänge R_o zu bestimmen, ab der die Wirkung der Coriolis-Kraft deutlich wird, setzt man

$$f_0^2R_o^2\frac{1}{4\pi^2} = \frac{gH}{4\pi^2} \approx 0{,}025gH. \tag{6.85}$$

Daraus erhält man für den barotropen Rossby-Radius

$$R_o = \frac{\sqrt{gH}}{|f|}. \tag{6.86}$$

Setzt man typische Werte ein, folgt $R_o \approx 2000$ km.

6.3.3 Kapillarwellen

Im Fall $\eta = \hat{\eta}\exp(ikx - i\omega t)$ folgt

$$-\frac{1}{\rho}\frac{\partial p_k}{\partial x} = -\frac{k^2\sigma}{\rho}\frac{\partial \eta}{\partial x}. \tag{6.87}$$

Addiert man dies zur rechten Seite von Glg. (6.48), erhält man

$$-g\frac{\partial\eta}{\partial x} \quad \rightarrow \quad -g\frac{\partial\eta}{\partial x} - \frac{\sigma k^2}{\varrho}\frac{\partial\eta}{\partial x} = -g\left(1 + \frac{k^2\sigma}{\varrho g}\right)\frac{\partial\eta}{\partial x}, \tag{6.88}$$

Man muss also

$$g \rightarrow g\left(1 + \frac{k^2\sigma}{\varrho g}\right) \tag{6.89}$$

ersetzen, der Rest der Herleitung überträgt sich. Man erhält also die Dispersionsrelation der Kapillarwellen

$$\omega^2 = kg\left(1 + \frac{k^2\sigma}{\varrho g}\right)\tanh(kD)\,. \tag{6.90}$$

Im Fall sehr kurzer Wellen erhält man den Grenzfall

$$\omega^2 \quad = \quad \frac{k^3\sigma}{\varrho} \Rightarrow c = \sqrt{\frac{2\pi\sigma}{\varrho\lambda}}. \tag{6.91}$$

In diesem Grenzfall sind Kapillarwellen also anormal dispergiert.

Um eine Grenzwällenlänge λ_K herzuleiten, ab der kapillare Effekte wichtig werden, rechnet man

$$\frac{k_K^2\sigma}{\varrho g} \overset{!}{\geq} \frac{1}{10} \Leftrightarrow \lambda_K \leq \sqrt{\frac{40\pi^2\sigma}{\varrho g}}. \tag{6.92}$$

Die Oberflächensapnnung von Wasser beträgt ca. $\sigma \sim 75$ mN/m, woraus folgt

$$\lambda_K \sim 5,5 \text{ cm}. \tag{6.93}$$

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. (3.146) werden unter Vernachlässigung der advektiven Terme zu

$$\frac{du}{dt} \quad = \quad f_0 v, \tag{6.94}$$

$$\frac{dv}{dt} \quad = \quad -f_0 u. \tag{6.95}$$

Für den Coriolis-Parameter wird dabei ein ortsunabhängiger Wert f_0 verwendet, um den $\beta-$Effekt zu umgehen. Man macht einen Ansatz

$$u \quad = \quad U\exp(-i\omega t)\,, \tag{6.96}$$

$$v \quad = \quad V\exp(-i\omega t) \tag{6.97}$$

mit eventuell komplexen Amplituden U, V. Setzt man dies in das Gleichungssystem ein, erhält man

$$-i\omega U \quad = \quad f_0 V, \tag{6.98}$$

$$-i\omega V \quad = \quad -f_0 U. \tag{6.99}$$

Als Matrixgleichung wird dies zu

$$\begin{pmatrix} -i\omega & -f_0 \\ f_0 & -i\omega \end{pmatrix}\begin{pmatrix} U \\ V \end{pmatrix} = 0. \tag{6.100}$$

Nichttriviale Lösungen existieren für

$$-\omega^2 + f_0^2 \quad = \quad 0, \tag{6.101}$$

also für

$$\omega = \pm f. \tag{6.102}$$

Die Teilchen bewegen sich also auf einer Kreisbahn mit Radius

$$R_I = \frac{V}{f_0}. \tag{6.103}$$

Setzt man eine Geschwindigkeit von $1\,\frac{\mathrm{m}}{\mathrm{s}}$ ein, so folgt beispielsweise $R_I = 10$ km mit $f_0 = 10^{-4}\,\mathrm{s}^{-1}$. Für die Periode gilt

$$T = \frac{2\pi}{f_0} \approx \frac{1\,\mathrm{d}}{2\sin(\varphi)}, \tag{6.104}$$

$\mathrm{d} = 24$ 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 $\beta-$Effektes keine geschlossenen Kreisbahnen. Ebenso wurde <u>kein</u> Windfeld $\boldsymbol{v}_h(\boldsymbol{r}, t)$ 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

$$u(x = 0) = 0. \tag{6.105}$$

Gesucht wird nun nach Lösungen, die dies global erfüllen. Hierzu geht man wieder von der f-Ebene aus. Das Gleichungssystem reduziert sich auf

$$0 = -g\frac{\partial \eta}{\partial x} + fv, \tag{6.106}$$

$$\frac{\partial v}{\partial t} = -g\frac{\partial \eta}{\partial y}, \tag{6.107}$$

$$\frac{\partial \eta}{\partial t} + H\frac{\partial v}{\partial y} = 0. \tag{6.108}$$

Aus Glg. (6.106) folgt, dass v geostrophisch balanciert ist, sodass man v aus den verbleibenden beiden Gleichugen eliminieren kann:

$$\frac{\partial^2 \eta}{\partial t \partial x} = -f\frac{\partial \eta}{\partial y}, \tag{6.109}$$

$$\frac{\partial \eta}{\partial t} + H\frac{g}{f}\frac{\partial^2 \eta}{\partial x \partial y} = 0. \tag{6.110}$$

Hier macht man den harmonischen Wellenansatz

$$\eta = \eta_0 \exp\left[i\left(k_x x + k_y y - \omega t\right)\right], \tag{6.111}$$

woraus folgt

$$-iwik_x = -fik_y \Rightarrow wk_x = -ifk_y, \tag{6.112}$$

$$-i\omega + H\frac{g}{f}ik_x ik_y = 0 \Rightarrow i\omega = -H\frac{g}{f}k_x k_y. \tag{6.113}$$

Aus Glg. (6.112) folgt

$$k_x = -\frac{i}{\omega}fk_y, \tag{6.114}$$

Abbildung 6.2: Penetrationslängen der Kelvin-Wellen.

was in Glg. (6.113) eingesetzt

$$i\omega = -H\frac{g}{f}k_y\left(-\frac{i}{\omega}fk_y\right) = iH\frac{g}{\omega}k_y^2 \tag{6.115}$$

ergibt. Definiert man $\varkappa$ durch

$$\varkappa := \frac{\omega}{\sqrt{gH}} > 0 \tag{6.116}$$

mit einer als positiv angenommenen Kreisfrequenz $\omega > 0$, folgt

$$k_y = \pm\varkappa. \tag{6.117}$$

Dies ergibt umgeformt

$$\omega = \pm k_y\sqrt{gH}. \tag{6.118}$$

Mit Glg. (6.112) folgt

$$k_x = \mp if\frac{1}{\sqrt{gH}}. \tag{6.119}$$

η darf als Funktion des Abstands von der Küste nicht exponentiell ansteigen, daher gilt bei $f > 0$ das negative Vorzeichen in Glg. (6.117), bei $f < 0$ das positive. Auf der Nordhalbkugel hat die Kelvin-Welle die Küste also rechts von der Ausbreitungsrichtung, auf der Südhalbkugel links.

Die Penetrationslängen l der Kelvin-Wellen ergeben sich zu

$$l = l(f, H) = \frac{2\pi\sqrt{gH}}{|f|} = 2\pi R_o \tag{6.120}$$

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 $f = f_0$ setzen, man setzt stattdessen die $\beta-$Ebene

$$f = \beta y \tag{6.121}$$

mit

$$\beta := \left.\frac{\partial f}{\partial y}\right|_{\varphi=0} \tag{6.122}$$

an. Damit lauten die Glg.en (6.72) - (6.74)

$$\frac{\partial u}{\partial t} = -g\frac{\partial \eta}{\partial x} + \beta y v, \tag{6.123}$$

$$\frac{\partial v}{\partial t} = -g\frac{\partial \eta}{\partial y} - \beta y u, \tag{6.124}$$

$$\frac{\partial \eta}{\partial t} + H\left(\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y}\right) = 0. \tag{6.125}$$

Nun sucht man nach Lösungen mit $v = 0$. In diesem Fall gilt

$$\frac{\partial u}{\partial t} = -g\frac{\partial \eta}{\partial x}, \tag{6.126}$$

$$0 = -g\frac{\partial \eta}{\partial y} - \beta y u, \tag{6.127}$$

$$\frac{\partial \eta}{\partial t} + H\frac{\partial u}{\partial x} = 0. \tag{6.128}$$

Über

$$u = -\frac{g}{\beta y}\frac{\partial \eta}{\partial y} \tag{6.129}$$

lässt sich u eliminieren:

$$-\frac{g}{\beta y}\frac{\partial^2 \eta}{\partial t \partial y} = -g\frac{\partial \eta}{\partial x} \tag{6.130}$$

$$\frac{\partial \eta}{\partial t} - \frac{gH}{\beta y}\frac{\partial^2 \eta}{\partial x \partial y} = 0 \tag{6.131}$$

Der Ansatz

$$\eta = \hat{\eta}\exp\left[i\left(k_x x + k_y y - \omega t\right)\right] \tag{6.132}$$

führt auf

$$-\frac{g}{\beta y}k_y\omega = -gik_x \Rightarrow k_y = \frac{1}{\omega}\beta y i k_x, \tag{6.133}$$

$$-i\omega + \frac{gH}{\beta y}k_x k_y = 0 \Rightarrow \omega^2 = gHk_x^2. \tag{6.134}$$

Es gilt also

$$k_x = \pm\frac{\omega}{\sqrt{gH}}. \tag{6.135}$$

Für k_y folgt

$$k_y = \frac{1}{\omega}\beta y i k_x = \pm i\frac{\beta y}{\sqrt{gH}}. \tag{6.136}$$

Nur das Pluszeichen kommt in Frage. Die Lösung lautet also

$$\eta = \hat{\eta}\exp\left[i\left(k_x x + i\frac{\beta y^2}{\sqrt{gH}} - \sqrt{gH}k_x t\right)\right]. \tag{6.137}$$

Um die meridionale Ausdehnung y_0 dieser Wellen abzuschätzen, setzt man

$$1 = \frac{2\omega y_0^2}{\sqrt{gH}} \tag{6.138}$$

an. Hieraus folgt

$$y_0 = \sqrt{R\frac{\sqrt{gH}}{2\omega}} = 2071 \text{ km} \tag{6.139}$$

mit R als Äquatorradius und $H = 1$ km.

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 (3.148) - (3.149) globale analytische Lösungen. Zunächst rechnet man

$$\frac{\partial^2 d}{\partial t^2} = -D\nabla\cdot\frac{\partial \boldsymbol{v}_h}{\partial t}. \tag{6.140}$$

Bildet man die Divergenz von Glg. (3.148), folgt mit Glg. (B.59)

$$\begin{aligned}\nabla\cdot\frac{\partial \boldsymbol{v}_h}{\partial t} &= f\zeta - g\Delta d \Rightarrow \frac{\partial^2 d}{\partial t^2} = -D\left(f\zeta - g\Delta d\right)\\ \Rightarrow \frac{\partial^3 d}{\partial t^3} &= -D\left[f\frac{\partial\zeta}{\partial t} - g\Delta\frac{\partial d}{\partial t}\right].\end{aligned} \tag{6.141}$$

Mit Glg. (5.61) folgt näherungsweise

$$\frac{\partial\zeta}{\partial t} = \frac{f}{D}\frac{\partial d}{\partial t} \Rightarrow \frac{\partial^3 d}{\partial t^3} = -f^2\frac{\partial d}{\partial t} + Dg\Delta\frac{\partial d}{\partial t}. \tag{6.142}$$

Man macht den Ansatz

$$d = Y_{l,m}e^{-i\omega t} \tag{6.143}$$

mit einer Kugelflächenfunktion $Y_{l,m}$. Somit folgt

$$\begin{aligned} i\omega^3 d &= f^2 i\omega d + i\omega\frac{gD}{a^2}l\left(l+1\right)d\\ \Rightarrow \omega\left(\omega^2 - f^2 - l\left(l+1\right)\frac{gD}{a^2}\right) &= 0.\end{aligned} \tag{6.144}$$

Für die Kreisfrequenzen gilt $\omega_0 = 0$ und

$$\omega_l = \pm\sqrt{f^2 + l\left(l+1\right)\frac{gD}{a^2}} \tag{6.145}$$

bzw. für die Periodendauern $T_0 = \infty$ und

$$T_l = \frac{2\pi}{\sqrt{f^2 + l\left(l+1\right)\frac{gD}{a^2}}}. \tag{6.146}$$

Tab. 6.1 gibt eine Vorstellung von den Periodendauern.

Wellenzahl l	Periodendauer / hr
1	14, 8
2	11, 8
3	9, 5
4	7, 8
5	6, 6

Tabelle 6.1: Periodendauern der gloablen Moden für $D = 8$ km und $f = 10^{-4}$ s^{-1}.

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 $k_y = 0$ 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

$$v = v_0 \exp\left[i\left(kx - \omega t\right)\right] \tag{6.147}$$

dann gelten

$$\zeta = ikv, \tag{6.148}$$

$$\frac{\partial \zeta}{\partial t} = k\omega v, \tag{6.149}$$

$$\frac{\partial \zeta}{\partial x} = -k^2 v. \tag{6.150}$$

Setzt man dies in die barotrope Vorticitygleichung ein, erhält man

$$k\omega v_0 = Uk^2 v_0 - v_0 \beta \Leftrightarrow \omega = Uk - \frac{\beta}{k}. \tag{6.151}$$

Glg. (6.151) ist die Dispersionsrelation der Rossby-Wellen. Für ihre Phasengeschwindigkeit gilt

$$c = U - \frac{\beta}{k^2}. \tag{6.152}$$

Im hypothetischen Fall $U \to 0$, $L = 2\pi a$ und $\varphi = 0$ gilt

$$|c| = 2\omega \frac{1}{a} \frac{4\pi^2 a^2}{4\pi^2} = 2\omega a = 930 \ \frac{\mathrm{m}}{\mathrm{s}}. \tag{6.153}$$

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

$$\frac{Dv}{Dt} = -fu - g\frac{\partial \eta}{\partial y}. \tag{6.154}$$

Mache für f eine lineare Taylor-Entwicklung

$$f = f_0 + \beta y. \tag{6.155}$$

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.

Ein homogener zonaler Grundstrom U kann geostrophisch balanciert werden durch eine Oberflächenauslenkung

$$0 = -f_0 U - g\frac{\partial \eta}{\partial y}. \tag{6.156}$$

In diesem Fall wird Glg. (6.154) zu

$$\frac{D^2 y}{Dt} t^2 = -\beta U y. \tag{6.157}$$

Dies entspricht einem harmonischen Oszillator mit der Eigenfrequenz

$$\omega_{\text{ind}} = \sqrt{\beta U}. \tag{6.158}$$

Daher muss $U > 0$ 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

$$f + \zeta = \text{const}. \tag{6.159}$$

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 $\beta \geq 0$ 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 $z_0 = 0$ festgelegt sei. Lenkt man das Teilchen vertikal aus, lautet die Bewegungsgleichung

$$\frac{d^2z}{dt^2} = -\frac{1}{\rho_0}\frac{\partial p}{\partial z} - g = g\frac{\rho}{\rho_0} - g = \frac{g}{\rho_0}\left(\rho - \rho_0\right), \tag{6.160}$$

$z(t)$ 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

$$\rho(z) - \rho_0 = \frac{\partial\rho}{\partial z}(z = 0)z, \tag{6.161}$$

so folgt für die Schwingungsgleichung

$$\frac{d^2z}{dt^2}(t) = \frac{g}{\rho_0}\frac{\partial\rho}{\partial z}z(t). \tag{6.162}$$

Setzt man $z = Z_1\exp(iNt) + Z_2\exp(-iNt)$ an, so folgt für die Kreisfrequenz

$$N^2 = -\frac{g}{\rho}\frac{\partial\rho}{\partial z}, \tag{6.163}$$

N ist die *Brunt-Väisälä-Frequenz*, sie ist ein Maß für die Stabilität. Setzt man N in (6.162) ein, erhält man

$$\frac{d^2z}{dt^2} = -N^2z. \tag{6.164}$$

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 (6.160) zu

$$\frac{d^2z}{dt^2} = \frac{1}{\tilde{\rho}(z)}g\rho(z) - g = \frac{g}{\tilde{\rho}(z)}\left(\rho(z) - \tilde{\rho}(z)\right). \tag{6.165}$$

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. (3.212) für ihre Dichtedifferenz

$$\Delta\rho = \left(\rho(z) - \tilde{\rho}(z)\right)\left(\frac{p_0}{p}\right)^{1/\varkappa}. \tag{6.166}$$

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

$$\frac{d^2z}{dt^2} = \frac{g}{\tilde{\rho}(z)}\left(\rho_\theta(z) - \rho_\theta(0)\right) = \frac{g}{\tilde{\rho}(z)}\frac{\partial\rho_\theta}{\partial z}z. \tag{6.167}$$

Für die Brunt-Väisälä-Frequenz folgt

$$\boxed{N^2 = -\frac{g}{\rho_\theta}\frac{\partial\rho_\theta}{\partial z}.} \tag{6.168}$$

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:

$$\varrho_\theta = \frac{p_0}{R_d \theta} \tag{6.169}$$

Somit folgt

$$\frac{\partial \varrho_\theta}{\partial z} = -\frac{p_0}{R_d \theta^2} \frac{\partial \theta}{\partial z}. \tag{6.170}$$

Für die Brunt-Väisälä-Frequenz bedeutet dies

$$N^2 = \frac{g}{\theta} \frac{\partial \theta}{\partial z}. \tag{6.171}$$

Schichtungswellen entstehen zum Beispielen 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

$$w(z=0) = 0, \tag{6.172}$$
$$w(z=-D) = 0. \tag{6.173}$$

Man verwendet folgendes Gleichungssystem, wobei man o. B. d. A. von einer in x-Richtung propagierenden Welle ausgeht:

$$\frac{\partial u}{\partial t} = -\frac{1}{\varrho_0} \frac{\partial p'}{\partial x}, \tag{6.174}$$
$$\frac{\partial w}{\partial t} = -\frac{1}{\varrho_0} \frac{\partial p'}{\partial z}, \tag{6.175}$$
$$\frac{\partial \varrho'}{\partial t} = -\varrho_0 \frac{\partial u}{\partial x} - \varrho_0 \frac{\partial w}{\partial z}. \tag{6.176}$$

Hierbei ist

$$\varrho = \varrho_0 + \varrho' \tag{6.177}$$

mit einer homogenen Hintergrunddichte ϱ_0 und einer Fluktuation ϱ'. Analog zerlegt man den Druck p, wobei gelten soll

$$\frac{\partial p_0}{\partial z} = -g\varrho_0. \tag{6.178}$$

Man macht nun die Ansätze

$$u = U(z) \exp(ikx - i\omega t), \tag{6.179}$$
$$v = V(z) \exp(ikx - i\omega t), \tag{6.180}$$
$$p' = P(z) \exp(ikx - i\omega t), \tag{6.181}$$
$$\varrho' = \tilde{\varrho}(z) \exp(ikx - i\omega t). \tag{6.182}$$

Setzt man dies in des geltende Gleichungssystem ein, folgt

$$-i\omega U = -\frac{ikP}{\varrho_0} \Rightarrow \omega U = \frac{kP}{\varrho_0}, \tag{6.183}$$
$$-i\omega W = -\frac{P'}{\varrho_0} \Rightarrow \omega W = -i\frac{P'}{\varrho_0}, \tag{6.184}$$
$$-i\omega\tilde{\varrho} = -\varrho_0 ikU - \varrho_0 W' \Rightarrow \omega\tilde{\varrho} = \varrho_0 kU - i\varrho_0 W'. \tag{6.185}$$

Die dritte Gleichung ist immer erfüllbar, $\tilde{\varrho}(z)$ kann entsprechend gewählt werden. Für W macht man den Ansatz

$$W(z) = \hat{w}\sin\left(n\pi\frac{z}{D}\right) \tag{6.186}$$

mit $n \geq 1$. Aus Glg. (6.184) folgt

$$P' = \varrho_0 i\omega\hat{w}\sin\left(n\pi\frac{z}{D}\right). \tag{6.187}$$

Für P setzt man daher

$$P(z) = -\frac{D\varrho_0 i\omega\hat{w}}{n\pi}\cos\left(n\pi\frac{z}{D}\right) \tag{6.188}$$

an. Setzt man dies in Glg. (6.184) folgt

$$U(z) = \frac{kP}{\omega\varrho_0} = -\frac{ki\hat{w}D}{n\pi}\cos\left(n\pi\frac{z}{D}\right). \tag{6.189}$$

Es gilt also

$$\begin{aligned} u(x,z,t) &= \frac{Dk\hat{w}}{n\pi}\cos\left(n\pi\frac{z}{D}\right)\exp\left[i\left(kx-\omega t-\frac{\pi}{2}\right)\right] \\ \Rightarrow \Re(u(x,z,t)) &= \frac{Dk\hat{w}}{n\pi}\cos\left(n\pi\frac{z}{D}\right)\sin(kx-\omega t). \end{aligned} \tag{6.190}$$

Dier Horizontaldivergenz δ an der Oberfläche ergibt sich zu

$$\delta(z=0) = \frac{\partial\Re(u(x,z,t))}{\partial x} = \frac{Dk^2\hat{w}}{n\pi}\cos\left(n\pi\frac{z}{D}\right)\cos(kx-\omega t). \tag{6.191}$$

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.

$$\frac{D_h\boldsymbol{v}_h}{Dt} + \omega\frac{\partial\boldsymbol{v}_h}{\partial p} \overset{\text{Glg.en (3.167), (3.168)}}{=} -f\boldsymbol{k}\times\boldsymbol{v}_h - \nabla\varphi, \tag{6.192}$$

$$\frac{\partial\varphi}{\partial p} \overset{\text{Glg. (4.13)}}{=} -a, \tag{6.193}$$

$$\frac{D_hT}{Dt} - S_p\omega \overset{\text{Glg. (3.202)}}{=} 0, \tag{6.194}$$

$$\nabla\cdot\boldsymbol{v}_h + \frac{\partial\omega}{\partial p} \overset{\text{Glg. (3.164)}}{=} 0, \tag{6.195}$$

$$pa \overset{\text{Glg. (2.818)}}{=} R_dT. \tag{6.196}$$

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 $\beta-$Ebene sind. Setzt man Glg. (6.196) in Glg. (6.193) ein, folgt

$$\frac{\partial\varphi}{\partial p} = -\frac{R_dT}{p} \Rightarrow T = -\frac{p}{R_d}\frac{\partial\varphi}{\partial p}. \tag{6.197}$$

Dies setzt man nun in Glg. (6.194) ein, es folgt

$$\frac{D_h}{Dt}\left(\frac{\partial\varphi}{\partial p}\right)+\frac{R_dS_p}{p}\omega=0. \tag{6.198}$$

Man definiert nun den *statischen Stabilitätsparameter* σ durch

$$\sigma:=\frac{R_dS_p}{p}\overset{\text{Glg. (3.211)}}{=}-\frac{R_dT}{p}\frac{1}{\theta}\frac{\partial\theta}{\partial p}=-\frac{a}{\theta}\frac{\partial\theta}{\partial p}. \tag{6.199}$$

Dies hängt nach Glg. (6.171) über

$$\sigma=-\frac{a}{\theta}\frac{\partial z}{\partial p}\frac{\partial\theta}{\partial z}=\frac{a^2}{g\theta}\frac{\partial\theta}{\partial z}=\frac{a^2}{g^2}\frac{g}{\theta}\frac{\partial\theta}{\partial z}=\left(\frac{a}{g}N\right)^2 \tag{6.200}$$

mit der Brunt-Väisälä-Frequenz N zusammen. Man nähert außerdem den Coriolis-Parameter f zu

$$f=f_0+\beta\left(y-y_0\right)\overset{y_0\equiv 0}{=}f_0+\beta y, \tag{6.201}$$

vgl. Absch. 4.5. Dann gilt für den geostrophischen Wind Glg. (4.22)

$$\boldsymbol{v}_{h,g}=\boldsymbol{k}\times\frac{1}{f}\nabla\varphi=\boldsymbol{k}\times\frac{1}{f_0}\nabla\varphi-\boldsymbol{k}\times\frac{\beta y}{f_0^2}\nabla\varphi+\mathcal{O}\left(f'\right)\overset{\text{in 0. Ordnung}}{\rightarrow}\boldsymbol{v}_{h,g}=\boldsymbol{k}\times\frac{1}{f_0}\nabla\varphi. \tag{6.202}$$

Hieraus kann man für den thermischen Wind ableiten

$$\frac{\partial\boldsymbol{v}_{h,g}}{\partial p}=-\frac{1}{f_0}\boldsymbol{k}\times\nabla a. \tag{6.203}$$

Die relative Vorticity ζ ersetzt man nun näherungsweise durch die relative Vorticity des geostrophischen Windes ζ_g, welche nach Glg. (5.81) näherungsweise durch

$$\zeta_g=\frac{1}{f_0}\Delta\varphi. \tag{6.204}$$

gegeben ist. Für die absolute Vorticity nähert man hieraus folgernd

$$\eta_g:=f+\zeta_g=f_0+\beta y+\zeta_g. \tag{6.205}$$

Mit Glg. (6.202) vereinfacht man nun die materielle Ableitung zu

$$\begin{aligned}\frac{D}{Dt}&=\frac{D_h}{Dt}+\omega\frac{\partial}{\partial p}=\frac{\partial}{\partial t}+\boldsymbol{v}_h\cdot\nabla_h+\omega\frac{\partial}{\partial p}\\ \rightarrow\quad\frac{D^{(g)}}{Dt}&:=\frac{D_h^{(g)}}{Dt}+\omega\frac{\partial}{\partial p}=\frac{\partial}{\partial t}+\boldsymbol{v}_{h,g}\cdot\nabla_h+\omega\frac{\partial}{\partial p}.\end{aligned} \tag{6.206}$$

Hiermit folgt für den Ersten Hauptsatz

$$\frac{\partial}{\partial t}\left(\frac{\partial\varphi}{\partial p}\right)=-\boldsymbol{v}_{h,g}\cdot\nabla_h\left(\frac{\partial\varphi}{\partial p}\right)-\sigma\omega. \tag{6.207}$$

Die Vorticitygleichung Glg. (5.80) wird hier noch einmal wiederholt:

$$\frac{\partial\zeta}{\partial t}=-v\beta-\left(f+\zeta\right)\nabla\cdot\boldsymbol{v}_h-\boldsymbol{v}_h\cdot\nabla\zeta-\omega\frac{\partial\zeta}{\partial p}+\boldsymbol{k}\cdot\left[\frac{\partial\boldsymbol{v}_h}{\partial p}\times\nabla\omega\right] \tag{6.208}$$

Der geostrophische Wind ist nach Absch. 4.3 eine Größenordnung größer als die ageostrophische Komponente, daher kann man die horizontale Advektion mit $\boldsymbol{v}_{h,g}$ berechnen und ζ durch ζ_g ersetzen:

$$\frac{\partial\zeta_g}{\partial t}=-v_g\beta-\left(f+\zeta_g\right)\nabla\cdot\boldsymbol{v}_h-\boldsymbol{v}_{h,g}\cdot\nabla\zeta_g-\omega\frac{\partial\zeta_g}{\partial p}+\boldsymbol{k}\cdot\left[\frac{\partial\boldsymbol{v}_h}{\partial p}\times\nabla\omega\right] \tag{6.209}$$

Die Werte in Tab. 1.3 ergeben außerdem in SI-Einheiten

- $\frac{\partial \zeta_g}{\partial t} \sim 10^{-10}$,
- $\omega \frac{\partial \zeta_g}{\partial p} \sim 10^{-11}$,
- $\boldsymbol{k} \cdot \left[\frac{\partial \boldsymbol{v}_h}{\partial p} \times \nabla \omega\right] \sim 10^{-11}$.

Folglich können auch der Drehterm und die vertikale Advektion vernachlässigt werden und außerdem die relative gegenüber der absoluten Vorticity im Drehterm, dies führt mit $f \approx f_0$ auf die sogenannte *quasigeostrophische Vorticitygleichung*

$$\frac{\partial \zeta_g}{\partial t} = -\boldsymbol{v}_{h,g} \cdot \nabla \left(\zeta_g + f\right) - f_0 \nabla \cdot \boldsymbol{v}_h = -\boldsymbol{v}_{h,g} \cdot \nabla \left(\zeta_g + f\right) + f_0 \frac{\partial \omega}{\partial p}. \tag{6.210}$$

An dieser Stelle führt man zur Vereinfachung eine Stromfunktion

$$\psi := \frac{\varphi}{f_0} \tag{6.211}$$

ein, damit folgen

$$\boldsymbol{v}_{h,g} = \boldsymbol{k} \times \nabla \psi, \tag{6.212}$$

$$\zeta_g = \Delta_h \psi. \tag{6.213}$$

Hieraus folgt für die Vorticitygleichung Glg. (6.210) und den Ersten Hauptsatz Glg. (2.106)

$$\Delta \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\boldsymbol{v}_{h,g} \cdot \nabla \left(\Delta \psi + f\right) + f_0 \frac{\partial \omega}{\partial p}, \tag{6.214}$$

$$\frac{\partial}{\partial t}\left(\frac{\partial \psi}{\partial p}\right) = -\boldsymbol{v}_{h,g} \cdot \nabla \left(\frac{\partial \psi}{\partial p}\right) - \frac{\sigma}{f_0}\omega$$

$$\Rightarrow \frac{f_0^2}{\sigma}\frac{\partial^2}{\partial p^2}\left(\frac{\partial \psi}{\partial t}\right) = -\frac{f_0^2}{\sigma}\boldsymbol{v}_h \cdot \nabla \left(\frac{\partial^2 \psi}{\partial p^2}\right) - f_0 \frac{\partial \omega}{\partial p} \tag{6.215}$$

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

$$\frac{\partial \boldsymbol{v}_{h,g}}{\partial p} \cdot \nabla \left(\frac{\partial \psi}{\partial p}\right) \overset{\text{Glg. (6.212)}}{=} \left(\boldsymbol{k} \times \nabla \frac{\partial \psi}{\partial p}\right) \cdot \nabla \left(\frac{\partial \psi}{\partial p}\right) = 0 \tag{6.216}$$

eingesetzt. Nun werden die beiden Gleichungen addiert

$$\frac{\partial}{\partial t}\left[f + \Delta \psi + \frac{f_0^2}{\sigma}\frac{\partial^2 \psi}{\partial p^2}\right] + \boldsymbol{v}_{h,g} \cdot \nabla \left(f + \Delta \psi + \frac{f_0^2}{\sigma}\frac{\partial^2 \psi}{\partial p^2}\right) = 0. \tag{6.217}$$

Die Größe

$$q_g := f + \Delta \psi + \frac{f_0^2}{\sigma}\frac{\partial^2 \psi}{\partial p^2} \tag{6.218}$$

bezeichnet man als *quasigeostrophische potentielle Vorticity*, damit lässt sich Glg. (6.217) als

$$\boxed{\frac{D_h^{(g)}}{Dt} q_g = 0} \tag{6.219}$$

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)

Tabelle 6.2: Übersicht über das quasigeostrophische Zweischichtmodell. Vgl. [10].

notieren. Dies ist die sogenannte *Tendenzgleichung*. ω kann hieraus diagnostiziert werden, hierzu wendet man zunächst den horizontalen Laplace-Operator Δ_h auf Glg. (6.207) an:

$$\Delta \frac{\partial}{\partial p} \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\Delta_h \left[\boldsymbol{v}_{h,g} \cdot \nabla \left(\frac{\partial \psi}{\partial p} \right) \right] - \frac{\sigma}{f_0} \Delta \omega. \tag{6.220}$$

Nun wird Glg. (6.210) nach p differenziert:

$$\frac{\partial}{\partial p} \Delta \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial p} \left[\boldsymbol{v}_{h,g} \cdot \nabla \left(\Delta \psi + f \right) \right] + f_0 \frac{\partial^2 \omega}{\partial p^2} \tag{6.221}$$

Nun subtrahiert man Glg. (6.220) von (6.221) und erhält

$$0 = \Delta \left[\boldsymbol{v}_{h,g} \cdot \nabla \left(\frac{\partial \psi}{\partial p} \right) \right] + \frac{\sigma}{f_0} \Delta \omega - \frac{\partial}{\partial p} \left[\boldsymbol{v}_{h,g} \cdot \nabla \left(\Delta \psi + f \right) \right] + f_0 \frac{\partial^2 \omega}{\partial p^2}$$

$$\boxed{\Rightarrow \left[\Delta + \frac{f_0^2}{\sigma} \frac{\partial^2}{\partial p^2} \right] \omega = \frac{f_0}{\sigma} \frac{\partial}{\partial p} \left[\boldsymbol{v}_{h,g} \cdot \nabla \left(\Delta \psi + f \right) \right] + \frac{f_0}{\sigma} \Delta \left[\boldsymbol{v}_{h,g} \cdot \nabla \left(\frac{\partial \psi}{\partial p} \right) \right]. \quad (6.222)}$$

Dies ist die $\omega-$*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

$$q_1 = f + \Delta \psi_1 + \frac{f_0^2}{\sigma} \frac{\frac{\partial \psi}{\partial p}\Big|_2 - \frac{\partial \psi}{\partial p}\Big|_0}{\Delta p} = f + \Delta \psi_1 + \frac{f_0^2}{\sigma \Delta p^2} \left(\psi_3 - \psi_1 \right) - \frac{f_0^2 \frac{\partial \psi}{\partial p}\Big|_0}{\sigma \Delta p}, \tag{6.223}$$

$$q_3 = f + \Delta \psi_3 + \frac{f_0^2}{\sigma} \frac{\frac{\partial \psi}{\partial p}\Big|_4 - \frac{\partial \psi}{\partial p}\Big|_2}{\Delta p} = f + \Delta \psi_3 - \frac{f_0^2}{\sigma \Delta p^2} \left(\psi_3 - \psi_1 \right) + \frac{f_0^2 \frac{\partial \psi}{\partial p}\Big|_4}{\sigma \Delta p}. \tag{6.224}$$

Es wird dabei $\Delta p := 500$ hPa definiert. Über die letzten Terme kann im Rahmen dieses Modell 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:

$$\psi_M := \frac{\psi_1 + \psi_3}{2}, \tag{6.225}$$

$$\psi_T := \frac{\psi_1 - \psi_3}{2}. \tag{6.226}$$

Außerdem definiert man eine barokline potentielle Vorticity:

$$q_T := \frac{q_1 - q_3}{2} = \frac{\zeta_1 - \zeta_3}{2} - \frac{f_0^2}{\sigma \Delta p^2} \left(\psi_1 - \psi_3 \right) \tag{6.227}$$

Ferner wird die *Stabilitätswellenzahl* K durch

$$K^2 := \frac{2f_0^2}{\sigma \Delta p^2} \tag{6.228}$$

definiert. Damit kann man notieren

$$q_1 = f + \zeta_1 - K^2 \psi_T, \tag{6.229}$$
$$q_3 = f + \zeta_3 + K^2 \psi_T, \tag{6.230}$$
$$q_T = \zeta_T - K^2 \psi_T. \tag{6.231}$$

Nun macht man einen Störungsansatz

$$\psi = \overline{\psi} + \psi' = -\overline{u} y + \psi' \tag{6.232}$$

mit einem mittleren homogenen zonalen Strömungsvektor $\overline{u}$. Nun nimmt man einen Spezialfall an, man geht davon aus, dass im Niveau 1 der Hintergrundwind

$$\overline{u}_1 = \overline{u}_T \tag{6.233}$$

weht und um Niveau 3 der Hintergrundwind

$$\overline{u}_3 = -\overline{u}_T. \tag{6.234}$$

Dann gelten

$$\overline{\psi}_1 = -\overline{u}_T y, \tag{6.235}$$
$$\overline{\psi}_3 = \overline{u}_T y. \tag{6.236}$$

Hieraus folgt

$$\overline{\psi}_T = -\overline{u}_T y. \tag{6.237}$$

Für den Grundzustand $\overline{\boldsymbol{v}_h}$ kann man somit notieren

$$\overline{\boldsymbol{v}_h}_1 = \begin{pmatrix} \overline{u}_T \\ 0 \end{pmatrix}, \tag{6.238}$$
$$\overline{\boldsymbol{v}_h}_3 = \begin{pmatrix} -\overline{u}_T \\ 0 \end{pmatrix}. \tag{6.239}$$

Das Feld $\overline{u}_T$ sei von y unabhängig, dann gilt

$$\overline{\zeta}_1 = \overline{\zeta}_3 = 0. \tag{6.240}$$

Für die potentiellen Vorticities gilt

$$\overline{q}_1 = f_0 + \beta y - K^2 \overline{\psi}_T = f_0 + \left(\beta + K^2 \overline{u}_T\right) y, \tag{6.241}$$
$$\overline{q}_3 = f_0 + \beta y + K^2 \overline{\psi}_T = f_0 + \left(\beta - K^2 \overline{u}_T\right) y. \tag{6.242}$$

Dieses Feld ist stationär:

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + \overline{\boldsymbol{v}_h}_1 \cdot \nabla\right) \overline{q}_1 = 0 \tag{6.243}$$
$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + \overline{\boldsymbol{v}_h}_3 \cdot \nabla\right) \overline{q}_3 = 0 \tag{6.244}$$

Wendet man den Störungsansatz auch auf die hier verwendete Form der materiellen Ableitung sowie auf die

potentielle Vorticity an, folgt

$$\frac{D_h^{(g)}}{Dt} = \frac{\partial}{\partial t} + \overline{\boldsymbol{v}_h} \cdot \nabla + \boldsymbol{v}_h' \cdot \nabla, \tag{6.245}$$

$$q = \overline{q} + q'. \tag{6.246}$$

Nun nimmt man wiederum an, dass die Störungen nur meridionale Komponenten haben, also

$$\boldsymbol{v}_{h,g,1}' = \begin{pmatrix} 0 \\ v_1' \end{pmatrix}, \tag{6.247}$$

$$\boldsymbol{v}_{h,g,3}' = \begin{pmatrix} 0 \\ v_3' \end{pmatrix}. \tag{6.248}$$

Für die Stromfunktionen gelten

$$v_1' = \frac{\partial \psi_1'}{\partial x}, \tag{6.249}$$

$$v_3' = \frac{\partial \psi_3'}{\partial x}. \tag{6.250}$$

Für die potentiellen Vorticites folgt hieraus

$$q_1' = \frac{\partial^2 \psi_1'}{\partial x^2} - K^2 \psi_T', \tag{6.251}$$

$$q_3' = \frac{\partial^2 \psi_3'}{\partial x^2} + K^2 \psi_T'. \tag{6.252}$$

Um die Tendenzgleichungen zu untersuchen, notiert man

$$\frac{\partial \overline{q}}{\partial t} + \overline{\boldsymbol{v}_h} \cdot \nabla \overline{q} + \frac{\partial q'}{\partial t} + \overline{\boldsymbol{v}_h} \cdot \nabla q' + \boldsymbol{v}_h' \cdot \nabla \overline{q} + \boldsymbol{v}_h' \cdot \nabla q' = 0. \tag{6.253}$$

Die ersten beiden Terme ergeben Null, wie bereits festgehalten. Das letzte Skalarprodukt verschwindet aufgrund der Orthogonalität der beteiligten Vektoren ebenfalls. Somit gelten

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + \overline{u}_T \frac{\partial}{\partial x}\right) q_1' + \left(\beta + K^2 \overline{u}_T\right) \frac{\partial \psi_1'}{\partial x} = 0, \tag{6.254}$$

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} - \overline{u}_T \frac{\partial}{\partial x}\right) q_3' + \left(\beta - K^2 \overline{u}_T\right) \frac{\partial \psi_3'}{\partial x} = 0. \tag{6.255}$$

Da die Glg.en (6.254) - (6.255) linear sind, kann man die Lösungen als Überlagerungen ebener Wellen verstehen und macht daher einen Ansatz

$$\psi_1' = A_1 \exp\left[i\left(kx - \omega t\right)\right] =: A_1 f(x,t), \tag{6.256}$$

$$\psi_3' = A_3 \exp\left[i\left(kx - \omega t\right)\right] =: A_3 f(x,t). \tag{6.257}$$

Damit erhält man

$$q_1' = -k^2 A_1 f - K^2 \frac{A_1 - A_3}{2} f, \tag{6.258}$$

$$q_3' = -k^2 A_3 f + K^2 \frac{A_1 - A_3}{2} f. \tag{6.259}$$

Das zu lösende Gleichungssystem ist also

$$\left(\omega - k\overline{u}_T\right)\left(k^2 A_1 + K^2 \frac{A_1 - A_3}{2}\right) + \left(\beta + K^2 \overline{u}_T\right) k A_1 = 0, \tag{6.260}$$

$$\left(\omega + k\overline{u}_T\right)\left(k^2 A_3 - K^2 \frac{A_1 - A_3}{2}\right) + \left(\beta - K^2 \overline{u}_T\right) k A_3 = 0. \tag{6.261}$$

In Matrixschreibweise lautet dies

$$\begin{pmatrix} M_{1,1} & M_{1,2} \\ M_{2,1} & M_{2,2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_1 \\ A_3 \end{pmatrix} = 0 \tag{6.262}$$

mit den Matrixkoeffizienten

$$\begin{aligned}
M_{1,1} &= (\omega - k\overline{u}_T)\left(k^2 + \frac{K^2}{2}\right) + \left(\beta + K^2\overline{u}_T\right)k, && (6.263)\\
M_{1,2} &= -\frac{K^2}{2}(\omega - k\overline{u}_T), && (6.264)\\
M_{2,1} &= -\frac{K^2}{2}(\omega + k\overline{u}_T), && (6.265)\\
M_{2,2} &= (\omega + k\overline{u}_T)\left(k^2 + \frac{K^2}{2}\right) + \left(\beta - K^2\overline{u}_T\right)k. && (6.266)
\end{aligned}$$

Nullsetzen der Determinante ergibt

$$\begin{aligned}
& M_{1,1}M_{2,2} - M_{2,1}M_{1,2} \overset{!}{=} 0\\
\Rightarrow\ & (\omega^2 - k^2\overline{u}_T^2)\left(k^2 + \frac{K^2}{2}\right)^2 + 2k\left(k^2 + \frac{K^2}{2}\right)\left(\omega\beta + kK^2\overline{u}_T^2\right) + \left(\beta^2 - K^4\overline{u}_T^2\right)k^2 - \frac{K^4}{4}\left(\omega^2 - k^2\overline{u}_T^2\right) = 0\\
\Rightarrow\ & (\omega^2 - k^2\overline{u}_T^2)(k^4 + k^2K^2) + 2k\left(k^2 + \frac{K^2}{2}\right)\left(\omega\beta + kK^2\overline{u}_T^2\right) + \left(\beta^2 - K^4\overline{u}_T^2\right)k^2 = 0\\
\Rightarrow\ & (\omega^2 - k^2\overline{u}_T^2)(k^2 + K^2) + \left(2k + \frac{K^2}{k}\right)\left(\omega\beta + kK^2\overline{u}_T^2\right) + \beta^2 - K^4\overline{u}_T^2 = 0\\
\Rightarrow\ & (\omega^2 - k^2\overline{u}_T^2)(k^2 + K^2) + 2k\left(\omega\beta + kK^2\overline{u}_T^2\right) + \frac{K^2\omega\beta}{k} + \beta^2 = 0\\
\Rightarrow\ & \omega^2k^2 + \omega^2K^2 - k^4\overline{u}_T^2 + k^2K^2\overline{u}_T^2 + 2k\omega\beta + \frac{K^2\omega\beta}{k} + \beta^2 = 0
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\Rightarrow\ & \omega^2\left[k^2 + K^2\right] + \omega\left[2k\beta + \frac{K^2\beta}{k}\right] - k^4\overline{u}_T^2 + k^2K^2\overline{u}_T^2 + \beta^2 = 0\\
\Rightarrow\ & \omega^2 + \omega\frac{\beta}{k}\frac{2k^2 + K^2}{k^2 + K^2} + \frac{k^2K^2\overline{u}_T^2 - k^4\overline{u}_T^2 + \beta^2}{k^2 + K^2} = 0\\
\Rightarrow\ & \omega_{1,2} = -\frac{\beta}{2k}\frac{2k^2 + K^2}{k^2 + K^2} \pm \sqrt{\frac{\beta^2}{4k^2}\frac{(2k^2 + K^2)^2}{(k^2 + K^2)^2} - \frac{k^2K^2\overline{u}_T^2 - k^4\overline{u}_T^2 + \beta^2}{k^2 + K^2}}\\
\Rightarrow\ & \omega_{1,2} = -\frac{\beta}{2k}\frac{2k^2 + K^2}{k^2 + K^2} \pm \frac{1}{k^2 + K^2}\sqrt{\frac{\beta^2}{4k^2}\left(4k^4 + K^4 + 4k^2K^2\right) - (k^2 + K^2)\left(k^2K^2\overline{u}_T^2 - k^4\overline{u}_T^2 + \beta^2\right)}\\
\Rightarrow\ & \omega_{1,2} = -\frac{\beta}{2k}\frac{2k^2 + K^2}{k^2 + K^2}\\
\pm\ & \frac{1}{k^2 + K^2}\sqrt{\beta^2k^2 + \frac{\beta^2K^4}{4k^2} + \beta^2K^2 - k^4K^2\overline{u}_T^2 - k^2\beta^2 - K^4k^2\overline{u}_T^2 - K^2\beta^2 + k^6\overline{u}_T^2 + K^2k^4\overline{u}_T^2}\\
\Rightarrow\ & \omega_{1,2} = -\frac{\beta}{k}\frac{k^2 + K^2/2}{k^2 + K^2} \pm \frac{1}{k^2 + K^2}\sqrt{\frac{\beta^2K^4}{4k^2} + \overline{u}_T^2k^2\left(k^4 - K^4\right)}. \qquad (6.267)
\end{aligned}$$

Unter der Annahme $k < K$ maximiert man den Ausdruck unter der Wurzel, indem man $\overline{u}_T = 0$ setzt, hieraus folgt

$$c = \frac{\omega}{k} \leq -\frac{\beta}{k^2 + K^2}, \tag{6.268}$$

barokline Rossby-Wellen pflanzen sich also immer nach Westen fort.

6.4.4 Barokline Schwerewellen

Barokline Schwerewellen sind das barokline Analogon zu Poincaré-Wellen. Man macht zunächst einen Störungsansatz der Form

$$u = U + u', \tag{6.269}$$
$$v = v', \tag{6.270}$$
$$w = w', \tag{6.271}$$
$$p = p_0(z) + p', \tag{6.272}$$
$$\theta = \theta_0(z) + \theta', \tag{6.273}$$
$$f = f_0. \tag{6.274}$$

Wegen Glg. (6.274) ist Glg. (6.269) keine Beschränkung des Hintergrundstroms auf die x-Richtung, durch eine Rotation des Koordinatensystems um die vertikale Achse kann der Hintergrundwind jede Richtung annehmen. Insbesondere werden alle Krümmungsterme vernachlässigt und man kann kartesische Koordinaten (x, y, z) verwenden. Der Hintergrundzustand soll hydrostatisch sein, also

$$\frac{\partial p_0}{\partial z} = -g\varrho_0(z) \tag{6.275}$$

erfüllen. Es wird von einem trockenadiabatischen System ausgegangen, in einem solchen wird der Erste Hauptsatz der Thermodynamik zu

$$\frac{D\theta}{Dt} = 0 \tag{6.276}$$
$$\Leftrightarrow \frac{D\theta'}{Dt} + w'\frac{d\theta_0}{dz} = 0. \tag{6.277}$$

Man führt nun eine genäherte materielle Ableitung $\frac{\tilde{D}}{Dt}$ ein, bei der Störprodukte vernachlässigt werden. Im folgenden werden hierfür Gleichheitszeichen notiert. Damit erhält man

$$\frac{\tilde{D}\theta'}{Dt} + w'\frac{d\theta_0}{dz} = 0. \tag{6.278}$$

Multipliziert man diese Gleichung mit $\frac{g}{\theta_0}$, folgt

$$\frac{\tilde{D}b'}{Dt} + w'\frac{g}{\theta_0}\frac{d\theta_0}{dz} = 0, \tag{6.279}$$

wobei die Definition der sogenannten *buoyancy*

$$b' := g\frac{\theta'}{\theta_0} \tag{6.280}$$

eingesetzt wurde. Aus Glg. (6.168) entnimmt man

$$\frac{g}{\theta_0}\frac{d\theta_0}{dz} = N^2, \tag{6.281}$$

was auf

$$\frac{\tilde{D}b'}{Dt} + w'N^2 = 0 \tag{6.282}$$

führt. Mit Glg. (3.230) erhält man

$$\begin{aligned}
\frac{Dp}{Dt} + \frac{c^{(p)}}{c^{(v)}} p \nabla \cdot \boldsymbol{v} &= 0 \\
\Leftrightarrow \frac{1}{\varkappa p} \frac{Dp}{Dt} + \nabla \cdot \boldsymbol{v} &= 0 \\
\Leftrightarrow \frac{1}{\varkappa \varrho R_d T} \frac{Dp}{Dt} + \nabla \cdot \boldsymbol{v} &= 0.
\end{aligned} \tag{6.283}$$

Mit Glg. (6.47) kann man dies in Termen der Schallgeschwindigkeit ausdrücken:

$$\frac{1}{c_s^2 \varrho} \frac{Dp}{Dt} + \nabla \cdot \boldsymbol{v} = 0 \tag{6.284}$$

Linearisiert man diese Gleichung, erhält man

$$\begin{aligned}
\frac{1}{c_s^2 \varrho} \frac{\tilde{D}p}{Dt} + \nabla \cdot \boldsymbol{v}' &= 0 \\
\Leftrightarrow \frac{1}{c_s^2 \varrho_0} \frac{\tilde{D}p}{Dt}' + \frac{1}{c_s^2 \varrho_0} w' \frac{dp_0}{dz} + \nabla \cdot \boldsymbol{v}' &= 0 \\
\Leftrightarrow \frac{1}{c_s^2 \varrho_0} \frac{\tilde{D}p}{Dt}' - \frac{g}{c_s^2} w' + \nabla \cdot \boldsymbol{v}' &= 0.
\end{aligned} \tag{6.285}$$

Für die vertikale Bewegungsgleichung erhält man mit Glg. (4.5)

$$\frac{\tilde{D}w'}{Dt} = -g - \frac{1}{\varrho} \frac{\partial p}{\partial z} = -\frac{1}{\varrho} \frac{\partial p'}{\partial z} - \left(\frac{1}{\varrho}\right)' \frac{\partial p_0}{\partial z} \approx -\frac{1}{\varrho_0} \frac{\partial p'}{\partial z} + \frac{\varrho'}{\varrho_0^2} \frac{\partial p_0}{\partial z} = -\frac{1}{\varrho_0} \frac{\partial p'}{\partial z} - \frac{g\varrho'}{\varrho_0}. \tag{6.286}$$

Um die Störung in der Dichte durch Störungen in der potentiellen Temperatur und im Druck auszudrücken, notiert man Glg. (3.225) in der Form

$$\varrho = \frac{p_{\text{ref}}^{R_d/c^{(p)}}}{R_d} \frac{p^{1/\varkappa}}{\theta}. \tag{6.287}$$

In erster Ordnung gilt somit

$$\varrho' = \frac{1}{\varkappa} \frac{\varrho_0}{p_0} p' - \frac{\varrho_0}{\theta} \theta' \approx \frac{p'}{c_s^2} - \frac{\varrho_0}{\theta_0} \theta' \tag{6.288}$$

Hieraus folgt

$$\frac{\tilde{D}w'}{Dt} = -\frac{1}{\varrho_0} \frac{\partial p'}{\partial z} - \frac{gp'}{\varrho_0 c_s^2} + \frac{g}{\theta_0} \theta' = -\frac{1}{\varrho_0} \frac{\partial p'}{\partial z} - \frac{gp'}{\varrho_0 c_s^2} + b'. \tag{6.289}$$

Zusammenfassend lautet das linearisierte Gleichungssystem

$$\frac{\tilde{D}u'}{Dt} = fv' - \frac{1}{\varrho_0}\frac{\partial p'}{\partial x}, \tag{6.290}$$

$$\frac{\tilde{D}v'}{Dt} = -fu' - \frac{1}{\varrho_0}\frac{\partial p'}{\partial y}, \tag{6.291}$$

$$\frac{\tilde{D}w'}{Dt} = b' - \frac{1}{\varrho_0}\frac{\partial p'}{\partial z} - \frac{g}{c_s^2}\frac{p'}{\varrho_0}, \tag{6.292}$$

$$\frac{\tilde{D}b'}{Dt} = -w'N^2, \tag{6.293}$$

$$\frac{1}{c_s^2\varrho_0}\frac{\tilde{D}p'}{Dt} = \frac{g}{c_s^2}w' - \nabla\cdot\boldsymbol{v}'. \tag{6.294}$$

Dabei wurden Terme, die mit der hydrostatischen Approximation wegfallen würden, blau markiert, und alle Terme, die unter Vernachlässigung von Schallwellen verschwinden würden, rot. Störend ist die vertikale Abhängigkeit von ϱ_0. Daher definiert man

$$u'' = \sqrt{\frac{\varrho_0}{\varrho_{\mathrm{SFC}}}}u', \tag{6.295}$$

$$v'' = \sqrt{\frac{\varrho_0}{\varrho_{\mathrm{SFC}}}}v', \tag{6.296}$$

$$w'' = \sqrt{\frac{\varrho_0}{\varrho_{\mathrm{SFC}}}}w', \tag{6.297}$$

$$b'' = \sqrt{\frac{\varrho_0}{\varrho_{\mathrm{SFC}}}}b', \tag{6.298}$$

$$p'' = \sqrt{\frac{\varrho_{\mathrm{SFC}}}{\varrho_0}}p'. \tag{6.299}$$

was man als *Bretherton-Transformation* bezeichnet. Dabei bezeichnet der Index SFC die Werte an der Erdoberfläche. Die Transformation erfolgt im wesentlichen durch Multiplikation des Gleichungssystem mit $\sqrt{\frac{\varrho_0}{\varrho_{\mathrm{SFC}}}}$. Besondere Aufmerksamkeit benötigen dabei die vertikalen Ableitungen:

$$\frac{dw'}{dz} = \sqrt{\frac{\varrho_{\mathrm{SFC}}}{\varrho_0}}\frac{dw''}{dz} - \frac{1}{2}\sqrt{\frac{\varrho_{\mathrm{SFC}}}{\varrho_0}}w''\frac{1}{\varrho_0}\frac{d\varrho_0}{dz} = \sqrt{\frac{\varrho_{\mathrm{SFC}}}{\varrho_0}}\frac{dw''}{dz} + \frac{H}{2}w' \tag{6.300}$$

$$\frac{dp'}{dz} = \sqrt{\frac{\varrho_0}{\varrho_{\mathrm{SFC}}}}\frac{dp''}{dz} + \frac{1}{2}\sqrt{\frac{\varrho_0}{\varrho_{\mathrm{SFC}}}}p''\frac{1}{\varrho_0}\frac{d\varrho_0}{dz} = \sqrt{\frac{\varrho_0}{\varrho_{\mathrm{SFC}}}}\frac{dp''}{dz} + \frac{1}{2}p'\frac{1}{\varrho_0}\frac{d\varrho_0}{dz} = \sqrt{\frac{\varrho_0}{\varrho_{\mathrm{SFC}}}}\frac{dp''}{dz} - \frac{H}{2}p' \tag{6.301}$$

Dabei wurde

$$\frac{1}{\varrho_0}\frac{d\varrho_0}{dz} = -\frac{1}{H} \tag{6.302}$$

mit der Skalenhöhe H eingesetzt. Hieraus folgt

$$-\frac{1}{\varrho_0}\frac{\partial p'}{\partial z} = -\sqrt{\frac{1}{\varrho_0\varrho_{\mathrm{SFC}}}}\frac{dp''}{dz} + \frac{H}{2\varrho_0}p' = -\sqrt{\frac{1}{\varrho_0\varrho_{\mathrm{SFC}}}}\frac{dp''}{dz} + \frac{H}{2\sqrt{\varrho_0\varrho_{\mathrm{SFC}}}}p'', \tag{6.303}$$

$$-\frac{\partial w'}{\partial z} = -\sqrt{\frac{\varrho_{\mathrm{SFC}}}{\varrho_0}}\frac{dw''}{dz} - \frac{H}{2}w' = -\sqrt{\frac{\varrho_{\mathrm{SFC}}}{\varrho_0}}\frac{dw''}{dz} - \frac{H}{2}\sqrt{\frac{\varrho_{\mathrm{SFC}}}{\varrho_0}}w''. \tag{6.304}$$

Dies führt zusammenfassend auf folgendes Gleichungssystem:

$$\frac{\tilde{D}u''}{Dt} = fv'' - \frac{1}{\varrho_{\mathrm{SFC}}}\frac{\partial p''}{\partial x} \tag{6.305}$$

$$\frac{\tilde{D}v''}{Dt} = -fu'' - \frac{1}{\varrho_{\mathrm{SFC}}}\frac{\partial p''}{\partial y} \tag{6.306}$$

$$\frac{\tilde{D}w''}{Dt} = b'' - \frac{1}{\varrho_{\mathrm{SFC}}}\frac{\partial p''}{\partial z} + \left(\frac{1}{2H} - \frac{g}{c_s^2}\right)\frac{p''}{\varrho_{\mathrm{SFC}}}, \tag{6.307}$$

$$\frac{\tilde{D}b''}{Dt} = -w''N^2 \tag{6.308}$$

$$\frac{1}{c_s^2\varrho_{\mathrm{SFC}}}\frac{\tilde{D}p''}{Dt} = \left(\frac{g}{c_s^2} - \frac{1}{2H}\right)w'' - \nabla_h \cdot \boldsymbol{v}_h'' - \frac{\partial w''}{\partial z} \tag{6.309}$$

Für jede der fünf auftretenden Variablen macht man nun einen Ansatz

$$\psi'' = A_\psi \exp\left[i\left(kx + ly + mz - \omega t\right)\right], \tag{6.310}$$

wobei A_ψ komplex sein kann. Es gilt

$$\frac{\tilde{D}A_\psi}{Dt} = i\left(Uk - \omega\right)A_\psi = -i\omega_I A_\psi, \tag{6.311}$$

wobei die Definition der sogenannten *intrinsischen Frequenz*

$$\omega_I := \omega - kU \tag{6.312}$$

eingesetzt wurde. Dies ist die Frequenz, die im mit der Geschwindigkeit U mitbewegten Koordinatensystem gemessen werden würde. Notiert man das hergeleitete Gleichungssystem als Matrix $\overleftrightarrow{A}$ und vernachlässigt dabei die Schallwellenterme (rote Terme), erhält man

$$\overleftrightarrow{A} \cdot \begin{pmatrix} A_u \\ A_v \\ A_w \\ A_b \\ A_{p/\varrho_{\mathrm{SFC}}} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -i\omega_I & -f & 0 & 0 & ik \\ f & -i\omega_I & 0 & 0 & il \\ 0 & 0 & -i\omega_I & -1 & im - \frac{1}{2H} \\ 0 & 0 & N^2 & -i\omega_I & 0 \\ ik & il & im + \frac{1}{2H} & 0 & 0 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} A_u \\ A_v \\ A_w \\ A_b \\ A_{p/\varrho_{\mathrm{SFC}}} \end{pmatrix} = 0. \tag{6.313}$$

Nichttriviale Lösungen existieren, falls die Determinante A von $\overleftrightarrow{A}$ verschwindet:

$$\begin{aligned} A &\overset{!}{=} 0 \\ \Leftrightarrow 0 &= -i\omega_I\left\{-i\omega_I\left[i\omega_I\left(-m^2 - \frac{1}{4H^2}\right)\right] - il\left[-i\omega_I^2 l + N^2 il\right]\right\} \\ &\quad + f\left\{f\left[i\omega_I\left(-m^2 - \frac{1}{4H^2}\right)\right] - il\left[-\omega_I^2 ik + ikN^2\right]\right\} \\ &\quad + ik\left[f\left(-\omega_I^2 il + ilN^2\right) - ik\left(i\omega_I^3 - N^2 i\omega_I\right)\right] \\ \Leftrightarrow 0 &= \left(f^2 - \omega_I^2\right)i\omega_I\left(-m^2 - \frac{1}{4H^2}\right) - \omega_I l\left[-i\omega_I^2 l + N^2 il\right] + k^2\left(i\omega_I^3 - N^2 i\omega_I\right) \end{aligned} \tag{6.314}$$

Hierbei heben sich die magenta eingefärbten Terme gegenseitig auf. Die geostrophische Mode $\omega_I = 0$ interssiert hier nicht weiter, weshalb Division durch $i\omega_I$ erfolgen kann:

$$\begin{aligned} 0 &= (f^2 - \omega_I^2)\left(-m^2 - \frac{1}{4H^2}\right) + \omega_I^2 l^2 - N^2 l^2 + k^2\left(\omega_I^2 - N^2\right) \\ \Leftrightarrow \omega_I^2\left(k^2 + l^2 + m^2 + \frac{1}{4H^2}\right) &= f^2\left(m^2 + \frac{1}{4H^2}\right) + N^2\left(l^2 + k^2\right) \\ \Leftrightarrow \omega_I^2 &= \frac{f^2\left(m^2 + \frac{1}{4H^2}\right) + N^2\left(l^2 + k^2\right)}{k^2 + l^2 + m^2 + \frac{1}{4H^2}} \end{aligned} \tag{6.315}$$

Dies kan man auch in der Form

$$\boxed{\begin{aligned} \omega^2 &= \omega_I^2 + 2kU - U^2k^2 \\ &= 2kU - U^2k^2 + \left(f^2 + \frac{N^2\left(k^2 + l^2\right)}{m^2 + \frac{1}{4H^2}}\right)\frac{m^2 + \frac{1}{4H^2}}{k^2 + l^2 + m^2 + \frac{1}{4H^2}} \end{aligned}} \tag{6.316}$$

notieren. Dies ist die *Dispersionsrelation von Schwerewellen*. Hieraus erhibt sich, dass der rechte Bruch nichthydrostatische Effekte beschreibt. Vernachlässigung der blauen Terme liefert die *Dispersionsrelation von hydrostatischen Schwerewellen:*

$$\boxed{\omega^2 = 2kU - U^2k^2 + \left(f^2 + \frac{N^2\left(k^2 + l^2\right)}{m^2 + \frac{1}{4H^2}}\right)} \tag{6.317}$$

Aus dieser Gleichung folgt

$$\nabla_{\boldsymbol{k}}\omega_I^2 = \begin{pmatrix} \frac{2N^2k}{m^2 + \frac{1}{4H^2}} \\ \frac{2N^2l}{m^2 + \frac{1}{4H^2}} \\ -2m\frac{N^2\left(k^2+l^2\right)}{\left(m^2 + \frac{1}{4H^2}\right)^2} \end{pmatrix}. \tag{6.318}$$

Mit $\omega' = \sqrt{\omega^2}' = \frac{1}{2\omega}\left(\omega^2\right)'$ erhält man für die Gruppengeschwindigkeit hydrostatischer barokliner Schwerewellen

$$\boldsymbol{c}_{\text{gr}} = \frac{1}{\omega_I}\begin{pmatrix} \frac{N^2k}{m^2 + \frac{1}{4H^2}} \\ \frac{N^2l}{m^2 + \frac{1}{4H^2}} \\ -m\frac{N^2\left(k^2+l^2\right)}{\left(m^2 + \frac{1}{4H^2}\right)^2} \end{pmatrix} = \frac{1}{\omega_I}\frac{N^2}{m^2 + \frac{1}{4H^2}}\begin{pmatrix} k \\ l \\ -m\frac{k^2+l^2}{m^2 + \frac{1}{4H^2}} \end{pmatrix}. \tag{6.319}$$

Horizontal zeigt die Gruppengeschwindigkeit also in die gleiche Richtung wie die Phasengeschwindigkeit. Vertikal haben die beiden Geschwindigkeiten entgegengesetzte Vorzeichen. Für die vertikale Wellenlänge l_z gilt

$$m^2 = \frac{4\pi^2}{l_z^2} \Rightarrow \frac{m^2}{\frac{1}{4H^2}} = \frac{16\pi^2H^2}{l_z^2}. \tag{6.320}$$

Häufig gilt

$$\frac{m^2}{\frac{1}{4H^2}} \gg 1. \tag{6.321}$$

Unter dieser Voraussetzung gilt

$$\boldsymbol{c}_{\mathrm{gr}} = \frac{1}{\sqrt{f^2 + \frac{N^2}{m^2}\left(k^2+l^2\right)}} \frac{N^2}{m^2} \begin{pmatrix} k \\ l \\ -\frac{k^2+l^2}{m} \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{f^2 m^2 + N^2\left(k^2+l^2\right)}} \frac{N^2}{m} \begin{pmatrix} k \\ l \\ -\frac{k^2+l^2}{m} \end{pmatrix} \tag{6.322}$$

$$\Rightarrow \boldsymbol{c}_{\mathrm{gr}} \cdot \boldsymbol{k} = k^2 + l^2 - \left(k^2+l^2\right) = 0. \tag{6.323}$$

Phasengeschwindigkeit und Gruppengeschwindigkeit stehen also senkrecht aufeinander.

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

$$U = U(y) \tag{6.324}$$

und eine Störung

$$\boldsymbol{v}_h' = (u, v)^T = \boldsymbol{k} \times \nabla \psi \tag{6.325}$$

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,

$$\frac{\partial \zeta}{\partial t} + \beta v + u \frac{\partial \zeta}{\partial x} + v \frac{\partial \zeta}{\partial y} = 0. \tag{6.326}$$

Hierbei sei β homogen, s. Absch. 4.5.2. Macht man hier einen Störungsansatz nach Absch. 6.2, so erhält man

$$\frac{\partial \zeta'}{\partial t} + \beta v + U \frac{\partial \zeta'}{\partial x} + v \frac{\partial \overline{\zeta}}{\partial y} = 0. \tag{6.327}$$

Hierbei wurde für die Vorticity geschrieben $\zeta = \overline{\zeta} + \zeta'$ mit $\overline{\zeta}$ als Vorticity von U und ζ' als Vorticity von $\boldsymbol{v}_h'$. Setze für die Störung ψ

$$\psi(x, y, t) = Y(y)\, \psi_0 e^{i(kx - \omega t)} \tag{6.328}$$

an. Mit $Y(\pm b) \stackrel{!}{=} 0$ sind die Randbedingungen an v erfüllt, man erhält außerdem

$$v = = \frac{\partial \psi}{\partial x} = ik\psi, \tag{6.329}$$

$$\zeta' = = \Delta\psi = -k^2\psi + Y''\psi_0 e^{i(kx-\omega t)}, \tag{6.330}$$

$$\frac{\partial \zeta'}{\partial x} = -ik^3\psi + Y''\psi_0 ike^{i(kx-\omega t)}. \tag{6.331}$$

$$\tag{6.332}$$

Setzt man dies in die barotrope Vorticitygleichung ein und streicht $\psi_0 e^{i(kx-\omega t)}$, erhält man

$$\begin{aligned} i\omega k^2 Y - i\omega Y'' + \beta ikY - Uik^3 Y + Y'' ikU - ikY\frac{d^2U}{dy^2} &= 0 \\ \Leftrightarrow \omega k^2 Y - \omega Y'' + \beta kY - Uk^3 Y + Y'' kU - kY\frac{d^2U}{dy^2} &= 0. \end{aligned} \tag{6.333}$$

Instabilität bedeutet, dass ω nicht rein reell ist,

$$\omega = \omega_r + i\omega_c, \tag{6.334}$$

mit $\omega_r, \omega_c \in \mathbb{R} \setminus \{0\}$. Einsetzen in Glg. (6.333) liefert

$$k^2 Y(\omega_r + i\omega_c) - Y''(\omega_r + i\omega_c) + \beta k Y - Uk^3 Y + Y'' kU = 0. \tag{6.335}$$

Der Imaginärteil hiervon ist

$$k^2 Y\omega_c - Y''\omega_c = 0 \Leftrightarrow Y'' = k^2 Y. \tag{6.336}$$

Setzt man dies in den Realteil ein, erhält man

$$k^2 Y\omega_r \qquad -k^2 Y\omega_r + \beta k Y - Uk^3 Y + Uk^3 Y - kY\frac{d^2 U}{dy^2} = 0 \Rightarrow \frac{d^2 U}{dy^2} = \beta. \tag{6.337}$$

dies ist eine notwendige Bedingung. Setzt man umgekehrt Glg. (6.337) voraus, wird Glg. (6.333) zu (man weiß hier noch nicht, ob ω reell ist)

$$\omega k^2 Y - \omega Y'' - Uk^3 Y + Y'' kU = 0. \tag{6.338}$$

Geht man von einem jetförmigen Hintergrundwind

$$U(y) = U_{\min} + \frac{1}{2}(U_{\max} - U_{\min})\left(1 + e^{i\frac{y\pi}{b}}\right) \tag{6.339}$$

mit $U_{\min}, U_{\max} > 0$ aus, erhält man im Imaginärteil von Glg. (6.338)

$$k^3 Y\frac{1}{2}(U_{\max} - U_{\min})\sin\left(\frac{y\pi}{b}\right) = Y'' k\frac{1}{2}(U_{\max} - U_{\min})\sin\left(\frac{y\pi}{b}\right), \tag{6.340}$$

also ist

$$Y'' = k^2 Y. \tag{6.341}$$

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. (6.267) wird nun eine Abkürzung

$$g = g(\overline{u}_T, k) := \frac{\beta^2 K^4}{4k^2} + \overline{u}_T^2 k^2 (k^4 - K^4) \tag{6.342}$$

definiert. Im Fall $g < 0$ gilt

$$\omega = \omega_r + i\frac{1}{k^2 + K^2}\omega_i' \tag{6.343}$$

mit

$$\omega_i' := \pm\sqrt{|g(\overline{u}_T, k)|}. \tag{6.344}$$

Dies führt dazu, dass im Fall des negativen Vorzeichens die Amplitude exponentiell anwächst, es liegt also eine Instabilität vor. Definiere

$$N := \frac{\omega_i'}{k^2 + K^2} = \frac{\sqrt{|g(\overline{u}_T, k)|}}{k^2 + K^2}, \tag{6.345}$$

dies ist die Wachstumskonstante der Störung. Es gilt also im instabilen Fall

$$N^2 + \frac{g}{(k^2+K^2)} = N^2 + \frac{\frac{\beta^2 K^4}{4k^2} + \overline{u}_T^2 k^2 \left(k^4 - K^4\right)}{\left(k^2+K^2\right)^2} = 0. \tag{6.346}$$

An dieser Stelle definiert man eine dimensionslose Kreiswellenzahl

$$\varkappa := \frac{k}{K}, \tag{6.347}$$

damit folgt

$$\begin{aligned} N^2 + \frac{\frac{\beta^2}{4k^2} + \overline{u}_T^2 k^2 \left(\varkappa^2+1\right)\left(\varkappa^2-1\right)}{\left(\varkappa^2+1\right)^2} &= N^2 + \frac{\beta^2}{4k^2\left(\varkappa^2+1\right)^2} + \overline{u}_T^2 k^2 \frac{\varkappa^2-1}{\varkappa^2+1} = 0 \\ \Rightarrow N^2 + \frac{\beta^2}{4k^2\left(\varkappa^2+1\right)^2} + \frac{\beta^2}{K^2}\overline{u}_T^{\star 2}\varkappa^2 \frac{\varkappa^2-1}{\varkappa^2+1} &= 0 \end{aligned} \tag{6.348}$$

mit einem dimensionslosen thermischen Wind

$$\overline{u}_T^\star := \frac{\overline{u}_T K^2}{\beta}. \tag{6.349}$$

Hieraus folgt weiter

$$\frac{N^2K^2}{\varkappa^2\beta^2} + \frac{1}{4\varkappa^4\left(\varkappa^2+1\right)^2} + \overline{u}_T^{\star 2}\frac{\varkappa^2-1}{\varkappa^2+1} = 0 \tag{6.350}$$

Mit der dimensionslosen Wachstumsrate

$$n := \frac{NK}{\varkappa\beta} \tag{6.351}$$

kann man dies als

$$n^2 + \frac{1}{4\varkappa^4\left(\varkappa^2+1\right)^2} + \overline{u}_T^{\star 2}\frac{\varkappa^2-1}{\varkappa^2+1} = 0 \tag{6.352}$$

notieren. Stellt man dies nach $\overline{u}_T^{\star 2}$ um, folgt

$$\overline{u}_T^{\star 2} = n^2\frac{1+\varkappa^2}{1-\varkappa^2} + \frac{1}{4\varkappa^4\left(1-\varkappa^4\right)}. \tag{6.353}$$

Abb. 6.4 zeigt die für unterschiedliche Wellenzahlen und Wachstumsraten notwendigen thermischen Windscherungen. Aus den Definitionen von $\varkappa$ und $\overline{u}_T^\star$ 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 darutner ($z < 0$) den Index 2. Die Medien seien barotrop und inkompressibel. Zum Zeitpunkt $t = 0$ werde das

Abbildung 6.4: Die für gewisse Wachstumsraten notwendigen Windscherungen als Funktion der Wellenzahl.

Ströungsfeld durch

$$U_1 > 0, \tag{6.354}$$
$$U_2 > 0, \tag{6.355}$$
$$V_1 = V_2 = W_1 = W_2 = 0 \tag{6.356}$$

beschrieben. Die Coriolis-Kraft wird vernachlässigt. Es gilt

$$\nabla \times \boldsymbol{v}_1 = \nabla \times \boldsymbol{v}_2 = 0. \tag{6.357}$$

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

$$\psi_1 = U_1 x + \psi_1', \tag{6.358}$$
$$\psi_2 = U_2 x + \psi_2', \tag{6.359}$$

wobei die gestrichenen Größen für die Störungen stehen. Aufgrund der Divergenzfreiheit gilt

$$\Delta\psi_1' = \Delta\psi_2' = 0. \tag{6.360}$$

Die Auslenkung der Phasengrenze sei mit ζ bezeichnet. Mit $\boldsymbol{n}$ als Normalenvektor der Oberfläche und ζ als Oberflächenauslenkung gilt die kinematische Randbedingung

$$\boldsymbol{n} \cdot \nabla\psi_1 = \boldsymbol{n} \cdot \left(\frac{\partial\zeta}{\partial t}\boldsymbol{e}_z\right) = \boldsymbol{n} \cdot \nabla\psi_2 \text{ bei } z = \zeta. \tag{6.361}$$

Mit Vernachlässigung der Oberflächenspannung folgt die dynamische Randbedingung

$$p_1 = p_2 \text{ bei } z = \zeta. \tag{6.362}$$

Für den Normalenvektor $\boldsymbol{n}$ gilt

$$\boldsymbol{n} = \frac{1}{\sqrt{1 + \left(\frac{\partial\zeta}{\partial x}\right)^2}} \begin{pmatrix} -\frac{\partial\zeta}{\partial x} \\ 1 \end{pmatrix}. \tag{6.363}$$

Die kinematische Randbedidngung Glg. (6.361) wird damit zu

$$-\left(U_1+\frac{\partial\psi_1'}{\partial x}\right)\frac{\partial\zeta}{\partial x}+\frac{\partial\psi_1'}{\partial z}=\frac{\partial\zeta}{\partial t}=-\left(U_2+\frac{\partial\psi_2'}{\partial x}\right)\frac{\partial\zeta}{\partial x}+\frac{\partial\psi_2'}{\partial z}\text{ bei }z=\zeta, \tag{6.364}$$

wobei der Wurzelausdruck herausmultipliziert wurde. Um diesen Ausdruck zu linearisieren, wendet man ihn bei $z=0$ an und vernachlässigt quadratische Terme:

$$-U_1\frac{\partial\zeta}{\partial x}+\frac{\partial\psi_1'}{\partial z}=\frac{\partial\zeta}{\partial t}=-U_2\frac{\partial\zeta}{\partial x}+\frac{\partial\psi_2'}{\partial z}\text{ bei }z=0 \tag{6.365}$$

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

$$\frac{\partial\psi_1}{\partial t}+\frac{1}{2}\left|\nabla\psi_1\right|^2+\frac{p_1}{\rho_1}+gz = C, \tag{6.366}$$

$$\frac{\partial\psi_2}{\partial t}+\frac{1}{2}\left|\nabla\psi_2\right|^2+\frac{p_2}{\rho_2}+gz = C_2 \tag{6.367}$$

mit reellen Konstanten C, C_2 aufstellen. Die dynamische Randbedingung Glg. (6.362) impliziert bei $z=\zeta$ die Identität

$$\rho_1\left(C-\frac{\partial\psi_1}{\partial t}-\frac{1}{2}\left|\nabla\psi_1\right|^2-gz\right)=\rho_2\left(C_2-\frac{\partial\psi_2}{\partial t}-\frac{1}{2}\left|\nabla\psi_2\right|^2-gz\right). \tag{6.368}$$

Ohne Störung gilt

$$\rho_1\left(C-\frac{1}{2}U_1^2\right)=\rho_2\left(C_2-\frac{1}{2}U_2^2\right). \tag{6.369}$$

Subtrahieren von Glg. (6.369) von Glg. (6.368) führt zu

$$\rho_1\left(-\frac{\partial\psi_1}{\partial t}+\frac{1}{2}U_1^2-\frac{1}{2}\left|\nabla\psi_1\right|^2-gz\right)=\rho_2\left(-\frac{\partial\psi_2}{\partial t}+\frac{1}{2}U_2^2-\frac{1}{2}\left|\nabla\psi_2\right|^2-gz\right), \tag{6.370}$$

was bei $z=\zeta$ gilt. Mit den Glg.en (6.358) - (6.359) folgt

$$\frac{1}{2}\left|\nabla\psi_j\right|^2 = \frac{1}{2}\left(U_j^2+\left(\frac{\partial\psi_j'}{\partial x}\right)^2+2U_j\frac{\partial\psi_j'}{\partial x}+\left(\frac{\partial\psi_j'}{\partial z}\right)^2\right) \tag{6.371}$$

für $j=1,2$. Setzt man dies in Glg. (6.370) ein, erhält man

$$\begin{aligned}&\rho_1\left(-\frac{\partial\psi_1}{\partial t}-\frac{1}{2}\left(\frac{\partial\psi_1'}{\partial x}\right)^2-U_1\frac{\partial\psi_1'}{\partial x}-\frac{1}{2}\left(\frac{\partial\psi_1'}{\partial z}\right)^2-gz\right)\\ =\;&\rho_2\left(-\frac{\partial\psi_2}{\partial t}-\frac{1}{2}\left(\frac{\partial\psi_1'}{\partial x}\right)^2-U_2\frac{\partial\psi_1'}{\partial x}-\frac{1}{2}\left(\frac{\partial\psi_1'}{\partial z}\right)^2-gz\right),\end{aligned} \tag{6.372}$$

bei $z=\zeta$. Diese Gleichung linearisiert man, indem man sie bei $z=0$ auswertet und die quadratischen Terme vernachlässigt:

$$\rho_1\left(\frac{\partial\psi_1}{\partial t}+U_1\frac{\partial\psi_1'}{\partial x}+g\zeta\right)=\rho_2\left(\frac{\partial\psi_2}{\partial t}+U_2\frac{\partial\psi_1'}{\partial x}+g\zeta\right) \tag{6.373}$$

Nun macht man für $j=1,2$ den Ansatz

$$\psi_j'=A_j(z)\exp(ikx-i\omega t). \tag{6.374}$$

Mit den Laplace-Gleichungen Glg. (6.360) folgt

$$-k^2 A_j + \frac{d^2 A_j}{dz^2} = 0. \tag{6.375}$$

Die Lösungen sind von der Form

$$A_j(z) = A_\pm \exp(\pm kz). \tag{6.376}$$

Mit den Festlegungen

$$\lim_{z\to\infty} \psi_1' = 0, \tag{6.377}$$

$$\lim_{z\to-\infty} \psi_2' = 0, \tag{6.378}$$

welche bedeuten, dass die Störung in der Unendlichkeit verschwinden soll, folgen

$$\psi_1' = A_- \exp[ikx - i\omega t - kz], \tag{6.379}$$

$$\psi_2' = A_+ \exp[ikx - i\omega t + kz]. \tag{6.380}$$

Für die Oberflächenauslenkung nimmt man entsprechend

$$\zeta = \zeta_0 \exp(ikx - i\omega t) \tag{6.381}$$

an. Setzt man dies in die Glg.en (6.365) und (6.373) ein, erhält man

$$-U_1 ik\zeta_0 - kA_- = -i\omega\zeta_0 = -U_2 ik\zeta_0 + kA_+, \tag{6.382}$$

$$\rho_1(-i\omega A_- + ikU_1 A_- + g\zeta_0) = \rho_2(-i\omega A_+ + ikU_2 A_+ + g\zeta_0). \tag{6.383}$$

Glg. (6.382) impliziert

$$A_- = \frac{i}{k}\zeta_0(\omega - U_1 k), \tag{6.384}$$

$$A_+ = \frac{i}{k}\zeta_0(U_2 k - \omega). \tag{6.385}$$

Setzt man dies in Glg. (6.383) ein, folgt

$$\begin{aligned}
\rho_1\left(-i\omega\frac{i}{k}\zeta_0(\omega - U_1 k) + ikU_1\frac{i}{k}\zeta_0(\omega - U_1 k) + g\zeta_0\right) &= \rho_2\left(-i\omega\frac{i}{k}\zeta_0(U_2 k - \omega) + ikU_2\frac{i}{k}\zeta_0(U_2 k - \omega) + g\zeta_0\right) \\
\Leftrightarrow \rho_1\left(\frac{\omega}{k}(\omega - U_1 k) - U_1(\omega - U_1 k) + g\right) &= \rho_2\left(\frac{\omega}{k}(U_2 k - \omega) - U_2(U_2 k - \omega) + g\right) \\
\Leftrightarrow \rho_1(\omega(\omega - U_1 k) - kU_1(\omega - U_1 k) + kg) &= \rho_2(\omega(U_2 k - \omega) - U_2 k(U_2 k - \omega) + kg).
\end{aligned} \tag{6.386}$$

Dies ist eine quadratische Gleichung für ω, also eine Dispersionsrelation. Weitere algebraische Umformung ergibt

$$\omega^2 - 2k\omega\frac{\rho_1 U_1 + \rho_2 U_2}{\rho_1 + \rho_2} - kg\frac{\rho_2 - \rho_1}{\rho_1 + \rho_2} + k^2\frac{U_1^2\rho_1 + U_2^2\rho_2}{\rho_1 + \rho_2} = 0 \tag{6.387}$$

Dies ergibt zwei Lösungen für die Kreisfrequenz:

$$\begin{aligned}
\omega_\pm &= \frac{\rho_1 U_1 k + \rho_2 U_2 k}{\rho_1 + \rho_2} \pm \left[kg\frac{\rho_2 - \rho_1}{\rho_1 + \rho_2} - k^2\frac{U_1^2\rho_1\rho_2 + U_2^2\rho_1\rho_2 - 2\rho_1\rho_2 U_1 U_2}{(\rho_1 + \rho_2)^2}\right]^{1/2} \\
\Leftrightarrow \omega_\pm &= \frac{\rho_1 U_1 k + \rho_2 U_2 k}{\rho_1 + \rho_2} \pm \left[kg\frac{\rho_2 - \rho_1}{\rho_1 + \rho_2} - k^2\rho_1\rho_2\frac{(U_1 - U_2)^2}{(\rho_1 + \rho_2)^2}\right]^{1/2}
\end{aligned} \tag{6.388}$$

Instabilität liegt vor im Fall

$$\begin{aligned} kg\frac{\varrho_2-\varrho_1}{\varrho_1+\varrho_2} &- k^2\varrho_1\varrho_2\frac{(U_1-U_2)^2}{(\varrho_1+\varrho_2)^2} < 0 \\ \Leftrightarrow kg\frac{\varrho_2-\varrho_1}{\varrho_1+\varrho_2} &< k^2\varrho_1\varrho_2\frac{(U_1-U_2)^2}{(\varrho_1+\varrho_2)^2} \\ \Leftrightarrow g\left(\varrho_2^2-\varrho_1^2\right) &< k\varrho_1\varrho_2\left(U_1-U_2\right)^2, \end{aligned} \tag{6.389}$$

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. (6.389) 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

$$\frac{\partial u}{\partial t}+u\frac{\partial u}{\partial x}+w\frac{\partial w}{\partial z} = -\frac{1}{\varrho}\frac{\partial p}{\partial x}, \tag{6.390}$$

$$\frac{\partial w}{\partial t}+u\frac{\partial w}{\partial x}+w\frac{\partial w}{\partial z} = -\frac{1}{\varrho}\frac{\partial p}{\partial z}-g, \tag{6.391}$$

$$\frac{\partial u}{\partial x}+\frac{\partial w}{\partial z} = 0, \tag{6.392}$$

$$\frac{\partial \sigma}{\partial t}+u\frac{\partial \sigma}{\partial x}+w\frac{\partial \sigma}{\partial z} = 0. \tag{6.393}$$

Nun geht man von einem vertial gescherten Hintergrundwindfeld $\overline{u}(z) = u(x,z,t) - u'(x,z,t)$ aus, der vertikale Hintergrundwind $\overline{w}$ verschwinde. Die Hintergrunddichte $\overline{\varrho}(z) = \varrho(x,z,t) - \varrho'(x,z,t)$ sei in hydrostatischer Balance mit dem Hintergrunddruckfeld $\overline{p}(z) = p(x,z,t) - p'(x,z,t)$, also

$$\frac{\partial \overline{p}}{\partial z} = -g\overline{\varrho}. \tag{6.394}$$

Setzt man dies in die Gleichungen ein und linearisiert sie, erhält man

$$\frac{\partial u'}{\partial t}+\overline{u}\frac{\partial u'}{\partial x}+w\frac{\partial \overline{u}}{\partial z} = -\frac{1}{\varrho}\frac{\partial p'}{\partial x} \approx -\frac{1}{\tilde{\varrho}}\frac{\partial p'}{\partial x}, \tag{6.395}$$

$$\frac{\partial w}{\partial t}+\overline{u}\frac{\partial w}{\partial x} = -\frac{1}{\varrho}\frac{\partial p}{\partial z}-g \approx -\frac{1}{\tilde{\varrho}}\frac{\partial p}{\partial z}-\frac{g\varrho}{\tilde{\varrho}} = -\frac{1}{\tilde{\varrho}}\frac{\partial p'}{\partial z}-\frac{g\varrho'}{\tilde{\varrho}}, \tag{6.396}$$

$$\frac{\partial u'}{\partial x}+\frac{\partial w}{\partial z} = 0, \tag{6.397}$$

$$\frac{\partial \sigma'}{\partial t}+\overline{u}\frac{\partial \sigma'}{\partial x}+w\frac{\partial \overline{\sigma}}{\partial z} = 0. \tag{6.398}$$

In der x-Komponente der Impulsgleichung wurde im Nenner des Druckgradientterms $\varrho \to \tilde{\varrho}$ ersetzt, wobei $\tilde{\varrho}$ eine als homogen angenommene mittlere Dichte bezeichnet; in der z-Komponente wurde die rechte Seite mit $\frac{\varrho}{\tilde{\varrho}}$ multipliziert, bevor Glg. (6.394) eingesetzt wurde. Die Störung der Strömung ist divergenzfrei, daher setzt man

eine Stromfunktion $\psi = \psi(x, z, t)$ mit

$$u' = \frac{\partial \psi}{\partial z}, \tag{6.399}$$

$$w = -\frac{\partial \psi}{\partial x}. \tag{6.400}$$

an. Damit ist die Kontinuitätsgleichung automatisch erfüllt. Die verbleibenden drei Gleichungen lauten

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial t \partial z} + \overline{u}\frac{\partial^2 \psi}{\partial z \partial x} - \frac{\partial \psi}{\partial x}\frac{\partial \overline{u}}{\partial z} = -\frac{1}{\tilde{\rho}}\frac{\partial p'}{\partial x}, \tag{6.401}$$

$$-\frac{\partial^2 \psi}{\partial t \partial x} - \overline{u}\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} = -\frac{1}{\tilde{\rho}}\frac{\partial p'}{\partial z} - \frac{g\rho'}{\tilde{\rho}}, \tag{6.402}$$

$$\frac{\partial \sigma'}{\partial t} + \overline{u}\frac{\partial \sigma'}{\partial x} - \frac{\partial \psi}{\partial x}\frac{\partial \overline{\sigma}}{\partial z} = 0. \tag{6.403}$$

Nun macht man weiterhin die Ansätze

$$\psi(x, z, t) = \psi_0(z)\exp[ik(x - ct)], \tag{6.404}$$

$$p'(x, z, t) = p_0(z)\exp[ik(x - ct)], \tag{6.405}$$

$$\rho'(x, z, t) = \rho_0(z)\exp[ik(x - ct)], \tag{6.406}$$

$$\sigma'(x, z, t) = \sigma_0(z)\exp[ik(x - ct)]. \tag{6.407}$$

Daraus folgt

$$-ikc\frac{d\psi_0}{dz} + \overline{u}ik\frac{d\psi_0}{dz} - ik\psi_0\frac{\partial \overline{u}}{\partial z} = -ik\frac{p_0}{\tilde{\rho}}, \tag{6.408}$$

$$-k^2 c\psi_0 + \overline{u}k^2\psi_0 = -\frac{1}{\tilde{\rho}}\frac{dp_0}{dz} - g\frac{\rho_0}{\tilde{\rho}}, \tag{6.409}$$

$$-ikc\sigma_0 + \overline{u}ik\sigma_0 - ik\psi_0\frac{d\overline{\sigma}}{dz} = 0. \tag{6.410}$$

Dies ergibt vereinfacht

$$-c\frac{d\psi_0}{dz} + \overline{u}\frac{d\psi_0}{dz} - \psi_0\frac{\partial \overline{u}}{\partial z} = -\frac{p_0}{\tilde{\rho}}, \tag{6.411}$$

$$\psi_0 k^2(\overline{u} - c) = -\frac{1}{\tilde{\rho}}\frac{dp_0}{dz} - g\frac{\rho_0}{\tilde{\rho}}, \tag{6.412}$$

$$\sigma_0(\overline{u} - c) - \psi_0\frac{d\overline{\sigma}}{dz} = 0. \tag{6.413}$$

Differenziert man die erste Gleichung nach z, erhält man

$$\frac{d^2\psi_0}{dz^2}(\overline{u} - c) - \psi_0\frac{d^2\overline{u}}{dz^2} = -\frac{1}{\tilde{\rho}}\frac{dp_0}{dz}. \tag{6.414}$$

Setzt man hier Glg. (6.412) ein, folgt

$$(\overline{u} - c)\left[\frac{d^2\psi_0}{dz^2} - k^2\psi_0\right] - \psi_0\frac{d^2\overline{u}}{dz^2} - g\frac{\rho_0}{\tilde{\rho}} = 0. \tag{6.415}$$

Um ρ_0 zu eliminieren, stellt man zunächst Glg. (6.413) nach σ_0 um und erhält

$$\sigma_0 = \frac{\psi_0}{\overline{u} - c}\frac{d\overline{\sigma}}{dz}. \tag{6.416}$$

O. B. d. A. kann man das Referenzniveau in das gerade betrachtete Niveau legen und $\rho_0 = \sigma_0$ verwenden. Dies ergibt eingesetzt

$$(\overline{u} - c)\left[\frac{d^2\psi_0}{dz^2} - k^2\psi_0\right] - \psi_0\frac{d^2\overline{u}}{dz^2} - \frac{\psi_0}{\overline{u} - c}\frac{g}{\tilde{\rho}}\frac{d\overline{\sigma}}{dz} = 0. \tag{6.417}$$

Hier setzt man die Brunt-Väisälä-Frequenz

$$N^2 := -\frac{g}{\tilde{\rho}}\frac{d\overline{\sigma}}{dz} \tag{6.418}$$

ein und erhält

$$(\overline{u} - c)\left(\frac{d^2}{dz^2} - k^2\right)\psi + \left(\frac{N^2}{\overline{u} - c} - \frac{d^2\overline{u}}{dz^2}\right)\psi = 0. \tag{6.419}$$

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 $\overline{u}(z)$. Ist $\{\psi, c\}$ eine Lösung, so ist $\{\psi^\star, c^\star\}$ ebenfalls eine Lösung. Ein postiver Imaginärteil von c bedeutet, dass ψ eine instabile Lösung ist. Eine Scherung $\overline{u} = \overline{u}(z)$ ist genau dann stabil, wenn alle Lösungen von Glg. (6.419) reelle Eigenwerte haben. Man geht nun weiter davon aus, dass bei $z = 0, H$ die Randbedingungen $w = 0$ gelten, daraus folgt

$$\psi(0) = \psi(H) = 0. \tag{6.420}$$

Nun definiert man φ durch

$$\psi = \sqrt{\overline{u} - c}\varphi. \tag{6.421}$$

Differenzieren nach z ergibt

$$\frac{d\psi}{dz} = \frac{1}{2}\frac{1}{\sqrt{\overline{u} - c}}\varphi\frac{d\overline{u}}{dz} + \sqrt{\overline{u} - c}\frac{d\varphi}{dz}, \tag{6.422}$$

$$\Rightarrow \frac{d^2\psi}{dz^2} = \frac{1}{\sqrt{\overline{u} - c}}\frac{d\overline{u}}{dz}\frac{d\varphi}{dz} - \frac{1}{4}\frac{1}{\sqrt{\overline{u} - c}^3}\varphi\left(\frac{d\overline{u}}{dz}\right)^2 + \frac{1}{2}\frac{1}{\sqrt{\overline{u} - c}}\frac{d^2\overline{u}}{dz^2}\varphi + \sqrt{\overline{u} - c}\frac{d^2\varphi}{dz^2}. \tag{6.423}$$

Setzt man dies in Glg. (6.419) ein und dividiert durch $\sqrt{\overline{u} - c}$, erhält man

$$\frac{d}{dz}\left[(\overline{u} - c)\frac{d\varphi}{dz}\right] - \left[k^2(\overline{u} - c) + \frac{1}{2}\frac{d^2\overline{u}}{dz^2} + \frac{1}{\overline{u} - c}\left(\frac{1}{4}\left(\frac{d\overline{u}}{dz}\right)^2 - N^2\right)\right]\varphi = 0. \tag{6.424}$$

Die Randbedingungen bleiben unter der Annahme $c \neq \overline{u}$

$$\varphi(0) = \varphi(H) = 0. \tag{6.425}$$

Die Glg. (6.424) wird nun mit $\varphi^\star$ multipliziert:

$$\varphi^\star\frac{d}{dz}\left[(\overline{u} - c)\frac{d\varphi}{dz}\right] - \left[k^2(\overline{u} - c) + \frac{1}{2}\frac{d^2\overline{u}}{dz^2} + \frac{1}{\overline{u} - c}\left(\frac{1}{4}\left(\frac{d\overline{u}}{dz}\right)^2 - N^2\right)\right]|\varphi|^2 = 0. \tag{6.426}$$

Inegriert man den ersten Term von 0 bis H, folgt mittels partieller Integration

$$\int_0^H \varphi^\star\frac{d}{dz}\left[(\overline{u} - c)\frac{d\varphi}{dz}\right]dz = -\int_0^H (\overline{u} - c)\left|\frac{d\varphi}{dz}\right|^2 dz. \tag{6.427}$$

Glg. (6.426) wird nun von 0 nach H integriert:

$$\int_0^H \left[N^2 - \frac{1}{4}\left(\frac{d\overline{u}}{dz}\right)^2\right]\frac{|\varphi|^2}{\overline{u} - c}dz = \int_0^H (\overline{u} - c)\left(\left|\frac{d\varphi}{dz}\right|^2 + k^2|\varphi|^2\right) + \frac{1}{2}\frac{d^2\overline{u}}{dz^2}|\varphi|^2 dz. \tag{6.428}$$

Man schreibt nun für die Phasengeschwindigkeit

$$c = c_r + ic_i \tag{6.429}$$

mit $c_r, c_i \in \mathbb{R}$. Der Imaginärteil von Glg. (6.428) schreibt sich als

$$\begin{aligned} c_i \int_0^H \left[N^2 - \frac{1}{4}\left(\frac{d\overline{u}}{dz^2}\right)^2\right] \frac{|\varphi|^2}{|\overline{u}-c|^2} dz &= -c_i \int_0^H \left(\left|\frac{d\varphi}{dz}\right|^2 + k^2 |\varphi|^2\right) dz \\ \Rightarrow c_i \int_0^H \left[N^2 - \frac{1}{4}\left(\frac{d\overline{u}}{dz^2}\right)^2\right] \frac{|\varphi|^2}{|\overline{u}-c|^2} + \left|\frac{d\varphi}{dz}\right|^2 + k^2 |\varphi|^2 dz &= 0. \end{aligned} \tag{6.430}$$

Gilt $N^2 - \frac{1}{4}\left(\frac{d\overline{u}}{dz^2}\right)^2 > 0$ überall im Intervall $(0, H)$, so ist $c_i = 0$. Man definiert die *Richardson-Zahl* R_i durch

$$R_i := \frac{N^2}{\left(\frac{d\overline{u}}{dz}\right)^2}. \tag{6.431}$$

Die Frequenz

$$M := \frac{d\overline{u}}{dz} \tag{6.432}$$

bezeichnet man als *Prandtl-Frequenz*. Die Bedingung

$$R_i > \frac{1}{4} \text{ überall in } (0, H) \tag{6.433}$$

ist hinreichend für Stabiilität.

6.5.4 Thermische Instabilität

Die Atmosphäre habe an einem gegebenen Punkt die Schichtung $T = T(z)$. Üblicherweise ist

$$\frac{\partial T}{\partial z} < 0, \tag{6.434}$$

bei $\frac{\partial T}{\partial z} > 0$ spricht man von einer *Inversion*. Der trockenadiabatische Temperaturgradient ist nach Glg. (3.215) durch

$$\Gamma_d = \frac{g}{c^{(p)}} \tag{6.435}$$

definiert. Im Fall

$$\frac{\partial T}{\partial z} < -\Gamma_d \tag{6.436}$$

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_L als die Höhe z_{LCL}, in der es gesättigt wäre, also erfüllt es die Gleichung

$$p_v^{(S)}\left(T(z) - \Gamma_d\left(z_{\mathrm{LCL}} - z\right)\right) \equiv p_v(z)\left(1 - \frac{\Gamma_d\left(z_{\mathrm{LCL}} - z\right)}{T(z)}\right)^{\frac{g}{R_d \Gamma_d}} \tag{6.437}$$

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.

(3.194) erhält man

$$
\begin{aligned}
c^{(v)}\frac{dT}{dz}+p\frac{d}{dz}\frac{1}{\varrho} &= \frac{1}{\varrho}\frac{dq}{dz}\\
\Rightarrow \frac{dT}{dz} &= \frac{1}{c^{(v)}}\left[\frac{1}{\varrho}\frac{dq}{dz}-p\frac{d}{dz}\frac{1}{\varrho}\right]=\frac{1}{\varrho c^{(v)}}\left[\frac{dq}{dz}+\frac{p}{\varrho}\frac{d\varrho}{dz}\right]=-\frac{g}{c^{(v)}}\left[\frac{dq}{dp}+\frac{p}{\varrho}\frac{d\varrho}{dp}\right].
\end{aligned}
\tag{6.438}
$$

Hierbei wurde die hydrostatische Grundgleichung eingesetzt. Für die Wärmeleistung pro Volumen infolge des Phasenübergangs dq gilt

$$
dq=\frac{c_c}{v_h}dm_c \tag{6.439}
$$

mit m_c als kondensiertet oder resublimierter Masse und c_c als Phasenübergangswärme. Mit der Zustandsgleichung für Wasserdampf gilt

$$
\begin{aligned}
p_v &= \varrho_v R_v T \Rightarrow m_v=\frac{V_v p_v}{R_v T}=\frac{V_h p_v}{R_v T}=\frac{m_h R_h p_v^{(S)}(T)}{pR_v}\\
\Rightarrow dm_c &= -dm_v=\frac{m_h R_h p_v^{(S)}(T)}{pR_v}\left(\frac{dp}{p}-\frac{dp_v^{(S)}}{p_v^{(S)}}+\frac{dm_c}{m_h}\right)\\
\Rightarrow dm_c\left(1-\frac{R_h p_v^{(S)}(T)}{pR_v}\right) &= \frac{m_h R_h p_v^{(S)}(T)}{pR_v}\left(\frac{dp}{p}-\frac{dp_v^{(S)}}{p_v^{(S)}}\right)\\
\Rightarrow dm_c &= m_h\frac{\frac{dp}{p}-\frac{dp_v^{(S)}}{p_v^{(S)}}}{\frac{pR_v}{R_h p_v^{(S)}}-1}.
\end{aligned}
\tag{6.440}
$$

Hierbei ist $p_v^{(S)}=p_v^{(S)}(T)$ der Sättigungsdampfdruck. Daraus folgt

$$
\begin{aligned}
dq &= \frac{c_c}{T}\frac{dp-\frac{p}{p_v^{(S)}}dp_v^{(S)}}{\frac{pR_v}{p_v^{(S)}}-R_h}\\
\Rightarrow \frac{dq}{dp} &= \frac{c_c}{\frac{pR_vT}{p_v^{(S)}}-R_hT}\left(1-\frac{p}{p_v^{(S)}}\frac{dp_v^{(s)}}{dp}\right)=\frac{c_c}{\frac{pR_vT}{p_v^{(S)}}-TR_h}\left(1+\frac{1}{g\varrho}\frac{dT}{dz}\frac{p}{p_v^{(S)}}\frac{dp_v^{(s)}}{dT}\right)\\
&= \frac{c_c}{TpR_v-Tp_v^{(S)}R_h}\left(p_v^{(S)}+\frac{p}{g\varrho}\frac{dT}{dz}\frac{dp_v^{(s)}}{dT}\right)\\
&= \frac{c_c p_v^{(S)}}{TpR_v-Tp_v^{(S)}R_h}+\frac{p}{Tg\varrho}\frac{c_c}{pR_v-p_v^{(S)}R_h}\frac{dp_v^{(s)}}{dT}\frac{dT}{dz}.
\end{aligned}
\tag{6.441}
$$

Setzt man dies in Glg. (6.438) ein und wendet ein weiteres Mal die Kettenregel an, erhält man

$$
\begin{aligned}
\frac{dT}{dz} &= -\frac{g}{c^{(v)}}\left[\frac{c_c p_v^{(S)}}{TpR_v-Tp_v^{(S)}R_h}\right.\\
&\quad\left.+\frac{p}{Tg\varrho}\frac{c_c}{pR_v-p_v^{(S)}R_h}\frac{dp_v^{(s)}}{dT}\frac{dT}{dz}+\frac{p}{\varrho}\frac{\partial\varrho}{\partial p}-\frac{p}{g\varrho^2}\frac{\partial\varrho}{\partial T}\frac{dT}{dz}\right].
\end{aligned}
\tag{6.442}
$$

Nun braucht man eine Zustandsgleichung. Für die Dichte gilt

$$
\varrho=\varrho_h+\varrho_c=\frac{p}{R_hT}+\varrho_c. \tag{6.443}
$$

Man erhält damit

$$\begin{aligned}
\frac{dT}{dz} &= \frac{g}{c^{(v)}}\Bigg[-\frac{c_c p_v^{(S)}}{TpR_v - Tp_v^{(S)}R_h} \\
&\quad -\frac{p}{Tg\varrho}\frac{c_c}{pR_v - p_v^{(S)}R_h}\frac{dp_v^{(s)}}{dT}\frac{dT}{dz} - \frac{p}{\varrho R_h T} - \frac{p^2}{R_h g \varrho^2 T^2}\frac{dT}{dz}\Bigg] \\
&= \frac{g}{c^{(v)}}\Bigg[-\frac{c_c p_v^{(S)}}{TpR_v - Tp_v^{(S)}R_h} - \frac{p}{Tg\varrho}\frac{c_c}{pR_v - p_v^{(S)}R_h}\frac{dp_v^{(s)}}{dT}\frac{dT}{dz} \\
&\quad -1 + \frac{\varrho_c}{\varrho} - \frac{1}{g}\left(1 - \frac{\varrho_c}{\varrho}\right)\frac{p}{\varrho T}\frac{dT}{dz}\Bigg]. \qquad (6.444)
\end{aligned}$$

Dies stellt man nun nach $\frac{dT}{dz}$ um:

$$\begin{aligned}
&\frac{dT}{dz}\left(1 + \frac{p}{Tc^{(v)}\varrho}\frac{c_c}{pR_v - p_v^{(S)}R_h}\frac{dp_v^{(s)}}{dT} + \frac{1}{c^{(v)}}\left(1 - \frac{\varrho_c}{\varrho}\right)\frac{p}{\varrho T}\right) \\
&= \frac{g}{c^{(v)}}\left(\frac{\varrho_c}{\varrho} - 1\right) - \frac{gc_c p_v^{(S)}(T)}{c^{(v)}T\left(R_v p - p_v^{(S)}R_h\right)} \\
\Rightarrow \frac{dT}{dz} &= -\frac{g}{c^{(p)}}\frac{1 - \frac{\varrho_c}{\varrho} + \frac{c_c p_v^{(S)}}{T\left(R_v p - p_v^{(S)}R_h\right)}}{\frac{c^{(v)}}{c^{(p)}} + \frac{p}{T\varrho c^{(p)}}\frac{c_c}{pR_v - p_v^{(S)}R_h}\frac{dp_v^{(s)}}{dT} + \left(1 - \frac{\varrho_c}{\varrho}\right)\frac{p}{c^{(p)}T\varrho}} \\
&= -\Gamma_d\beta \qquad (6.445)
\end{aligned}$$

Hierbei ist

$$\beta = \beta\left(p, T, \varrho_c\right) := \frac{1 - \frac{\varrho_c}{\varrho} + \frac{c_c p_v^{(S)}}{T\left(R_v p - p_v^{(S)}R_h\right)}}{\frac{c^{(v)}}{c^{(p)}} + \frac{p}{T\varrho c^{(p)}}\frac{c_c}{pR_v - p_v^{(S)}R_h}\frac{dp_v^{(s)}}{dT} + \left(1 - \frac{\varrho_c}{\varrho}\right)\frac{p}{c^{(p)}T\varrho}}. \qquad (6.446)$$

Für die Ableitung $\frac{dp_v^{(s)}}{dT}$ kann die Clausius-Clapeyron-Gleichung eingesetzt werden. Der sogenannte *feuchtadiabatische Temperaturgradient* wird nun durch

$$\Gamma_h := \Gamma_d\beta \qquad (6.447)$$

definiert. Setzt man in Glg. (6.446) $\varrho_c = 0, R_h = R_d$ sowie $p_v \ll p$ ein, folgt der in der Literatur häufig angetroffene Ausdruck

$$\frac{dT}{dz} = -\frac{g}{c^{(p)}}\frac{1 + \frac{c_c p_v^{(S)}}{TR_v p}}{1 + \frac{R_d c_c}{R_v c^{(p)} p}\frac{dp_v^{(s)}}{dT}} = -\Gamma_d\beta' \qquad (6.448)$$

mit einem vereinfachten Faktor

$$\begin{aligned}
\beta' &\approx \beta'(p, T) := \frac{1 + \frac{c_c p_v^{(S)}}{TR_v p}}{1 + \frac{\varepsilon' c_c}{pc^{(p)}}\frac{dp_v^{(s)}}{dT}} \overset{(2.899)}{\approx} \frac{1 + \frac{c_c p_v^{(S)}}{TR_v p}}{1 + \frac{\varepsilon' c_c^2 p_v^{(s)}}{R_v c^{(p)} T^2 p}} \\
&\overset{(2.836)}{\approx} \frac{1 + \frac{c_c r^{(S)}}{TR_d}}{1 + \frac{c_c^2 r^{(s)}}{R_v c^{(p)} T^2}}, \qquad (6.449)
\end{aligned}$$

welcher nicht mehr von der Dichte des bereits auskondensierten Wassers abhängt. Im Fall $\frac{dp_v^{(S)}}{dT} = p_v^{(S)} = 0$ folgt

$$\Gamma_h = \Gamma_d. \qquad (6.450)$$

Abbildung 6.5: Approximation von β gemäß Glg. (6.449).

Im Fall gesättigter Luft und

$$\frac{\partial T}{\partial z} < -\Gamma_h \tag{6.451}$$

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

$$f(z, z') := -\frac{1}{\varrho'(z, z')} \frac{\partial p(z')}{\partial z} - g = \frac{g\varrho(z')}{\varrho'(z, z')} - g = g\frac{\varrho(z') - \varrho'(z, z')}{\varrho'(z, z')}, \tag{6.452}$$

wobei $\varrho'(z, z')$ die Dichte des Teilchens bei z ist, nachdem man es adiabatisch nach z' verschoben hat. Man definiert außerdem eine Funktion $\widetilde{F}(z, z')$ durch

$$\widetilde{F}(z, z') := g \int_z^{z'} \frac{\varrho(z'') - \varrho'(z, z'')}{\varrho'(z, z'')} dz'' \tag{6.453}$$

als die Arbeit, die die Schichtung an einem Teilchen geleistet hat, welches adiabatisch von z nach z' ausgelenkt wurde. Üblicherweise wählt man $z = z_{2\mathrm{m}} := Z_{\mathrm{SFC}} + 2$ m, man definiert

$$F(z) := g \int_{z_{2\mathrm{m}}}^{z} \frac{\varrho(z') - \varrho'(z')}{\varrho'(z')} dz' \tag{6.454}$$

mit dem Bezeichnungsmissbrauch

$$\varrho'(z') := \varrho'(z_{2\mathrm{m}}, z'). \tag{6.455}$$

Für den Integranden wird ebenso

$$f(z') := g \frac{\varrho(z') - \varrho'(z')}{\varrho'(z')} \tag{6.456}$$

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

$$\mathrm{CAPE} := \int_{z_{2\mathrm{m}}}^{z_T} \Theta(f(z'))\, dz', \tag{6.457}$$

wobei Θ die $\Theta-$Funktion bezeichnet. Im Falle eines idealen Gases kann man für f notieren

$$f(z') := g \frac{\frac{1}{T} - \frac{1}{T'}}{\frac{1}{T'}} = g \frac{T' - T}{T} = g \frac{\theta' - \theta}{\theta}. \tag{6.458}$$

Das *level of free convection* z_{LFC} ist die Höhe, in der das adiabatisch aufstegende Teilchen zum ersten mal leichter ist als die Umgebung

$$z_{\mathrm{LFC}} := \inf\{z | f(z) > 0\}. \tag{6.459}$$

Wenn das Teilchen diese Höhe erreicht, wird es weiter aufsteigen, was man als *freie Kovektion* bezeichnet, also Konvektion, die auch ohne dynamischen Antrieb stattfinden würde. Analog bezeichnet man

$$z_{\mathrm{EL}} := \sup\{z | f(z) > 0, z < 2z_T\} \tag{6.460}$$

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. (6.457) die $\Theta-$Funktion weggelassen und nur von z_{LFC} bist 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

$$z_{\mathrm{MCT}} := \inf\{z \,|\, \widetilde{F}(z_{\mathrm{LFC}}, z) < 0\}. \tag{6.461}$$

Das Phänomen $z_{\mathrm{MCT}} > z_{\mathrm{EL}}$ 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

$$0 \equiv g \int_{z_{2\mathrm{m}}}^{z_{\mathrm{LFC}}} \frac{\varrho(z') - \tilde{\varrho}'(z')}{\tilde{\varrho}'(z')}, \tag{6.462}$$

wobei $\tilde{\varrho}'(z')$ die Dichte des adiabatisch von $z_{2\mathrm{m}}$ nach z' gehobenen Teilchens ist, was in zwei Metern Höhe die Auslösetemperatur hätte. Die Energie CIN, die dabei überwunden werden muss, also

$$\mathrm{CIN} := \widetilde{F}(z_{2\mathrm{m}}, z_{\mathrm{LFC}}). \tag{6.463}$$

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

$$z_{\mathrm{CCL}} \geq z_{\mathrm{LCL}}. \tag{6.464}$$

7 Synoptik und Meso−a−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 $\pm\left(\frac{\pi}{2}-\beta\right)$ 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. (6.217) und ω−Gleichung Ggl. (6.222), 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

$$\chi := \frac{\partial\varphi}{\partial t}, \tag{7.1}$$

7.1.1 Tendenzgleichung

Mit Glg. (7.1) kann man Glg. (6.217) wie folgt umschreiben:

$$\underbrace{\left[\Delta + \frac{f_0^2}{\sigma}\frac{\partial^2}{\partial p^2}\right]\chi}_{=:A} = \underbrace{-f_0 v_g \beta}_{=:B} \underbrace{-\boldsymbol{v}_{h,g}\cdot\nabla\left(\Delta\varphi\right)}_{=:C} \underbrace{-\frac{f_0^2}{\sigma}\frac{\partial}{\partial p}\left[\boldsymbol{v}_h\cdot\nabla\frac{\partial\varphi}{\partial p}\right]}_{=:D} \tag{7.2}$$

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

$$\mathrm{A} \sim -\chi \sim \text{Zyklogenese}, \tag{7.3}$$

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

$$\varphi\left(x,y,p\right) = -Uf_0 y + \frac{\hat{v}f_0 L}{2\pi}\sin\left(\frac{2\pi}{L}x\right)\sin\left(ap+b\right) + \varphi_0\left(p\right), \tag{7.4}$$

wobei $\hat{v}$ die Geschwindigkeitsamplitude der meridionalen Schwingung bezeichnet. Die linere Funktion $ap+b$ ermöglicht eine Phasenverschiebung der Störung mit der Höhe; φ_0 steht für einen Hintergrundzustand. Für den Term B findet man in diesem Fall

$$B = -f_0\beta\hat{v}\cos\left(\frac{2\pi}{L}x\right). \tag{7.5}$$

Dieser Term führt also überall dort zu Zyklogenese, wo v_g negativ ist, also stromaufwärts des Troges 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

$$\Delta\varphi = -\frac{2\pi}{L}\hat{v}f_0\sin\left(\frac{2\pi}{L}x\right), \tag{7.6}$$

wobei daran erinnert sei, dass $\Delta\varphi$ sich hier nur auf die Horizontale bezieht. Hieraus folgt

$$C = U\frac{4\pi^2}{L^2}\hat{v}f_0\cos\left(\frac{2\pi}{L}x\right) = -\frac{2\pi U}{L\beta}B. \tag{7.7}$$

Dieser Term führt also stromabwärts des Troges und stromaufwärts des Rückens zu Zyklogenese, anderswo zu Antizyklogenese. Er trägt also zu normaler Progression bei und nimmt mit der Wellenlänge ab. Bei einer Grenzwellenlänge

$$\widetilde{L} = \frac{2\pi U}{\beta} \tag{7.8}$$

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 $\boldsymbol{v}_h \cdot \nabla \frac{\partial \varphi}{\partial p}$ 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

$$D = \begin{cases} \text{postiv, falls Kaltluftadvektion mit der Tiefe zunimmt,} \\ \text{negativ, falls Warmluftadvektion mit der Tiefe zunimmt.} \end{cases} \tag{7.9}$$

Warmluftadvektion in der Höhe und Kaltluftadvektion in der Tiefe führt also zu Zyklogenese, während Kaltluftadvektion in der Höhe und Warmluftadvektion in der Tiefe zu Antizyklogenese 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 Tropische Dynamik

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, tubulent 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. Definiere einen Mittelungsoperator durch

$$\bar{f} := \frac{1}{\mu(\Omega)} \int_\Omega f d\omega, \tag{9.1}$$

wobei Ω eine beliebeige räumliche und/oder zeitliche Menge sein soll, $\mu(\Omega)$ deren Maß, f eine beliebige Funktion von Ort und Zeit und $d\omega$ ein geeignetes Differntial. Nun kann man f in der Form

$$f \equiv \bar{f} + f' \tag{9.2}$$

zerlegen; hierzu definiert man die Fluktuation oder Turbulenz durch

$$f' := f - \bar{f}. \tag{9.3}$$

Wenn die Aussagen

$$\overline{\frac{\partial f}{\partial x_i}} = \frac{\partial \bar{f}}{\partial x_i}, \tag{9.4}$$

$$\overline{\frac{\partial f}{\partial t}} = \frac{\partial \bar{f}}{\partial t}, \tag{9.5}$$

$$\overline{f'\bar{g}} = 0 \tag{9.6}$$

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

$$\overline{f'} = 0, \tag{9.7}$$

$$\bar{\bar{f}} = \bar{f} \tag{9.8}$$

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. Von nun an wird jedoch nicht mehr Glg. (9.1) verwendet, anstattdessen wird das *Hesselberg-Mittel*

$$\langle f \rangle := \frac{1}{\int_\Omega \rho d\omega} \int_\Omega \rho f d\omega \tag{9.9}$$

genutzt, wobei ρ die Dichte ist. Für die Fluktuation schreibt man nun

$$f'' := f - \langle f \rangle . \tag{9.10}$$

Man nimmt nun an, dass das Hesselberg-Mittel ein Reynolds-Operator ist. Wendet man dies auf das trockenadiabatische Gleichungssystem an, folgt

$$\frac{\partial \bar{\boldsymbol{v}}}{\partial t} = -(\bar{\boldsymbol{v}} \cdot \nabla)\bar{\boldsymbol{v}} - \overline{(\boldsymbol{v}'' \cdot \nabla)\boldsymbol{v}''} - \bar{a}\frac{\partial \bar{p}}{\partial x} - \overline{a''\frac{\partial p'}{\partial x}} - \boldsymbol{f} \times \bar{\boldsymbol{v}} + \boldsymbol{g}, \tag{9.11}$$

$$\frac{\partial \bar{\theta}}{\partial t} = -\bar{\boldsymbol{v}} \cdot \nabla\bar{\theta} - \overline{\boldsymbol{v}'' \cdot \nabla\theta}, \tag{9.12}$$

$$\frac{\partial \bar{\rho}}{\partial t} = -\bar{\rho}\nabla \cdot \bar{\boldsymbol{v}} - \bar{\boldsymbol{v}} \cdot \nabla\bar{\rho} - \overline{\rho'\nabla \cdot \boldsymbol{v}''} - \overline{\boldsymbol{v}'' \cdot \nabla\rho''}, \tag{9.13}$$

$$\bar{p}\bar{a} = R_d\bar{T} - \overline{p'a''}. \tag{9.14}$$

Die prognostischen Gleichungen der gemittelten Felder sind also gegenüber denen der ungemittelten Felder um Terme der Form $\overline{f'g'}$ 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

$$\frac{\partial\left(\varrho\boldsymbol{v}\right)}{\partial t}+\nabla p+\nabla\cdot\Pi+\nabla\cdot\tilde{\Pi}-\varrho\boldsymbol{g}=0, \tag{9.15}$$

wobei die Horizontalstriche der Übersichtlichkeit halber weggelassen wurden. Außerdem ist der *Turbulenzkorrelationstensor* $\tilde{\Pi}$ durch

$$\tilde{\Pi}:=\varrho\begin{pmatrix}\overline{u'u'} & \overline{u'v'} & \overline{u'w'}\\ \overline{v'u'} & \overline{v'v'} & \overline{v'w'}\\ \overline{w'u'} & \overline{w'v'} & \overline{w'w'}\end{pmatrix}=:\begin{pmatrix}-\tau_{x,x} & -\tau_{x,y} & -\tau_{x,z}\\ -\tau_{y,x} & -\tau_{y,y} & -\tau_{y,z}\\ -\tau_{z,x} & -\tau_{z,y} & -\tau_{z,z}\end{pmatrix} \tag{9.16}$$

definiert. Es wurde von der gerechtfertigten Annahme

$$\left|\frac{\varrho'}{\overline{\varrho}}\right|\ll\left|\frac{u'}{\overline{u}}\right| \tag{9.17}$$

ausgegangen. $-\nabla\cdot\tilde{\Pi}$ liefert die *Eddy-Stress-Terme*, die sich in der Impulsgleichung niederschlagen und anstatt der $-\overline{\left(\boldsymbol{v}'\cdot\nabla\right)\boldsymbol{v}'}-\overline{a'\frac{\partial p'}{\partial x}}$ 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

$$\frac{D\boldsymbol{v}}{Dt}=0 \tag{9.18}$$

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 $\boldsymbol{v}_h$ bei, gilt nach Glg. (9.18)

$$\boldsymbol{v}_h'\left(z+l\right)=\boldsymbol{v}_h\left(z+l\right)-\overline{\boldsymbol{v}_h}\left(z+l\right)=\overline{\boldsymbol{v}_h}\left(z\right)-\overline{\boldsymbol{v}_h}\left(z+l\right)=\overline{\boldsymbol{v}_h}\left(z+l\right)-l\frac{\partial\overline{\boldsymbol{v}_h}}{\partial z}-\overline{\boldsymbol{v}_h}\left(z+l\right)=-l\frac{\partial\overline{\boldsymbol{v}_h}}{\partial z} \tag{9.19}$$

Man beachte hierbei auch das Vorzeichen von l, welches im Fall nach unten gerichteter Bewegung als negativ verstanden werden muss. Somit folgt beispielsweise

$$\tau_{x,z}=-\varrho\overline{u'w'}=\varrho\overline{w'}l\frac{\partial\overline{u}}{\partial z}. \tag{9.20}$$

Im Falle einer indifferent geschichteten Atmosphäre gilt $|w'|\sim|\boldsymbol{v}_h'|$, was der Tatsache entspricht, dass in diesem Fall die horizontale Skala der Wirbel genauso groß ist wie die vertikale, man setzt daher

$$w'=l\left|\frac{\partial\overline{\boldsymbol{v}_h}}{\partial z}\right|. \tag{9.21}$$

Daraus folgt

$$\tau_{x,z}=-\varrho\overline{u'w'}=\varrho\overline{l^2}\left|\frac{\partial\overline{\boldsymbol{v}_h}}{\partial z}\right|\frac{\partial\overline{u}}{\partial z}\equiv A_z\frac{\partial\overline{u}}{\partial z}. \tag{9.22}$$

Den Koeffizienten

$$A_z:=\varrho\overline{l^2}\left|\frac{\partial\overline{\boldsymbol{v}_h}}{\partial z}\right| \tag{9.23}$$

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

$$-fv = -\frac{1}{\varrho}\frac{\partial p}{\partial x} + \frac{1}{\varrho}\frac{\partial \tau_{x,z}}{\partial z}, \tag{9.24}$$

$$fu = -\frac{1}{\varrho}\frac{\partial p}{\partial y} + \frac{1}{\varrho}\frac{\partial \tau_{y,z}}{\partial z}. \tag{9.25}$$

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

$$-fv = -\frac{1}{\varrho}\frac{\partial p}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial z}\left(\frac{\tau_{x,z}}{\varrho}\right), \tag{9.26}$$

$$fu = -\frac{1}{\varrho}\frac{\partial p}{\partial y} + \frac{\partial}{\partial z}\left(\frac{\tau_{y,z}}{\varrho}\right). \tag{9.27}$$

Man nimmt nun an, dass die Bewegung nur eine x-Komponente hat und definiert die sogenannte *Reibungsgeschwindigkeit* $u_\star > 0$ durch

$$u_\star^2 := \frac{\tau_{x,z}}{\varrho} = \frac{A_z}{\varrho}\frac{\partial \overline{u}}{\partial z} \tag{9.28}$$

Bisher wurde angenommen, dass die Mischungsweglänge l höhenunabhängig ist. Sehr nahe an der Erdoberfläche ist jedoch zu erwarten, dass die vertikale Ausdehung der Wirbel mit der Höhe zunimmt, was man im einfachsten Fal über

$$l(z) = kz \tag{9.29}$$

ausdrücken kann, wobei die Zahl $k > 0$ als *von Karman-Konstante* bezeichnet wird. Diese hat einen typischen Wert von $0,4$. Glg. (9.29) ist nur bis zu einer gewissen Höhe gültig. Somit folgt

$$u_\star^2 = k^2 z^2 \left|\frac{\partial \overline{u}}{\partial z}\right|^2, \tag{9.30}$$

also im Fall $\frac{\partial \overline{u}}{\partial z} > 0$

$$u_\star = kz\frac{\partial \overline{u}}{\partial z}. \tag{9.31}$$

Die Lösung für $\overline{u}(z)$ ist das logarithmische Windprofil

$$\overline{u}(z) = \frac{u_\star}{k}\ln\left(\frac{z}{z_0}\right) \tag{9.32}$$

Die Konstante $z_0 > 0$ ist die *Rauhigkeitslänge*, es gilt $\overline{u}(z_0) = 0$. Glg. (9.32) sollte überhaupt nur für $z > z_0$ angewandt werden.

Die Schicht, in der Ggl. (9.29) eine gute Approximation ist, bezeichnet man als *Prandtl-Schicht*. Sie hat typischerweise Ausdehungen 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 *Ekman-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

$$K := \frac{A_z}{\varrho}, \tag{9.33}$$

schreibt sich Glg. (9.22) als

$$\tau_{x,z} = K\rho \frac{\partial \overline{u}}{\partial z}. \tag{9.34}$$

Unter der Voraussetzung $\frac{\partial}{\partial z}\left(K\rho\right) = 0$, was nur oberhalb der Prandtl-Schicht eine brauchbare Annahme ist, gilt

$$\frac{1}{\rho}\frac{\partial \tau_{x,z}}{\partial z} = K\frac{\partial^2 \overline{u}}{\partial z^2}. \tag{9.35}$$

Die Glg.en (9.24) - (9.25) werden dann zu

$$0 = f\widetilde{v} + K\frac{\partial^2 \overline{u}}{\partial z^2}, \tag{9.36}$$

$$0 = -f\widetilde{u} + K\frac{\partial^2 \overline{v}}{\partial z^2}. \tag{9.37}$$

Es wurde die Definition

$$\widetilde{u} := \overline{u} - u_g, \tag{9.38}$$

$$\widetilde{v} := \overline{u} - v_g \tag{9.39}$$

mit $\boldsymbol{v}_{h,g} = \left(u_g, v_g\right)^T$ als geostrophischem Wind eingesetzt. Vernachlässigt man den thermischen Wind, folgt

$$0 = f\widetilde{v} + K\frac{\partial^2 \widetilde{u}}{\partial z^2}, \tag{9.40}$$

$$0 = -f\widetilde{u} + K\frac{\partial^2 \widetilde{v}}{\partial z^2} \tag{9.41}$$

$$\Rightarrow \frac{if}{K}\left(\widetilde{u} + i\widetilde{v}\right) = \frac{\partial^2\left(\widetilde{u} + i\widetilde{v}\right)}{\partial z^2}. \tag{9.42}$$

Dies wird gelöst durch

$$\widetilde{u} + i\widetilde{v} = C\exp\left(\sqrt{\frac{if}{K}}z\right) + C_2\exp\left(-\sqrt{\frac{if}{K}}z\right) \tag{9.43}$$

mit $C, C_2 \in \mathbb{C}$. Im Falle der unteren Grenze der Atmosphäre gelten in der Nordhemisphäre die Randbedingungen

$$\lim_{z\to\infty} \widetilde{u} + i\widetilde{v} = 0 \Rightarrow C = 0, \tag{9.44}$$

$$\left(\widetilde{u} + i\widetilde{v}\right)(z = 0) = -u_g - iv_g \Rightarrow C_2 = -u_g - iv_g, \tag{9.45}$$

und auf der Südhalbkugel

$$\lim_{z\to\infty} \widetilde{u} + i\widetilde{v} = 0 \Rightarrow C_2 = 0, \tag{9.46}$$

$$\left(\widetilde{u} + i\widetilde{v}\right)(z = 0) = -u_g - iv_g \Rightarrow C = -u_g - iv_g, \tag{9.47}$$

also lautet die Lösung nördlich des Äquators

$$\widetilde{u} + i\widetilde{v} = -\left(u_g + iv_g\right)\exp\left(-\sqrt{\frac{if}{K}}z\right) = -\left(u_g + iv_g\right)\exp\left(-\sqrt{\frac{f}{2K}}z\right)\exp\left(-i\sqrt{\frac{f}{2K}}z\right) \tag{9.48}$$

und südlich davon

$$\widetilde{u} + i\widetilde{v} = -\left(u_g + iv_g\right)\exp\left(-\sqrt{\frac{|f|}{iK}}z\right) = -\left(u_g + iv_g\right)\exp\left(-\sqrt{\frac{|f|}{2K}}z\right)\exp\left(i\sqrt{\frac{|f|}{2K}}z\right). \tag{9.49}$$

Abbildung 9.1: Die Ekman-Spirale, es ist $v_g = 0$.

Dies kann man verallgemeinern zu

$$\overline{u} = u_g - \left[\operatorname{sign}(f)\, v_g \sin\left(\sqrt{\frac{|f|}{2K}}z\right) + u_g \cos\left(\sqrt{\frac{|f|}{2K}}z\right)\right] \exp\left(-\sqrt{\frac{|f|}{2K}}z\right), \tag{9.50}$$

$$\overline{v} = v_g + \left[\operatorname{sign}(f)\, u_g \sin\left(\sqrt{\frac{|f|}{2K}}z\right) - v_g \cos\left(\sqrt{\frac{|f|}{2K}}z\right)\right] \exp\left(-\sqrt{\frac{|f|}{2K}}z\right). \tag{9.51}$$

Man kann o. B. d. A. $u_g > 0, v_g = 0$ annehmen, dann gilt

$$\overline{u} = u_g - u_g \cos\left(\sqrt{\frac{|f|}{2K}}z\right) \exp\left(-\sqrt{\frac{|f|}{2K}}z\right), \tag{9.52}$$

$$\overline{v} = \operatorname{sign}(f)\, u_g \sin\left(\sqrt{\frac{|f|}{2K}}z\right) \exp\left(-\sqrt{\frac{|f|}{2K}}z\right). \tag{9.53}$$

$\operatorname{sign}(f)\,\varrho\overline{v}$ ist die Massenflussdichte ins Tief hinein, daher rechnet man mit zweifacher partieller Integration

$$\begin{aligned}
\int_0^\infty \sin(az)\exp(-\beta z)\,dz &= \frac{a}{\beta}\int_0^\infty \cos(az)\exp(-\beta z)\,dz = \frac{a}{\beta^2} - \frac{a^2}{\beta^2}\int_0^\infty \sin(az)\exp(-\beta z)\,dz \\
\Rightarrow \int_0^\infty \sin(az)\exp(-\beta z)\,dz &= \frac{\frac{a}{\beta^2}}{1+\frac{a^2}{\beta^2}} = \frac{a}{\beta^2+a^2}.
\end{aligned} \tag{9.54}$$

In einer isothermen Atmosphäre gilt

$$a = \sqrt{\frac{|f|}{2K}}, \tag{9.55}$$

$$\beta = -\sqrt{\frac{|f|}{2K}} - \frac{1}{H} \tag{9.56}$$

$$\Rightarrow a^2 + \beta^2 = \frac{|f|}{K} + \frac{1}{H^2} + \sqrt{\frac{2\,|f|}{KH^2}} \tag{9.57}$$

$$\Rightarrow \frac{a}{\beta^2+a^2} = \frac{1}{\sqrt{\frac{2|f|}{K}} + \sqrt{\frac{2K}{|f|H^4}} + \frac{2}{H}} = \frac{H}{2 + H\sqrt{\frac{2|f|}{K}} + \sqrt{\frac{2K}{fH^2}}}. \tag{9.58}$$

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

$$D = \sqrt{\frac{2K}{|f|}}\pi \tag{9.59}$$

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

$$K \approx \frac{|f|\, D^2}{2\pi^2} \approx 5 \text{ m}^2/\text{s}. \tag{9.60}$$

Dies ist über fünf Größenordnungen über dem Wert der kinematischen Viskosität von $1,5 \cdot 10^{-5}$ m²/s. Mit Glg. (9.23) folgt für die Mischungsweglänge

$$l = \sqrt{\frac{K}{\left|\frac{\partial \overline{v_h}}{\partial z}\right|}} \sim \sqrt{\frac{KD}{u_g}} \sim 2 \cdot 10^1 \text{ m}. \tag{9.61}$$

Dies entspricht der Erwartung, dass $l \ll D$ sein muss, damit das Mischungswegkonzept in der planetaren Grenzschicht sinnvoll ist. Es ergibt sich mit Glg. (9.29) eine Höhe D_P der Prandtl-Schicht von ca.

$$D_P = \frac{l}{k} = 50 \text{ m} \tag{9.62}$$

mit $k = 0,4$. Man definiert die *Ekman-Zahl* Ek als das Verhältnis von Reibungs- zu Coriolistermen, also

$$\text{Ek} := \frac{KU}{H^2 f U} = \frac{K}{fH^2}, \tag{9.63}$$

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 Ek ~ 5 %.

Die Ekman-Spirale führt bei einer Zyklone mit Radius R zu einer Drucktendenz $\frac{\partial p}{\partial t}$ in der Größenordnung

$$\frac{\partial p}{\partial t} \sim \frac{2g}{R} \frac{u_g \varrho_0 a}{\beta^2 + a^2}. \tag{9.64}$$

Man erhält mit $u_g \sim 10$ m/s, $\varrho_0 \approx 1,2$ kg/m³ und $R \sim 500$ km

$$\frac{\partial p}{\partial t} \sim 2,6 \ \frac{\text{hPa}}{\text{hr}}. \tag{9.65}$$

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

$$\bar{f}(x_i) := \frac{\int_\Omega f(x_i)\, h(x_i)\, dx_1 \ldots dx_n}{\int_\Omega h(x_i)\, dx_1 \ldots dx_n}, \tag{9.66}$$

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. (9.66) mit $\Omega = \left(t - \frac{T}{2}, t + \frac{T}{2}\right)$ und $g = 1$, also

$$\bar{f}(\boldsymbol{r}, t) = \frac{1}{T} \int_{t-\frac{T}{2}}^{t+\frac{T}{2}} f(\boldsymbol{r}, t')\, dt'. \tag{9.67}$$

Man überpruft nun, ob dieser Operator die Eigenschaften eines Reynolds-Operators Glg.en (9.4) - (9.6) erfüllt. Zunächst gilt

$$\frac{\partial \bar{f}}{\partial x_i} = \frac{1}{T}\int_{t-\frac{T}{2}}^{t+\frac{T}{2}} \frac{\partial f}{\partial x_i}(\boldsymbol{r}, t')\, dt' = \overline{\frac{\partial f}{\partial x_i}}, \tag{9.68}$$

Glg. (9.4) ist also erfüllt. Die Überprüfung der Erfüllung von Glg. (9.5) erfolgt mittels des Haupsatz der Differenzial- und Integralrechnung:

$$\frac{\partial \bar{f}}{\partial t} = \frac{f\left(\boldsymbol{r}, t+\frac{T}{2}\right) - f\left(\boldsymbol{r}, t-\frac{T}{2}\right)}{T} = \frac{1}{T}\int_{t-\frac{T}{2}}^{t+\frac{T}{2}} \frac{\partial f}{\partial t'}(\boldsymbol{r}, t')\, dt' = \overline{\frac{\partial f}{\partial t}} \tag{9.69}$$

Die ersten beiden Eigenschaften sind also erfüllt. Für die dritte rechnet man mit $g = 1$

$$\overline{f'} = \frac{1}{T}\int_{t-\frac{T}{2}}^{t+\frac{T}{2}} f(\boldsymbol{r}, t') - \bar{f}(\boldsymbol{r}, t')\, dt' \overset{!}{=} 0. \tag{9.70}$$

Dies soll für beliebige Zeitpunkte gelten, also folgt hieraus bereits

$$\bar{f} = f \tag{9.71}$$

zu allen Zeitpunkten als Kriterium für die Gültigkeit von Glg. (9.6) 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 *Parmetrisierungen*. In einer anderen Konvention bezeichnet man all das als Parametrisierung, oder auch „Physik“ (in Abgrenzung zur „Dynamik“), was über das trockenadiabatische Gleichungssystem hinausgeht. Von dieser Konvention wird hier kein Gebrauch gemacht.

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 $\varkappa_\psi$, der somit von Ort und Zeit abhängt. Man notiert

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = \cdots + \nabla \cdot \left(\varkappa_\psi \nabla \psi\right). \tag{9.72}$$

$\varkappa_\psi$ ist zunächst einmal molekularen Ursprungs. Die in nichtlinearen Systemen bei Mittelung entstehenden Kovarianzterme skalarer Größen parametrisiert man sinnvollerweise so, dass man ansetzt

$$\varkappa_{\psi,\Delta} = \varkappa_\psi + \varkappa_{\psi,S}, \tag{9.73}$$

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 $\varkappa_{\psi,\Delta}$ gegen $\varkappa_\psi$. Bei niedriger Ausflösung gilt in guter Näherung $\varkappa_{\psi,\Delta} = \varkappa_{\psi,S}$. Da der vertikale Gitterpunktabstand üblicherweise deutlich kleiner ist als der horizontale, kann man $\varkappa_{\psi,S}$ richtungsabhängig ansetzen, also

$$\varkappa_{\psi,\Delta}\nabla\psi \to \varkappa_{\psi,\Delta,H}\nabla_h\psi + \varkappa_{\psi,\Delta,z}\frac{\partial \psi}{\partial z}\boldsymbol{k}. \tag{9.74}$$

Dabei ist der horizontale Diffusionskoeffizient größer als der vertikale.

9.3.2 Beispiel: Phasenübergangsraten

9.4 Turbulenzspektren

Für die Fourier-Transformation $\tilde{\boldsymbol{v}}(\boldsymbol{k})$ des eines Geschwindigkeitsfeldes $\boldsymbol{v} = \boldsymbol{v}(\boldsymbol{r})$ gilt

$$\tilde{\boldsymbol{v}}(\boldsymbol{k}) = C^3 \int_{\mathbb{R}^3} \boldsymbol{v}(\boldsymbol{r}) \exp(-i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r})\, d^3r. \tag{9.75}$$

Die inverse Fourier-Transformation lautet

$$\boldsymbol{v}(\boldsymbol{r}) = \widetilde{C}^3 \int_{\mathbb{R}^3} \tilde{\boldsymbol{v}}(\boldsymbol{k}) \exp(i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r})\, d^3k. \tag{9.76}$$

Man setzt an dieser Stelle $\widetilde{C} = 1$ an, um die Notation abzukürzen und vernachlässigt das $\mathbb{R}^3$ am Integral. Die inkompressible Impulsgleichung lautet

$$\frac{\partial \boldsymbol{v}}{\partial t} = -\nabla\pi - \nabla\varphi - \frac{1}{2}\nabla\boldsymbol{v}^2 + \boldsymbol{v}\times(\nabla\times\boldsymbol{v}) + r\Delta\boldsymbol{v}, \tag{9.77}$$

wobei die Abkürzung

$$\pi := \frac{p}{\varrho} \tag{9.78}$$

eingesetzt wurde. Die Fourier-Transformationen der andeen auftretenden Felder lauten

$$\pi = \int \tilde{\pi} \exp(i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r})\, d^3k, \tag{9.79}$$

$$\varphi = \int \tilde{\varphi} \exp(i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r})\, d^3k. \tag{9.80}$$

Weiterhin gilt für die Anwendung der Differentialoperatoren auf die Felder

$$\frac{\partial \boldsymbol{v}}{\partial t} = \int \frac{\partial \tilde{\boldsymbol{v}}(\boldsymbol{k})}{\partial t} \exp(i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r})\, d^3k, \tag{9.81}$$

$$-\nabla\pi = -i\int \boldsymbol{k}\tilde{\pi} \exp(i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r})\, d^3k, \tag{9.82}$$

$$-\nabla\varphi = -i\int \boldsymbol{k}\tilde{\varphi} \exp(i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r})\, d^3k, \tag{9.83}$$

$$\Delta\boldsymbol{v} = -\int \boldsymbol{k}^2 \tilde{\boldsymbol{v}}(\boldsymbol{k}) \exp(i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r})\, d^3k. \tag{9.84}$$

Für die kinetische Energie gilt

$$\begin{aligned} \frac{1}{2}\boldsymbol{v}^2 &= \frac{1}{2}\int \tilde{\boldsymbol{v}}(\boldsymbol{k}) \exp(i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r})\, d^3k \int \tilde{\boldsymbol{v}}(\boldsymbol{k}') \exp(i\boldsymbol{k}'\cdot\boldsymbol{r})\, d^3k' \\ &= \frac{1}{2}\int\int \tilde{\boldsymbol{v}}(\boldsymbol{k})\, \tilde{\boldsymbol{v}}(\boldsymbol{k}') \exp[i(\boldsymbol{k}+\boldsymbol{k}')\cdot\boldsymbol{r}]\, d^3k' d^3k. \end{aligned} \tag{9.85}$$

Für den Gradienten dieser Größe erhält man

$$-\frac{1}{2}\nabla\boldsymbol{v}^2 = -\frac{i}{2}\int\int \tilde{\boldsymbol{v}}(\boldsymbol{k})\, \tilde{\boldsymbol{v}}(\boldsymbol{k}')\, (\boldsymbol{k}+\boldsymbol{k}') \exp[i(\boldsymbol{k}+\boldsymbol{k}')\cdot\boldsymbol{r}]\, d^3k' d^3k. \tag{9.86}$$

9.4.1 Das $k^{-5/3}$–Spektrum

9.4.2 Das k^{-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 Adhäsionsbedinung $\lim_{\boldsymbol{r}\to\partial V}\boldsymbol{v}=0$, 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 (9.24) - (9.25) an:

$$f\boldsymbol{k}\times\boldsymbol{v}_h=-\nabla\varphi+\frac{1}{\varrho_0}\frac{\partial\boldsymbol{\tau}}{\partial z} \tag{11.1}$$

Man geht nun davon aus, dass die vertikalen Dichtegradienten so klein sind, dass man den Term $\frac{1}{\varrho_0}$ in die partielle Ableitung hereinziehen kann, also

$$f\boldsymbol{k}\times\boldsymbol{v}_h=-\nabla\varphi+\frac{\partial}{\partial z}\left(\frac{\boldsymbol{\tau}}{\varrho_0}\right). \tag{11.2}$$

Hieraus wendet man nun die Rotation an, also

$$\nabla\times f\boldsymbol{k}\times\boldsymbol{v}_h=\nabla\times\frac{\partial}{\partial z}\left(\frac{\boldsymbol{\tau}}{\varrho_0}\right). \tag{11.3}$$

Mit Glg. (B.57) folgt

$$\nabla\times f\boldsymbol{k}\times\boldsymbol{v}_h \quad=\quad (\boldsymbol{v}_h\cdot\nabla)f\boldsymbol{k}-\boldsymbol{v}_h(\nabla\cdot f\boldsymbol{k})+f\boldsymbol{k}\nabla\cdot\boldsymbol{v}_h-(f\boldsymbol{k}\cdot\nabla)\boldsymbol{v}_h \tag{11.4}$$

Projektion auf die vertikale Richtung ergibt

$$\begin{aligned}\boldsymbol{k}\cdot\nabla\times f\boldsymbol{k}\times\boldsymbol{v}_h &= \boldsymbol{k}\cdot(\boldsymbol{v}_h\cdot\nabla)f\boldsymbol{k}+f\nabla\cdot\boldsymbol{v}_h\\ \Rightarrow\boldsymbol{k}\cdot\nabla\times f\boldsymbol{k}\times\boldsymbol{v}_h &= v\beta-f\frac{\partial w}{\partial z}.\end{aligned} \tag{11.5}$$

Integration über das Höhenintervall $[z_B,z_T]$ ergibt somit

$$\beta\int_{z_B}^{z_T}v\,dz-f(w_T-w_B)=\boldsymbol{k}\cdot\frac{1}{\varrho_0}\nabla\times(\boldsymbol{\tau}_T-\boldsymbol{\tau}_B). \tag{11.6}$$

Mit den Definitionen

$$D \quad:=\quad z_T-z_B, \tag{11.7}$$

$$\overline{v} \quad:=\quad \frac{1}{D}\int_{z_B}^{z_T}v\,dz \tag{11.8}$$

kann man dies kürzer als

$$\beta D\overline{v}-f(w_T-w_B)=\boldsymbol{k}\cdot\frac{1}{\varrho_0}\nabla\times(\boldsymbol{\tau}_T-\boldsymbol{\tau}_B) \tag{11.9}$$

notieren. Da es hier um die ganze Wassersäule geht, kann man die einfache Randbedingung

$$w_T=w_B=0 \tag{11.10}$$

anwenden. Damit erhält man

$$\beta D\overline{v}=\boldsymbol{k}\cdot\frac{1}{\varrho_0}\nabla\times(\boldsymbol{\tau}_T-\boldsymbol{\tau}_B) \tag{11.11}$$

Um den Reibungsterm am Grund zu parametrisieren, verwendet man das *Stommel-Modell*, welches lautet

$$\boldsymbol{\tau}_B = r\overline{\boldsymbol{v}_h} \tag{11.12}$$

mit einer Konstante $r > 0$. Mit $w = 0$ gilt auch $\nabla \cdot \boldsymbol{v}_h = 0$, weshalb man den gemittelten Wind durch eine Stromfunktion ψ ausdrücken kann:

$$\overline{u} = -\frac{\partial \psi}{\partial y} \tag{11.13}$$

$$\overline{v} = \frac{\partial \psi}{\partial x} \tag{11.14}$$

Somit kann man notieren

$$\begin{aligned}
\beta D \frac{\partial \psi}{\partial x} + \boldsymbol{k} \cdot \frac{1}{\rho_0} \nabla \times \boldsymbol{\tau}_B &= \boldsymbol{k} \cdot \frac{1}{\rho_0} \nabla \times \boldsymbol{\tau}_T \\
\Leftrightarrow \beta D \frac{\partial \psi}{\partial x} + \frac{r}{\rho_0} \Delta \psi &= \boldsymbol{k} \cdot \frac{1}{\rho_0} \nabla \times \boldsymbol{\tau}_T \\
\Leftrightarrow \frac{\partial \psi}{\partial x} + \frac{r}{\rho_0 \beta D} \Delta \psi &= \frac{1}{\rho_0 \beta D} \boldsymbol{k} \cdot \nabla \times \boldsymbol{\tau}_T
\end{aligned}$$

$$\boxed{\Leftrightarrow \frac{\partial \psi}{\partial x} + \varepsilon \Delta \psi = \frac{\varepsilon}{r} \boldsymbol{k} \cdot \nabla \times \boldsymbol{\tau}_T} \tag{11.15}$$

mit

$$\varepsilon := \frac{r}{\rho_0 \beta D}. \tag{11.16}$$

Glg. (11.15) ist die Bewegungsgleichung des Stommel-Modells. Es gilt

$$\frac{\frac{\partial \psi}{\partial x}}{\varepsilon \Delta \psi} \sim \frac{L \rho_0 \beta D}{r} \tag{11.17}$$

mit L als horizontaler Längenskala. Für r skaliert man

$$fV \sim \frac{Vr}{D\rho_0} \Rightarrow r \sim D\rho_0 f. \tag{11.18}$$

Somit folgt

$$\frac{\frac{\partial \psi}{\partial x}}{\varepsilon \Delta \psi} \sim \frac{L\beta}{f} \sim \frac{L}{a} \tag{11.19}$$

In grober Näherung kann man für sehr große Skalen also konzeptionell von

$$\boxed{\frac{\partial \psi}{\partial x} = \frac{\varepsilon}{r} \boldsymbol{k} \cdot \nabla \times \boldsymbol{\tau}_T} \tag{11.20}$$

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 $[0, L] \times [0, L]$ mit $L > 0$ gelöst, also für ein quadratisches Becken. Dies

ist analytisch nur approximativ möglich. Hierzu geht man von einem wind stress der Form

$$\tau_T^{(x)} = -\rho_0 U^2 \cos\left(\pi \frac{y}{L}\right), \tag{11.21}$$

$$\tau_T^{(y)} = 0 \tag{11.22}$$

aus. Hieraus folgt

$$\frac{\varepsilon}{r}\boldsymbol{k} \cdot \nabla \times \boldsymbol{\tau}_T = -\frac{\varepsilon\pi}{rL}\rho_0 U^2 \sin\left(\pi \frac{y}{L}\right) \tag{11.23}$$

Man macht den Ansatz

$$\psi = \psi_I + \varphi, \tag{11.24}$$

wobei ψ_I die Lösung im Inneren des Beckens approximieren und φ die Randeffekte hinzufügen soll. Im Inneren des Beckens sind die größeren Skalen relevant, daher setzt man für ψ_I die Sverdrup-Balance an:

$$\frac{\partial \psi_I}{\partial x} = \frac{\varepsilon}{r}\boldsymbol{k} \cdot \nabla \times \boldsymbol{\tau}_T = -\frac{\varepsilon\pi}{rL}\rho_0 U^2 \sin\left(\pi \frac{y}{L}\right) \tag{11.25}$$

an. Die wird gelöst durch

$$\psi_I = (C - x)\frac{\varepsilon\pi}{rL}\rho_0 U^2 \sin\left(\pi \frac{y}{L}\right). \tag{11.26}$$

mit einer Konstanten C. Der verbleibende Teil der Differentialgleichung soll durch φ gelöst werden:

$$\varepsilon \Delta \varphi = 0 \tag{11.27}$$

Dies wird gelöst durch

$$\varphi = -B\frac{\varepsilon\pi}{rL}\rho_0 U^2 \sin\left(\pi \frac{y}{L}\right) \exp\left(\pm\pi \frac{x}{L}\right) \tag{11.28}$$

mit einer Konstanten B. Die Gesamtlösung lautet somit

$$\psi = \psi_I + \varphi = \left(C - x - B\exp\left(\pm\pi \frac{x}{L}\right)\right)\frac{\varepsilon\pi}{rL}\rho_0 U^2 \sin\left(\pi \frac{y}{L}\right). \tag{11.29}$$

Daraus folgt für die vertikal gemittelten Geschwindigkeiten

$$\overline{u} = -\frac{\partial \psi}{\partial y} = -\frac{\pi}{L}\left(C - x - B\exp\left(\pm\pi \frac{x}{L}\right)\right)\frac{\varepsilon\pi}{rL}\rho_0 U^2 \cos\left(\pi \frac{y}{L}\right), \tag{11.30}$$

$$\overline{v} = \frac{\partial \psi}{\partial x} = \left(-1 \mp B\frac{\pi}{L}\exp\left(\pm\pi \frac{x}{L}\right)\right)\frac{\varepsilon\pi}{rL}\rho_0 U^2 \sin\left(\pi \frac{y}{L}\right). \tag{11.31}$$

B und C werden aus den Randbediungungen abgeleitet. Diese lauten

$$\overline{u}(x = 0, L) = 0, \tag{11.32}$$

$$\overline{v}(y = 0, L) = 0. \tag{11.33}$$

Die Randbedingungen für $\overline{v}$ sind automatisch erfüllt. Aus denen für $\overline{u}$ folgt

$$C = B, \tag{11.34}$$

$$B - L - B\exp\left(-\pi \frac{L}{L}\right) = 0 \Rightarrow B = \frac{L}{1 - \exp(-\pi)}, \tag{11.35}$$

wobei sich willkürlich auf das negative Vorzeichen in der Exponentialfunktion festgelegt wurde. Damit folgt

Abbildung 11.1: Visualisierung der Glg.en (11.30) - (11.31).

$$\boxed{\psi = \left(\frac{L}{1-\exp(-\pi)} - x - \frac{L}{1-\exp(-\pi)}\exp\left(-\pi\frac{x}{L}\right)\right)\frac{\varepsilon\pi}{rL}\rho_0 U^2 \sin\left(\pi\frac{y}{L}\right). \qquad (11.36)}$$

11.3 Thermohaline Zirkulation

11.4 Windsee

Teil III

Strahlung und Wolkenmikrophysik

12 Strahlungstransport

Die zentrale Größe beim Strahlungstransport ist die spektrale Strahldichte $L_\varkappa(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{n}, t)$, hierbei ist $\varkappa$ die Wellenzahl und $\boldsymbol{n}$ ein Richtungsvektor. Aus ihr können u. a. Wärmeleistungsdichten abgeleitet werden.

12.1 Berechnung der Streu- und Absorptionskoeffizienten

12.2 Approximationen

Die spektrale Strahldichte hängt außer von der Zeit von sechs reellen Zahlen ab. Übliche Felder hängen von drei Koordinaten ab. Ein erstes Problem ist dementsprechend die Menge an Speicherplatz, die notwendig ist, um selbst einen sehr grob diskretisierten Strahlungszustand einer Atmosphäre abzuspeichern. Viel problematischer noch ist hingegen die Lösung der Strahlungsübertragungsgleichug. Daher sind rigorose Approximationen notwendig.

12.2.1 Plan-parallele Atmosphäre

Bei dieser Approximation geht man davon aus, dass die Atmosphäre innerhalb eines gewissen Gebietes horizontal homogen ist, die Eigenschaften also nur vertikal variieren. Dies ist durch die Tatsache motiviert, dass in der Atmosphäre auf großen Skalen horizontale Graienten mindestens zwei Größenordnungen kleiner sind als vertikale.

12.2.2 Horizontale Entkopplung

Bei dieser Approximation teilt man die Atmosphäre in unabhängige Säulen auf und schränkt dadurch die horizontale Wechselwirkung stark ein. Eine solche Säule kann jedoch aus verschiedenen Teilsäulen bestehen oder horizontale Wechselwirkungen können auf andere Weise innerhalb der Säulen parametrisiert werden. Bei steigender Rechenkapazität kann man die Bereiche mit horizontaler Wechselwirkung vergrößern, bis man im Grenzfäll die ganze Atmosphäre als eine einzige Säule ansieht.

12.3 Atmosphärische Optik

13 Wolkenmikrophysik

13.1 Köhler-Formel

13.2 Zirkulation um Kondensate

13.2.1 Stokes'sche Reibung

13.3 Zirkulation in Kondensaten

Teil IV

Numerik

14 Grundkonzepte der Numerik

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

$$D \to D', \tag{14.1}$$

analog für atmosphärische Zustände

$$Z \to Z'. \tag{14.2}$$

Anschließend legt man eine Dynamik fest, also ein Verfahren

$$Z'(t) \xrightarrow{D'} Z'(t + \Delta t) \tag{14.3}$$

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

$$|Z - Z'| \geq 0. \tag{14.4}$$

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 Rechnergenauigkeit.
7. Der Rechner macht Fehler.

14.1 Grundbegriffe von 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 $\lim_{\Delta \to 0} F_d = F$ 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.

14.2 Finite Differenzen

Sei eine unendlich oft differenzierbare Funktion $f\colon \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ gegeben. Mittels einer Taylorreihe kann man schreiben

$$f(x + \Delta x) = f(x) + \Delta x f'(x) + \frac{f''(x)}{2!}\Delta x^2 + \frac{f'''(x)}{3!}\Delta x^3 + \ldots \tag{14.5}$$

und

$$f(x-\Delta x) = f(x) - \Delta x f'(x) + \frac{f''(x)}{2!}\Delta x^2 - \frac{f'''(x)}{3!}\Delta x^3 + \dots \tag{14.6}$$

Subtrahiert man beide Gleichungen, erhält man

$$f(x+\Delta x) - f(x-\Delta x) = 2\Delta x f'(x) + R', \tag{14.7}$$

wobei der Rest R' für die Terme dritter und höherer Ordnung steht. Dies ergibt umgestellt

$$f'(x) = \frac{f(x+\Delta x) - f(x-\Delta x)}{2\Delta x} + R, \tag{14.8}$$

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

$$f'(x) \approx \frac{f(x+\Delta x) - f(x)}{\Delta x} \tag{14.9}$$

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:

$$\begin{aligned} f(x+\Delta x) + f(x-\Delta x) &= 2f(x) + f''(x)\Delta x^2 + \mathcal{O}(\Delta x^4) \\ \Leftrightarrow f''(\Delta x) &= \frac{f(x+\Delta x) - 2f(x) + f(x-\Delta x)}{\Delta x^2} + \mathcal{O}(\Delta x^2) \end{aligned} \tag{14.10}$$

Hat man beispielsweise eine Funktion $f(x) = A\sin(kx)$ gegeben, so gilt $f' = Ak\cos(kx)$, Glg. (14.8) ergibt jedoch

$$f' \approx \frac{A}{2\Delta x}(\sin(kx + k\Delta x) - \sin(kx - k\Delta x)) = \frac{A}{\Delta x}\cos(kx)\sin(k\Delta x) = \frac{\sin(k\Delta x)}{k\Delta x}f'. \tag{14.11}$$

Hieran sieht man, dass die Approximation, wie erwartet, gegen den richtigen Wert der Ableitung konvergiert, falls Δx gegen Null geht (es gilt $\lim_{a\to 0}\frac{\sin(a)}{a} = 1$ 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.

14.3 Die ebene Spektralmethode

14.4 Die sphärische Spektralmethode

14.5 Spezifika 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

$$\frac{D\boldsymbol{v}}{Dt} = -\frac{1}{\varrho}\nabla p + r\Delta\boldsymbol{v} + \boldsymbol{f}(\boldsymbol{r}, t), \tag{14.12}$$

$$\nabla\cdot\boldsymbol{v} = 0 \tag{14.13}$$

mit gegebenen Kräften $\boldsymbol{f}(\boldsymbol{r}, t)$, 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:

$$\frac{D\boldsymbol{v}}{Dt} = -\frac{1}{\varrho}\nabla p + \boldsymbol{v}\times\boldsymbol{f} + \boldsymbol{g}, \tag{14.14}$$

$$p = TR_d\varrho, \tag{14.15}$$

$$\frac{D\theta}{Dt} = 0, \tag{14.16}$$

$$\frac{\partial\varrho}{\partial t} + \nabla\cdot(\varrho\boldsymbol{v}) = 0. \tag{14.17}$$

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 [21]. 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 zukunftsträchtige 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 Verbinungslinien diejenigen des ersten senkrecht schneiden, und die Schnittpunkte der Verbindungslinien 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.

15 Zeitschrittverfahren

In diesem Kapitel soll verständlich gemacht werden, wie sich die zeitliche Disktretisierung einer linearen Differenzialgleichung auf die Dispersionsrelation und die Stabilität einer Wellenlösung auswirken kann. Es wird die lineare Advektionsgleichung

$$\frac{\partial f}{\partial t} + U\frac{\partial f}{\partial x} = 0 \tag{15.1}$$

betrachtet mit $U \neq 0$ als homogener Advektionsgeschwindigkeit und f als irgendeiner Teilcheneigenschaft. Die analytische Lösung lautet in der komplexen Schreibweise

$$f = \exp\left(i\left(kx - \omega t\right)\right), \tag{15.2}$$

setzt man dies ein folgt $-i\omega + Uik = 0$, also als Dispersionsrelation

$$\omega = Uk. \tag{15.3}$$

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

$$f_l^{(m)} = e^{Cm\Delta t} e^{i(kl\Delta x - \omega m\Delta t)} \tag{15.4}$$

mit $f_l^{(0)} = e^{ikl\Delta x}$ als Anfangszustand. Es sollen C und die Dispersion $\omega(k)$ bestimmt werden.

15.1 Rein explizite Verfahren

15.1.1 Explizites Euler-Verfahren

Zunächst wird folgende Diskretisierung untersucht:

$$\frac{f_l^{(m+1)} - f_l^{(m)}}{\Delta t} + U\frac{f_{l+1}^{(m)} - f_{l-1}^{(m)}}{2\Delta x} = 0 \tag{15.5}$$

Dies bezeichnet man als *explizites Euler-Verfahren*. Einsetzen ergibt

$$\frac{e^{C\Delta t}e^{-i\omega\Delta t} - 1}{\Delta t} + U\frac{e^{ik\Delta x} - e^{-ik\Delta x}}{2\Delta x} = \frac{e^{C\Delta t}\cos(\omega\Delta t) - ie^{C\Delta t}\sin(\omega\Delta t) - 1}{\Delta t} + \frac{iU\sin(k\Delta x)}{\Delta x} = 0. \tag{15.6}$$

Der Realteil ist

$$e^{C\Delta t}\cos(\omega\Delta t) = 1, \tag{15.7}$$

hieraus folgt i. A. $C > 0$, es liegt Instabilität vor. Hierbei handelt es sich um *lineare Instabilität*, da Glg. (15.1) linear in f ist. Der Imaginärteil ist

$$e^{C\Delta t}\sin(\omega\Delta t) = \frac{U\Delta t\sin(k\Delta x)}{\Delta x}. \tag{15.8}$$

Hieraus folgt

$$\tan(\omega\Delta t) = \frac{U\Delta t\sin(k\Delta x)}{\Delta x}, \tag{15.9}$$

also die Dispersion

$$\omega(k) = \frac{1}{\Delta t}\arctan\left(\frac{U\Delta t\sin(k\Delta x)}{\Delta x}\right). \tag{15.10}$$

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 $\omega \approx \frac{1}{\Delta t}U\Delta tk = Uk$ 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

Abbildung 15.1: 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.

$\omega = \frac{1}{\Delta t}\arctan\left(\frac{U\Delta t \sin\pi}{\Delta x}\right) = 0$, die Welle ist also stationär. Abb. 15.1 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.

15.1.2 Leapfrog-Verfahren

Verwendet man einen zentralen zeitlichen Differenzenquotienten, schreibt also

$$\frac{f_l^{(m+2)} - f_l^{(m)}}{2\Delta t} + U\frac{f_{l+1}^{(m+1)} - f_{l-1}^{(m+1)}}{2\Delta x} = 0, \tag{15.11}$$

so ergibt dies eingesetzt

$$\begin{aligned} \frac{e^{2C\Delta t}e^{-2i\omega\Delta t} - 1}{2\Delta t} + U\frac{e^{ik\Delta x}e^{C\Delta t}e^{-i\omega\Delta t} - e^{-ik\Delta x}e^{C\Delta t}e^{-i\omega\Delta t}}{2\Delta x} &= 0 \\ \Leftrightarrow \frac{e^{C\Delta t}e^{-i\omega\Delta t} - e^{-C\Delta t}e^{i\omega\Delta t}}{2\Delta t} + U\frac{e^{ik\Delta x} - e^{-ik\Delta x}}{2\Delta x} &= 0. \end{aligned} \tag{15.12}$$

Der Realteil ergibt

$$e^{C\Delta t}\cos(\omega\Delta t) = e^{-C\Delta t}\cos(\omega\Delta t). \tag{15.13}$$

Das bedeutet $C = 0$, die Lösung ist also stabil. Der Imaginärteil wird zu

$$\frac{\sin(\omega\Delta t)}{2\Delta t}\left(e^{-C\Delta t} + e^{C\Delta t}\right) = \frac{\sin(\omega\Delta t)}{\Delta t} = U\frac{\sin(k\Delta x)}{\Delta x}. \tag{15.14}$$

Daraus folgt

$$\sin(\omega\Delta t) = U\frac{\Delta t}{\Delta x}\sin(k\Delta x) \Rightarrow \omega = \frac{1}{\Delta t}\arcsin\left[\frac{U\Delta t}{\Delta x}\sin(k\Delta x)\right], \tag{15.15}$$

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 geeignetste.

15.1.3 Runge-Kutta-Verfahren

15.2 Verfahren mit impliziten Anteilen

15.2.1 Implizites Euler-Verfahren

Verwendet man einen linksseitigen Differenzenquotienten für die Zeitableitung (dies bezeichnet man als *implizites Euler-Verfahren*), schreibt also

$$\frac{f_l^{(m+1)} - f_l^{(m)}}{\Delta t} + U\frac{f_{l+1}^{(m+1)} - f_{l-1}^{(m+1)}}{2\Delta x} = 0, \tag{15.16}$$

so ergibt dies eingesetzt

$$\begin{aligned} & \frac{e^{C\Delta t}e^{-i\omega\Delta t} - 1}{\Delta t} + U\frac{e^{ik\Delta x}e^{C\Delta t}e^{-i\omega\Delta t} - e^{-ik\Delta x}e^{C\Delta t}e^{-i\omega\Delta t}}{2\Delta x} = 0 \\ \Leftrightarrow \quad & \frac{1 - e^{-C\Delta t}e^{i\omega\Delta t}}{\Delta t} + U\frac{e^{ik\Delta x} - e^{-ik\Delta x}}{2\Delta x} = 0. \end{aligned} \tag{15.17}$$

Der Realteil ergibt

$$1 = e^{-C\Delta t}\cos(\omega\Delta t). \tag{15.18}$$

Das bedeutet $C < 0$, die Lösung ist also stabil, sie verschwindet jedoch irgendwann. Der Imaginärteil wird zu

$$\frac{e^{-C\Delta t}\sin(\omega\Delta t)}{\Delta t} = U\frac{\sin(k\Delta x)}{\Delta x}. \tag{15.19}$$

Daraus folgt

$$\tan(\omega\Delta t) = U\frac{\Delta t}{\Delta x}\sin(k\Delta x), \tag{15.20}$$

also die gleiche Dispersionsrelation wie beim expliziten Euler-Verfahren.

15.2.2 Crank-Nicolson-Verfahren

Man ist nicht darauf beschränkt, eine Differentialgleichung entweder nur explizit oder nur implizit zu lösen. Sei $\widetilde{f}$ das diskretisierte Analogon eines kontinuierlichen Feldes f und seien $\boldsymbol{r}_i$ die Gitterpunkte. Ein Zwei-Schritt-Verfahren für eine Differentialgleichung erster Ordnung in der Zeit für f lässt sich in der Form

$$\widetilde{f}(\boldsymbol{r}_i, (n+1)\Delta t) = \widetilde{f}(\boldsymbol{r}_i, n\Delta t) + \Delta t\sum_{j=1}^{N}\widetilde{F}_j\left[\widetilde{f}\big((n+m_j)\Delta t\big)\right] \tag{15.21}$$

notieren. Hierbei seien $\widetilde{F}_j$ für $j = 1, \ldots, N$ die auf $\widetilde{f}$ wirkenden diskretisierten Forcings. Dabei soll gelten

$$m_j = \begin{cases} 0, & \text{Term } j \text{ wird explizit behandelt,} \\ 1, & \text{Term } j \text{ wird implizit behandelt.} \end{cases} \tag{15.22}$$

Es wurde stillschweigend davon ausgegangen, dass f das einzige auftretende Feld ist. Verallgemeinernd kann man f als Tupel von Feldern ansehen, also als Zustandsvektor. Weiterhin kann man $0 \leq m_j \leq 1$ zulassen, hierbei ist m_j der implizite Anteil. Das Crank-Nicolson-Verfahren bedeutet $m_j = \frac{1}{2}$.

15.3 Mischung von Zeitschrittverfahren

15.4 Aspekte partieller Differentialgleichungen

15.4.1 Das Forward-backward-Verfahren

15.5 Energetische Konsistenz im idealen Gas

15.5.1 Advektion kinetischer Energie

Da $\boldsymbol{v}\cdot[(\nabla\times\boldsymbol{v})\times\boldsymbol{v}]=0$ gilt, ist der verallgemeinerte Coriolis-Term energetisch unerheblich. Für eine konsistente zeitliche Diskretisierung der Advektion von kinetischer Energie verwendet man daher das Gleichungssystem

$$\frac{\partial\boldsymbol{v}}{\partial t} = -\nabla\frac{\boldsymbol{v}^2}{2}, \tag{15.23}$$

$$\frac{\partial\varrho}{\partial t} = -\nabla\cdot\left(\varrho\boldsymbol{v}\right). \tag{15.24}$$

Im kontinuierlichen Fall gilt

$$\begin{aligned}\varrho\boldsymbol{v}\cdot\frac{\partial\boldsymbol{v}}{\partial t} &= -\varrho\boldsymbol{v}\cdot\nabla\frac{\boldsymbol{v}^2}{2} = -\nabla\cdot\left(\varrho\boldsymbol{v}\frac{\boldsymbol{v}^2}{2}\right)+\frac{\boldsymbol{v}^2}{2}\nabla\cdot\left(\varrho\boldsymbol{v}\right) = -\nabla\cdot\left(\varrho\boldsymbol{v}\frac{\boldsymbol{v}^2}{2}\right)-\frac{\boldsymbol{v}^2}{2}\frac{\partial\varrho}{\partial t}\\ \Rightarrow\varrho\boldsymbol{v}\cdot\frac{\partial\boldsymbol{v}}{\partial t}+\frac{\boldsymbol{v}^2}{2}\frac{\partial\varrho}{\partial t} &= \frac{\partial\left(\varrho\boldsymbol{v}^2/2\right)}{\partial t} = -\nabla\cdot\left(\varrho\boldsymbol{v}\frac{\boldsymbol{v}^2}{2}\right)\end{aligned} \tag{15.25}$$

für die Auswirkung der Flussdichte von kinetischer Energie auf die lokale kinetische Energiedichte. Diese Umformungsschritte müssen sich auf die Diskretisierung übertragen lassen. Man definiert nun $\delta_0,\delta_1,\delta_2,\delta_3,\delta_4,\delta_5\in\{0,1\}$, um die zeitliche Diskretisierung der kinetischen Energie und der Massenflussdichte in der Form

$$\frac{\boldsymbol{v}^2}{2} = \frac{\boldsymbol{v}_{\delta_0}\cdot\boldsymbol{v}_{\delta_1}}{2}, \tag{15.26}$$

$$\varrho\boldsymbol{v} = \frac{\varrho_{\delta_2}\boldsymbol{v}_{\delta_3}+\varrho_{\delta_4}\boldsymbol{v}_{\delta_5}}{2} \tag{15.27}$$

zu notieren. Damit erhält man zunächst als Gleichungssystem

$$\frac{\boldsymbol{v}_1-\boldsymbol{v}_0}{\Delta t} = -\nabla\frac{\boldsymbol{v}^2}{2}, \tag{15.28}$$

$$\frac{\varrho_1-\varrho_0}{\Delta t} = -\nabla\cdot\left(\varrho\boldsymbol{v}\right). \tag{15.29}$$

Hieraus folgt

$$\begin{aligned}\frac{\varrho_{\delta_2}\boldsymbol{v}_{\delta_3}+\varrho_{\delta_4}\boldsymbol{v}_{\delta_5}}{2}\cdot\frac{\boldsymbol{v}_1-\boldsymbol{v}_0}{\Delta t} = -\frac{\varrho_{\delta_2}\boldsymbol{v}_{\delta_3}+\varrho_{\delta_4}\boldsymbol{v}_{\delta_5}}{2}\cdot\nabla\frac{\boldsymbol{v}^2}{2} &= -\frac{\varrho_{\delta_2}\boldsymbol{v}_{\delta_3}+\varrho_{\delta_4}\boldsymbol{v}_{\delta_5}}{2}\cdot\nabla\frac{\boldsymbol{v}_{\delta_0}\cdot\boldsymbol{v}_{\delta_1}}{2}\\ &= -\nabla\cdot\left(\frac{\varrho_{\delta_2}\boldsymbol{v}_{\delta_3}+\varrho_{\delta_4}\boldsymbol{v}_{\delta_5}}{2}\frac{\boldsymbol{v}_{\delta_0}\cdot\boldsymbol{v}_{\delta_1}}{2}\right) + \frac{\boldsymbol{v}_{\delta_0}\cdot\boldsymbol{v}_{\delta_1}}{2}\nabla\cdot\frac{\varrho_{\delta_2}\boldsymbol{v}_{\delta_3}+\varrho_{\delta_4}\boldsymbol{v}_{\delta_5}}{2}\\ &= -\nabla\cdot\left(\frac{\varrho_{\delta_2}\boldsymbol{v}_{\delta_3}+\varrho_{\delta_4}\boldsymbol{v}_{\delta_5}}{2}\frac{\boldsymbol{v}_{\delta_0}\cdot\boldsymbol{v}_{\delta_1}}{2}\right) - \frac{\boldsymbol{v}_{\delta_0}\cdot\boldsymbol{v}_{\delta_1}}{2}\frac{\varrho_1-\varrho_0}{\Delta t}\\ \Leftrightarrow\frac{\varrho_{\delta_2}\boldsymbol{v}_{\delta_3}+\varrho_{\delta_4}\boldsymbol{v}_{\delta_5}}{2}\cdot\frac{\boldsymbol{v}_1-\boldsymbol{v}_0}{\Delta t}+\frac{\boldsymbol{v}_{\delta_0}\cdot\boldsymbol{v}_{\delta_1}}{2}\frac{\varrho_1-\varrho_0}{\Delta t} &= -\nabla\cdot\left(\frac{\varrho_{\delta_2}\boldsymbol{v}_{\delta_3}+\varrho_{\delta_4}\boldsymbol{v}_{\delta_5}}{2}\frac{\boldsymbol{v}_{\delta_0}\cdot\boldsymbol{v}_{\delta_1}}{2}\right)\\ \Leftrightarrow\frac{\varrho_{\delta_2}\boldsymbol{v}_{\delta_3}\cdot\boldsymbol{v}_1+\varrho_{\delta_4}\boldsymbol{v}_{\delta_5}\cdot\boldsymbol{v}_1-\varrho_{\delta_2}\boldsymbol{v}_{\delta_3}\cdot\boldsymbol{v}_0-\varrho_{\delta_4}\boldsymbol{v}_{\delta_5}\cdot\boldsymbol{v}_0+\varrho_1\boldsymbol{v}_{\delta_0}\cdot\boldsymbol{v}_{\delta_1}-\varrho_0\boldsymbol{v}_{\delta_0}\cdot\boldsymbol{v}_{\delta_1}}{2\Delta t} &= -\nabla\cdot\left(\frac{\varrho_{\delta_2}\boldsymbol{v}_{\delta_3}+\varrho_{\delta_4}\boldsymbol{v}_{\delta_5}}{2}\frac{\boldsymbol{v}_{\delta_0}\cdot\boldsymbol{v}_{\delta_1}}{2}\right)\\ \Leftrightarrow\frac{\varrho_{\delta_2}\boldsymbol{v}_{\delta_3}\cdot\boldsymbol{v}_1+\varrho_{\delta_4}\boldsymbol{v}_{\delta_5}\cdot\boldsymbol{v}_1+\varrho_1\boldsymbol{v}_{\delta_0}\cdot\boldsymbol{v}_{\delta_1}-\varrho_{\delta_2}\boldsymbol{v}_{\delta_3}\cdot\boldsymbol{v}_0-\varrho_{\delta_4}\boldsymbol{v}_{\delta_5}\cdot\boldsymbol{v}_0-\varrho_0\boldsymbol{v}_{\delta_0}\cdot\boldsymbol{v}_{\delta_1}}{2\Delta t} &= -\nabla\cdot\left(\frac{\varrho_{\delta_2}\boldsymbol{v}_{\delta_3}+\varrho_{\delta_4}\boldsymbol{v}_{\delta_5}}{2}\frac{\boldsymbol{v}_{\delta_0}\cdot\boldsymbol{v}_{\delta_1}}{2}\right)\end{aligned} \tag{15.30}$$

Es muss gelten

$$\varrho_{\delta_2}\boldsymbol{v}_{\delta_3}\cdot\boldsymbol{v}_1+\varrho_{\delta_4}\boldsymbol{v}_{\delta_5}\cdot\boldsymbol{v}_1+\varrho_1\boldsymbol{v}_{\delta_0}\cdot\boldsymbol{v}_{\delta_1}-\varrho_{\delta_2}\boldsymbol{v}_{\delta_3}\cdot\boldsymbol{v}_0-\varrho_{\delta_4}\boldsymbol{v}_{\delta_5}\cdot\boldsymbol{v}_0-\varrho_0\boldsymbol{v}_{\delta_0}\cdot\boldsymbol{v}_{\delta_1}=\varrho_1\boldsymbol{v}_1\cdot\boldsymbol{v}_1-\varrho_0\boldsymbol{v}_0\cdot\boldsymbol{v}_0. \tag{15.31}$$

Setzt man $\delta_0=\delta_1=0$ ein, folgt

$$\varrho_{\delta_2}\boldsymbol{v}_{\delta_3}\cdot\boldsymbol{v}_1+\varrho_{\delta_4}\boldsymbol{v}_{\delta_5}\cdot\boldsymbol{v}_1+\varrho_1\boldsymbol{v}_0\cdot\boldsymbol{v}_0-\varrho_{\delta_2}\boldsymbol{v}_{\delta_3}\cdot\boldsymbol{v}_0-\varrho_{\delta_4}\boldsymbol{v}_{\delta_5}\cdot\boldsymbol{v}_0-\varrho_0\boldsymbol{v}_0\cdot\boldsymbol{v}_0=\varrho_1\boldsymbol{v}_1\cdot\boldsymbol{v}_1-\varrho_0\boldsymbol{v}_0\cdot\boldsymbol{v}_0. \tag{15.32}$$

Mit $\delta_2=\delta_3=1$ folgt

$$\varrho_1\boldsymbol{v}_1\cdot\boldsymbol{v}_1+\varrho_{\delta_4}\boldsymbol{v}_{\delta_5}\cdot\boldsymbol{v}_1+\varrho_1\boldsymbol{v}_0\cdot\boldsymbol{v}_0-\varrho_1\boldsymbol{v}_1\cdot\boldsymbol{v}_0-\varrho_{\delta_4}\boldsymbol{v}_{\delta_5}\cdot\boldsymbol{v}_0-\varrho_0\boldsymbol{v}_0\cdot\boldsymbol{v}_0=\varrho_1\boldsymbol{v}_1\cdot\boldsymbol{v}_1-\varrho_0\boldsymbol{v}_0\cdot\boldsymbol{v}_0. \tag{15.33}$$

Hieraus wiederum folgt $\delta_4=1$, $\delta_5=0$. Die Paare (δ_2,δ_3), (δ_4,δ_5) sind vertauschbar, was aber keine neue Möglichkeit darstellt, da die Massenflussdichte sich dabei nicht ändert.

Setzt man $\delta_0=\delta_1=1$ ein, folgt

$$\varrho_{\delta_2}\boldsymbol{v}_{\delta_3}\cdot\boldsymbol{v}_1+\varrho_{\delta_4}\boldsymbol{v}_{\delta_5}\cdot\boldsymbol{v}_1+\varrho_1\boldsymbol{v}_1\cdot\boldsymbol{v}_1-\varrho_{\delta_2}\boldsymbol{v}_{\delta_3}\cdot\boldsymbol{v}_0-\varrho_{\delta_4}\boldsymbol{v}_{\delta_5}\cdot\boldsymbol{v}_0-\varrho_0\boldsymbol{v}_1\cdot\boldsymbol{v}_1=\varrho_1\boldsymbol{v}_1\cdot\boldsymbol{v}_1-\varrho_0\boldsymbol{v}_0\cdot\boldsymbol{v}_0. \tag{15.34}$$

Mit $\delta_2=0$, $\delta_3=1$ folgt

$$\varrho_0\boldsymbol{v}_1\cdot\boldsymbol{v}_1+\varrho_{\delta_4}\boldsymbol{v}_{\delta_5}\cdot\boldsymbol{v}_1+\varrho_1\boldsymbol{v}_1\cdot\boldsymbol{v}_1-\varrho_0\boldsymbol{v}_1\cdot\boldsymbol{v}_0-\varrho_{\delta_4}\boldsymbol{v}_{\delta_5}\cdot\boldsymbol{v}_0-\varrho_0\boldsymbol{v}_1\cdot\boldsymbol{v}_1=\varrho_1\boldsymbol{v}_1\cdot\boldsymbol{v}_1-\varrho_0\boldsymbol{v}_0\cdot\boldsymbol{v}_0. \tag{15.35}$$

Hieraus wiederum folgt $\delta_4=0$, $\delta_5=0$.

Setzt man $\delta_0=0$, $\delta_1=1$ ein, folgt

$$\varrho_{\delta_2}\boldsymbol{v}_{\delta_3}\cdot\boldsymbol{v}_1+\varrho_{\delta_4}\boldsymbol{v}_{\delta_5}\cdot\boldsymbol{v}_1+\varrho_1\boldsymbol{v}_0\cdot\boldsymbol{v}_1-\varrho_{\delta_2}\boldsymbol{v}_{\delta_3}\cdot\boldsymbol{v}_0-\varrho_{\delta_4}\boldsymbol{v}_{\delta_5}\cdot\boldsymbol{v}_0-\varrho_0\boldsymbol{v}_0\cdot\boldsymbol{v}_1=\varrho_1\boldsymbol{v}_1\cdot\boldsymbol{v}_1-\varrho_0\boldsymbol{v}_0\cdot\boldsymbol{v}_0. \tag{15.36}$$

Mit $\delta_2=\delta_3=0$ folgt

$$\varrho_0\boldsymbol{v}_0\cdot\boldsymbol{v}_1+\varrho_{\delta_4}\boldsymbol{v}_{\delta_5}\cdot\boldsymbol{v}_1+\varrho_1\boldsymbol{v}_0\cdot\boldsymbol{v}_1-\varrho_0\boldsymbol{v}_0\cdot\boldsymbol{v}_0-\varrho_{\delta_4}\boldsymbol{v}_{\delta_5}\cdot\boldsymbol{v}_0-\varrho_0\boldsymbol{v}_0\cdot\boldsymbol{v}_1=\varrho_1\boldsymbol{v}_1\cdot\boldsymbol{v}_1-\varrho_0\boldsymbol{v}_0\cdot\boldsymbol{v}_0. \tag{15.37}$$

Hieraus wiederum folgt $\delta_4=1$, $\delta_5=1$.

Zusammenfassend ergeben sich folgende drei Möglichkeiten:

$$\frac{\boldsymbol{v}^2}{2}=\frac{\boldsymbol{v}_0\cdot\boldsymbol{v}_0}{2},\qquad \varrho\boldsymbol{v}=\frac{\varrho_1\boldsymbol{v}_0+\varrho_1\boldsymbol{v}_1}{2} \tag{15.38}$$

$$\frac{\boldsymbol{v}^2}{2}=\frac{\boldsymbol{v}_1\cdot\boldsymbol{v}_1}{2},\qquad \varrho\boldsymbol{v}=\frac{\varrho_0\boldsymbol{v}_0+\varrho_0\boldsymbol{v}_1}{2} \tag{15.39}$$

$$\frac{\boldsymbol{v}^2}{2}=\frac{\boldsymbol{v}_0\cdot\boldsymbol{v}_1}{2},\qquad \varrho\boldsymbol{v}=\frac{\varrho_0\boldsymbol{v}_0+\varrho_1\boldsymbol{v}_1}{2} \tag{15.40}$$

15.5.2 Generalisierte Coriolisterme

Für die Zeitentwicklung der kinetischen Energie gilt

$$\frac{\boldsymbol{v}_1^2-\boldsymbol{v}_0^2}{2\Delta t}=\frac{(\boldsymbol{v}_1+\boldsymbol{v}_0)\cdot(\boldsymbol{v}_1-\boldsymbol{v}_0)}{2\Delta t}=\boldsymbol{v}_{1/2}\cdot\frac{\boldsymbol{v}_1-\boldsymbol{v}_0}{\Delta t} \tag{15.41}$$

mit der Näherung

$$\boldsymbol{v}_{1/2}\approx\frac{\boldsymbol{v}_1+\boldsymbol{v}_2}{2}. \tag{15.42}$$

Soll der verallgemeinerte Coriolisterm nicht zur Evolution der kinetischen Energie beitragen, muss dieser am gleichen Zeitlevel ausgewertet werden wie $\boldsymbol{v}_{1/2}$, also in der Mitte zwischen den beiden beteiligten Zeitschritten.

15.5.3 Evolution der Temperatur

15.5.3.1 Zeitentwicklung der inneren Energie

Für die Zeitentwicklung der inneren Energiedichte $\widetilde{I}$ kann man notieren

$$\frac{\Delta\widetilde{I}}{\Delta t} = \frac{\widetilde{I}_1 - \widetilde{I}_0}{\Delta t} = c^{(v)}\varrho_0 \frac{T_1 - T_0}{\Delta t} + c^{(v)} T_1 \frac{\varrho_1 - \varrho_0}{\Delta t}. \tag{15.43}$$

Mittels der Kontinuitätsgleichung erhält man

$$\frac{D\varrho}{Dt} = -\varrho_0 \nabla \cdot \boldsymbol{v}. \tag{15.44}$$

Aus Glg. (3.198) folgt

$$\frac{T_1 - T_0}{\Delta t} = -\frac{R_d}{c^{(v)}} T_0 \nabla \cdot \boldsymbol{v}. \tag{15.45}$$

Beide Male wurde dabei davon ausgegangen, dass die skalaren Variablen vom alten Zeitschritt verwendet werden, wie es z. B. bei einem Forward-backward-Verfahren der Fall ist. Setzt man diese beiden Feststellungen in Glg. (15.43) ein, erhält man

$$\begin{aligned} \frac{\widetilde{I}_1 - \widetilde{I}_0}{\Delta t} &= -c^{(v)}\varrho_0 \frac{R_d}{c^{(v)}} T_0 \nabla \cdot \boldsymbol{v} - c^{(v)} T_1 \varrho_0 \nabla \cdot \boldsymbol{v} \\ &= -c^{(v)}\varrho_0 \nabla \cdot \boldsymbol{v} \left(\frac{R_d}{c^{(v)}} T_0 + T_1 \right) \\ &= -c^{(p)}\varrho_0 \nabla \cdot \boldsymbol{v} \left(\frac{R_d}{c^{(v)}} T_0 + \frac{c^{(v)}}{c^{(p)}} T_1 \right) \end{aligned} \tag{15.46}$$

Hieraus folgert man, dass die Temperatur in der Gewichtung

$$T^\star := \frac{R_d}{c^{(p)}} T_0 + \frac{c^{(v)}}{c^{(p)}} T_1 \tag{15.47}$$

in die diskretisierte Evolution der inneren Energiedichte eingeht.

15.5.3.2 Energetisch konsistente Zeitentwicklung der Temperatur

Nach Glg. (3.388) gilt

$$\frac{\widetilde{I}_1 - \widetilde{I}_0}{\Delta t} = G^\star \frac{\varrho_1 - \varrho_0}{\Delta t} + T^\star \frac{\tilde{s}_1 - \tilde{s}_0}{\Delta t} = G^\star \frac{\varrho_1 - \varrho_0}{\Delta t} + T^\star \frac{\varrho_1 s_1 - \varrho_0 s_0}{\Delta t}, \tag{15.48}$$

wobei aufgrund der Feststellungen im vorigen Abschnitt

$$T^\star := \frac{R_d}{c^{(p)}} T_0 + \frac{c^{(v)}}{c^{(p)}} T_1, \tag{15.49}$$

$$G^\star := \frac{R_d}{c^{(p)}} G_0 + \frac{c^{(v)}}{c^{(p)}} G_1 = R_d T_0 + c^{(v)} T_1 - \frac{R_d}{c^{(p)}} s_0 T_0 - \frac{c^{(v)}}{c^{(p)}} s_1 T_1 \tag{15.50}$$

definiert wurde. Setzt man dies in Glg. (15.48) ein, erhält man

$$\begin{aligned} &\frac{\widetilde{I}_1 - \widetilde{I}_0}{\Delta t} = G^\star \frac{\varrho_1 - \varrho_0}{\Delta t} + T^\star \frac{\tilde{s}_1 - \tilde{s}_0}{\Delta t} \\ = &\left(R_d T_0 + c^{(v)} T_1 - \frac{R_d}{c^{(p)}} s_0 T_0 - \frac{c^{(v)}}{c^{(p)}} s_1 T_1 \right) \frac{\varrho_1 - \varrho_0}{\Delta t} + \left(\frac{R_d}{c^{(p)}} T_0 + \frac{c^{(v)}}{c^{(p)}} T_1 \right) \frac{\varrho_1 s_1 - \varrho_0 s_0}{\Delta t}. \end{aligned} \tag{15.51}$$

Dies kann man nun mit Glg. (15.43) gleichsetzen:

$$\begin{aligned} & c^{(v)}\varrho_{\text{o}}\frac{T_{\text{I}}-T_{\text{o}}}{\Delta t}+c^{(v)}T_{\text{I}}\frac{\varrho_{\text{I}}-\varrho_{\text{o}}}{\Delta t} \\ = & \left(R_dT_{\text{o}}+c^{(v)}T_{\text{I}}-\frac{R_d}{c^{(p)}}s_{\text{o}}T_{\text{o}}-\frac{c^{(v)}}{c^{(p)}}s_{\text{I}}T_{\text{I}}\right)\frac{\varrho_{\text{I}}-\varrho_{\text{o}}}{\Delta t}+\left(\frac{R_d}{c^{(p)}}T_{\text{o}}+\frac{c^{(v)}}{c^{(p)}}T_{\text{I}}\right)\frac{\varrho_{\text{I}}s_{\text{I}}-\varrho_{\text{o}}s_{\text{o}}}{\Delta t} \end{aligned} \tag{15.52}$$

Die rot markierten Terme heben sich auf, somit erhält man

$$c^{(v)}\varrho_{\text{o}}\frac{T_{\text{I}}-T_{\text{o}}}{\Delta t}=\left(R_dT_{\text{o}}-\frac{R_d}{c^{(p)}}s_{\text{o}}T_{\text{o}}-\frac{c^{(v)}}{c^{(p)}}s_{\text{I}}T_{\text{I}}\right)\frac{\varrho_{\text{I}}-\varrho_{\text{o}}}{\Delta t}+\left(\frac{R_d}{c^{(p)}}T_{\text{o}}+\frac{c^{(v)}}{c^{(p)}}T_{\text{I}}\right)\frac{\varrho_{\text{I}}s_{\text{I}}-\varrho_{\text{o}}s_{\text{o}}}{\Delta t}. \tag{15.53}$$

Alle Terme, die die Temperatur am neuen Zeitschritt T_{I} enthalten, schreibt man nun auf die linke Seite:

$$\begin{aligned} & c^{(v)}\varrho_{\text{o}}\frac{T_{\text{I}}}{\Delta t}+\frac{c^{(v)}}{c^{(p)}}s_{\text{I}}T_{\text{I}}\frac{\varrho_{\text{I}}-\varrho_{\text{o}}}{\Delta t}-\frac{c^{(v)}}{c^{(p)}}T_{\text{I}}\frac{\varrho_{\text{I}}s_{\text{I}}-\varrho_{\text{o}}s_{\text{o}}}{\Delta t} \\ = & c^{(v)}\varrho_{\text{o}}\frac{T_{\text{o}}}{\Delta t}+\left(R_dT_{\text{o}}-\frac{R_d}{c^{(p)}}s_{\text{o}}T_{\text{o}}\right)\frac{\varrho_{\text{I}}-\varrho_{\text{o}}}{\Delta t}+\frac{R_d}{c^{(p)}}T_{\text{o}}\frac{\varrho_{\text{I}}s_{\text{I}}-\varrho_{\text{o}}s_{\text{o}}}{\Delta t}. \end{aligned} \tag{15.54}$$

Die Zeitdifferenz lässt sich herauskürzen:

$$\begin{aligned} & c^{(v)}\varrho_{\text{o}}T_{\text{I}}+\frac{c^{(v)}}{c^{(p)}}s_{\text{I}}T_{\text{I}}\left(\varrho_{\text{I}}-\varrho_{\text{o}}\right)-\frac{c^{(v)}}{c^{(p)}}T_{\text{I}}\left(\varrho_{\text{I}}s_{\text{I}}-\varrho_{\text{o}}s_{\text{o}}\right) \\ = & c^{(v)}\varrho_{\text{o}}T_{\text{o}}+\left(R_dT_{\text{o}}-\frac{R_d}{c^{(p)}}s_{\text{o}}T_{\text{o}}\right)\left(\varrho_{\text{I}}-\varrho_{\text{o}}\right)+\frac{R_d}{c^{(p)}}T_{\text{o}}\left(\varrho_{\text{I}}s_{\text{I}}-\varrho_{\text{o}}s_{\text{o}}\right). \end{aligned} \tag{15.55}$$

Ausklammern von T_{I} und Einsetzen von $\Delta\psi := \psi_{\text{I}}-\psi_{\text{o}}$ ergibt

$$T_{\text{I}}\left(c^{(v)}\varrho_{\text{o}}+\frac{c^{(v)}}{c^{(p)}}s_{\text{I}}\Delta\varrho-\frac{c^{(v)}}{c^{(p)}}\Delta\tilde{s}\right)=c^{(v)}\varrho_{\text{o}}T_{\text{o}}+\left(R_dT_{\text{o}}-\frac{R_d}{c^{(p)}}s_{\text{o}}T_{\text{o}}\right)\Delta\varrho+\frac{R_d}{c^{(p)}}T_{\text{o}}\Delta\tilde{s} \tag{15.56}$$

Umstellen ergibt die energetisch konsistente Evolutionsgleichung für die Temperatur:

$$\boxed{T_{\text{I}} = \frac{c^{(v)}\varrho_{\text{o}}T_{\text{o}}+\left(R_dT_{\text{o}}-\frac{R_d}{c^{(p)}}s_{\text{o}}T_{\text{o}}\right)\Delta\varrho+\frac{R_d}{c^{(p)}}T_{\text{o}}\Delta\tilde{s}}{c^{(v)}\varrho_{\text{o}}+\frac{c^{(v)}}{c^{(p)}}s_{\text{I}}\Delta\varrho-\frac{c^{(v)}}{c^{(p)}}\Delta\tilde{s}}} \tag{15.57}$$

16 Auswahl einer zukunftsfähigen horizontalen Diskretisierung

16.1 Aus Rechnerarchitektur folgende Beschränkungen

16.2 Arakawa-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 [3], die in Abb. 16.1 dargestellt sind.

16.3 Skalare Erhaltungseigenschaften auf dem C-Gitter

Ist q eine Erhaltungsgröße, also eine Größe, für die $\frac{Dq}{Dt} = 0$ gilt, so kann man für $\widetilde{q} := \varrho q$ eine Kontinuitätsgleichung herleiten:

$$\frac{Dq}{Dt} = \frac{\partial q}{\partial t} + \boldsymbol{v} \cdot \nabla q = 0, \tag{16.1}$$

$$\frac{\partial \varrho}{\partial t} + \boldsymbol{v} \cdot \nabla \varrho + \varrho \nabla \cdot \boldsymbol{v} = 0, \tag{16.2}$$

$$\Rightarrow \frac{\partial \widetilde{q}}{\partial t} + \nabla \cdot \boldsymbol{j}_{\widetilde{q}} = 0, \tag{16.3}$$

wobei die Größe $\boldsymbol{j}_{\widetilde{q}} := \widetilde{q}\boldsymbol{v}$ den Fluss der Größe q bezeichnet. Definiert man

$$Q := \int_A \widetilde{q} d^3 r \tag{16.4}$$

als das globale Integral der Größe q, so ist Q unter kinematischen Randbedingungen erhalten:

$$\frac{dQ}{dt} = -\int_A \nabla \cdot \boldsymbol{j}_{\widetilde{q}} d^3 r = -\int_{\partial A} \boldsymbol{j}_{\widetilde{q}} \cdot d\boldsymbol{n} \tag{16.5}$$

Zerlegt man A nun in $N \geq 1$ Gitterboxen $A = A_1 \cup A_2 \cup \cdots \cup A_N$, so gilt

$$Q = \sum_{i=1}^{N} Q_i \tag{16.6}$$

mit

$$Q_i := \int_{A_i} \widetilde{q} d^3 r. \tag{16.7}$$

Somit gilt

$$\frac{dQ}{dt} = \sum_{i=1}^{N} \frac{dQ_i}{dt} = -\sum_{i=1}^{N} \int_{\partial A_i} \boldsymbol{j}_{\widetilde{q}} \cdot d\boldsymbol{n} = -\sum_{i=1}^{N} \sum_{F \in F_i} \boldsymbol{j}_{\widetilde{q}} \cdot \boldsymbol{n}_F, \tag{16.8}$$

wobei F_i die Menge aller Seitenflächen der Gitterbox i ist, und $\boldsymbol{n}_F$ 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 $\boldsymbol{n}$ dabei in zwei entgegengesetzte Richtungen zeigt, ergibt sich die Summe zu null, sodass auf einem C-Gitter auch nach der Diskretisierung

$$Q = \text{const.} \tag{16.9}$$

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 Vor-

Abbildung 16.1: Die fünf Gitterstrukturen nach Arakawa. Die Massenvariable wurde mit q bezeichnet [23].

aussetzung, dass $\boldsymbol{j}_{\widetilde{q}}$ nicht nur aus $\widetilde{q}\boldsymbol{v}$, sondern aus weiteren, insbesondere diffusive,n 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. 14.2). 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
- Gültigkeit der Integralsätze für Masse, Entropie und Energie
- mimetische Eigenschaften von Differentialoperatoren ist wichtiger als Konvergenzordnung
- ellipsoidisches Gitter

16.4 Geostrophie auf dem C-Gitter

16.4.1 Lineare SWEs

16.4.2 Nichtlineare SWEs

16.5 Probleme eines dreielementigen Erzeugendensystems

Die beiden Einheitsvektoren der Ebene werden mit

$$\boldsymbol{i} := \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \tag{16.10}$$

$$\boldsymbol{j} := \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \tag{16.11}$$

$$\tag{16.12}$$

bezeichnet. Nun definiert man weiter ein dreielementiges Erzeugendensystem $(\boldsymbol{i}_1, \boldsymbol{i}_2 \boldsymbol{i}_3)$ durch

$$\boldsymbol{i}_1 := \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \boldsymbol{i}, \tag{16.13}$$

$$\boldsymbol{i}_2 := \begin{pmatrix} -\sin(30^\circ) \\ \cos(30^\circ) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\frac{1}{2} \\ \frac{\sqrt{3}}{2} \end{pmatrix} = -\frac{1}{2}\boldsymbol{i} + \frac{\sqrt{3}}{2}\boldsymbol{j}, \tag{16.14}$$

$$\boldsymbol{i}_3 := \begin{pmatrix} -\frac{1}{2} \\ -\frac{\sqrt{3}}{2} \end{pmatrix} = -\frac{1}{2}\boldsymbol{i} - \frac{\sqrt{3}}{2}\boldsymbol{j}, \tag{16.15}$$

dessen Elemente jeweils um 120° gegeneinander rotiert sind. Weiter definiert man ein hiergegen rotiertes Erzeugendensystem $(\boldsymbol{j}_1, \boldsymbol{j}_2 \boldsymbol{j}_3)$ durch

$$\boldsymbol{j}_1 := \boldsymbol{k} \times \boldsymbol{i}_1 = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \tag{16.16}$$

$$\boldsymbol{j}_2 := \boldsymbol{k} \times \boldsymbol{i}_2 = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} -\frac{1}{2} \\ \frac{\sqrt{3}}{2} \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\frac{\sqrt{3}}{2} \\ -\frac{1}{2} \end{pmatrix} = -\frac{\sqrt{3}}{2}\boldsymbol{i} - \frac{1}{2}\boldsymbol{j}, \tag{16.17}$$

$$\boldsymbol{j}_3 := \boldsymbol{k} \times \boldsymbol{i}_3 = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} -\frac{1}{2} \\ -\frac{\sqrt{3}}{2} \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{\sqrt{3}}{2} \\ -\frac{1}{2} \end{pmatrix} = \frac{\sqrt{3}}{2}\boldsymbol{i} - \frac{1}{2}\boldsymbol{j}. \tag{16.18}$$

Man beobachtet

$$\boldsymbol{i}_1 + \boldsymbol{i}_2 + \boldsymbol{i}_3 = 0, \tag{16.19}$$

$$\boldsymbol{j}_1 + \boldsymbol{j}_2 + \boldsymbol{j}_3 = 0. \tag{16.20}$$

Für einen zweidimensionalen Vektor $\boldsymbol{v}$ kann man

$$\boldsymbol{v} = u\boldsymbol{i} + v\boldsymbol{j} \tag{16.21}$$

schreiben, hierbei gelten

$$u = \boldsymbol{i} \cdot \boldsymbol{v}, \tag{16.22}$$

$$v = \boldsymbol{j} \cdot \boldsymbol{v}. \tag{16.23}$$

Da die $\boldsymbol{i}_k$, $\boldsymbol{j}_l$ jeweils paarweise linear unabhängig sind, kann man notieren

$$\boldsymbol{v} = u'_k \boldsymbol{i}_k + u'_l \boldsymbol{i}_l = v'_k \boldsymbol{j}_k + v'_l \boldsymbol{j}_l. \tag{16.24}$$

Da die Auswahl der k, l nicht eindeutig ist und man auch alle drei Einheitsvektoren verwenden könnte, kann man eine weitere lineare Bedingung einführen. Man nutzt diese Freiheit, um die Schreibweise

$$\boldsymbol{v} = \frac{2}{3}\left(u_1 \boldsymbol{i}_1 + u_2 \boldsymbol{i}_2 + u_3 \boldsymbol{i}_3\right) = \frac{2}{3}\left(v_1 \boldsymbol{j}_1 + v_2 \boldsymbol{j}_2 + v_3 \boldsymbol{j}_3\right) \tag{16.25}$$

zu fordern. Dies ist mit

$$u_k = \boldsymbol{i}_k \cdot \boldsymbol{v}, \tag{16.26}$$

$$v_k = \boldsymbol{j}_k \cdot \boldsymbol{v} \tag{16.27}$$

erfüllt, denn hieraus folgt

$$\begin{aligned} \boldsymbol{v} &= u\boldsymbol{i} + v\boldsymbol{j} = \frac{2}{3}\left(\frac{6}{4}u\boldsymbol{i} + \frac{6}{4}v\boldsymbol{j}\right) \\ &= \frac{2}{3}\left(u\boldsymbol{i} + \frac{1}{4}u\boldsymbol{i} - \frac{\sqrt{3}}{4}u\boldsymbol{j} - \frac{\sqrt{3}}{4}v\boldsymbol{i} + \frac{3}{4}v\boldsymbol{j} + \frac{1}{4}u\boldsymbol{i} + \frac{\sqrt{3}}{4}u\boldsymbol{j} + \frac{\sqrt{3}}{4}v\boldsymbol{i} + \frac{3}{4}v\boldsymbol{j}\right) \\ &= \frac{2}{3}\left(u\boldsymbol{i} + \left(-\frac{1}{2}u + \frac{\sqrt{3}}{2}v\right)\left(-\frac{1}{2}\boldsymbol{i} + \frac{\sqrt{3}}{2}\boldsymbol{j}\right) + \left(-\frac{1}{2}u - \frac{\sqrt{3}}{2}v\right)\left(-\frac{1}{2}\boldsymbol{i} - \frac{\sqrt{3}}{2}\boldsymbol{j}\right)\right) \\ &= \frac{2}{3}\left(u_1 \boldsymbol{i}_1 + u_2 \boldsymbol{i}_2 + u_3 \boldsymbol{i}_3\right), \end{aligned} \tag{16.28}$$

wobei

$$u_1 = u, \tag{16.29}$$

$$u_2 = -\frac{1}{2}u + \frac{\sqrt{3}}{2}v, \tag{16.30}$$

$$u_3 = -\frac{1}{2}u - \frac{\sqrt{3}}{2}v. \tag{16.31}$$

verwendet wurde. Dies gilt analog für die v_k. Hieraus folgt

$$\boxed{0 = \boldsymbol{v} \cdot 0 = \boldsymbol{v} \cdot \left(\boldsymbol{i}_1 + \boldsymbol{i}_2 + \boldsymbol{i}_3\right) = u_1 + u_2 + u_3 \qquad (16.32)}$$

und analog für die v_k. Für den Gradienten ∇a eines Skalarfeldes a erhält man nun

$$\nabla a = \frac{2}{3}\left[\left(\boldsymbol{i}_1 \cdot \nabla a\right)\boldsymbol{i}_1 + \left(\boldsymbol{i}_2 \cdot \nabla a\right)\boldsymbol{i}_2 + \left(\boldsymbol{i}_3 \cdot \nabla a\right)\boldsymbol{i}_3\right]. \tag{16.33}$$

Wegen

$$\boldsymbol{i}_k \cdot \nabla a = \frac{\partial a}{\partial x_k} \tag{16.34}$$

folgt

$$\boxed{\nabla a = \frac{2}{3}\left(\frac{\partial a}{\partial x_1}\boldsymbol{i}_1 + \frac{\partial a}{\partial x_2}\boldsymbol{i}_2 + \frac{\partial a}{\partial x_3}\boldsymbol{i}_3\right). \qquad (16.35)}$$

Man stellt hiermit außerdem

$$\boxed{\frac{\partial a}{\partial x_1} + \frac{\partial a}{\partial x_2} + \frac{\partial a}{\partial x_3} = 0 \qquad (16.36)}$$

fest. Es gilt

$$\boldsymbol{i}_1 = \frac{1}{\sqrt{3}}\left(\boldsymbol{j}_3 - \boldsymbol{j}_2\right) \tag{16.37}$$

und zyklisch:

$$\boldsymbol{i}_2 = \frac{1}{\sqrt{3}}\left(\boldsymbol{j}_1 - \boldsymbol{j}_3\right), \tag{16.38}$$

$$\boldsymbol{i}_3 = \frac{1}{\sqrt{3}}\left(\boldsymbol{j}_2 - \boldsymbol{j}_1\right) \tag{16.39}$$

Hieraus folgt

$$\nabla a = \frac{2}{3\sqrt{3}}\left(\frac{\partial a}{\partial x_1}\left(\boldsymbol{j}_3 - \boldsymbol{j}_2\right) + \frac{\partial a}{\partial x_2}\left(\boldsymbol{j}_1 - \boldsymbol{j}_3\right) + \frac{\partial a}{\partial x_3}\left(\boldsymbol{j}_2 - \boldsymbol{j}_1\right)\right). \tag{16.40}$$

Umsortierung ergibt

$$\boxed{\nabla a = \frac{2}{3\sqrt{3}}\left(\left(\frac{\partial a}{\partial x_2} - \frac{\partial a}{\partial x_3}\right)\boldsymbol{j}_1 + \left(\frac{\partial a}{\partial x_3} - \frac{\partial a}{\partial x_1}\right)\boldsymbol{j}_2 + \left(\frac{\partial a}{\partial x_1} - \frac{\partial a}{\partial x_2}\right)\boldsymbol{j}_3\right). \qquad (16.41)}$$

Es gilt

$$\begin{aligned}\boldsymbol{v} &= \frac{2}{3}\left(u_1\boldsymbol{i}_1 + u_2\boldsymbol{i}_2 + u_3\boldsymbol{i}_3\right) = \frac{2}{3}\left[u_1\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix} + u_2\begin{pmatrix}-\frac{1}{2}\\ \frac{\sqrt{3}}{2}\end{pmatrix} + u_3\begin{pmatrix}-\frac{1}{2}\\ -\frac{\sqrt{3}}{2}\end{pmatrix}\right] = \frac{2}{3}\begin{pmatrix}u_1 - \frac{u_2}{2} - \frac{u_3}{2}\\ \frac{\sqrt{3}}{2}u_2 - \frac{\sqrt{3}}{2}u_3\end{pmatrix}\\ &= \begin{pmatrix}\frac{2}{3}u_1 - \frac{u_2}{3} - \frac{u_3}{3}\\ \frac{1}{\sqrt{3}}u_2 - \frac{1}{\sqrt{3}}u_3\end{pmatrix}. \end{aligned} \tag{16.42}$$

Hieraus folgt für die Divergenz

$$D := \nabla \cdot \boldsymbol{v} = \frac{2}{3}\frac{u_1}{\partial x} - \frac{1}{3}\frac{u_2}{\partial x} - \frac{1}{3}\frac{u_3}{\partial x} + \frac{1}{\sqrt{3}}\frac{u_2}{\partial y} - \frac{1}{\sqrt{3}}\frac{u_3}{\partial y}. \tag{16.43}$$

Es gilt

$$\frac{\partial}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial x_1}, \tag{16.44}$$

wegen

$$\boldsymbol{j} = \frac{1}{\sqrt{3}}\left(\boldsymbol{i}_2 - \boldsymbol{i}_3\right) \tag{16.45}$$

ist außerdem

$$\frac{\partial}{\partial y} = \frac{1}{\sqrt{3}}\left(\frac{\partial}{\partial x_2} - \frac{\partial}{\partial x_3}\right). \tag{16.46}$$

Hieraus folgt

$$\begin{aligned} D &= \frac{2}{3}\frac{\partial u_1}{\partial x} - \frac{1}{3}\frac{\partial u_2}{\partial x} - \frac{1}{3}\frac{\partial u_3}{\partial x} + \frac{1}{3}\left(\frac{\partial u_2}{\partial x_2} - \frac{\partial u_2}{\partial x_3}\right) - \frac{1}{3}\left(\frac{\partial u_3}{\partial x_2} - \frac{\partial u_3}{\partial x_3}\right) \\ &= \frac{2}{3}\frac{\partial u_1}{\partial x_1} + \frac{1}{3}\frac{u_2}{\partial x_2} + \frac{1}{3}\frac{u_3}{\partial x_3} - \frac{1}{3}\frac{u_2}{\partial x_1} - \frac{1}{3}\frac{\partial u_3}{\partial x_1} - \frac{1}{3}\frac{\partial u_2}{\partial x_3} - \frac{1}{3}\frac{\partial u_3}{\partial x_2} \\ &= \frac{2}{3}\left(\frac{\partial u_1}{\partial x_1} + \frac{\partial u_2}{\partial x_2} + \frac{\partial u_3}{\partial x_3}\right) - \frac{1}{3}\left(\frac{\partial u_2}{\partial x_1} + \frac{\partial u_2}{\partial x_2} + \frac{\partial u_2}{\partial x_3} + \frac{\partial u_3}{\partial x_1} + \frac{\partial u_3}{\partial x_2} + \frac{\partial u_3}{\partial x_3}\right). \end{aligned} \tag{16.47}$$

Mit Glg. (16.36) folgt

$$\boxed{D = \frac{2}{3}\left(\frac{\partial u_1}{\partial x_1} + \frac{\partial u_2}{\partial x_2} + \frac{\partial u_3}{\partial x_3}\right).} \tag{16.48}$$

Durch Kombination mit Glg. (16.35) erhält man weiterhin

$$\boxed{\Delta a = \frac{2}{3}\left(\frac{\partial^2 a}{\partial x_1^2} + \frac{\partial^2 a}{\partial x_2^2} + \frac{\partial^2 a}{\partial x_3^2}\right).} \tag{16.49}$$

Es gilt

$$\begin{aligned} u_1 &= \boldsymbol{v} \cdot \boldsymbol{i}_1 = \frac{2}{3}\left(v_1 \boldsymbol{j}_1 \cdot \boldsymbol{i}_1 + v_2 \boldsymbol{j}_2 \cdot \boldsymbol{i}_1 + v_3 \boldsymbol{j}_3 \cdot \boldsymbol{i}_1\right) = \frac{2}{3}\left(0 \cdot v_1 - \frac{\sqrt{3}}{2}v_2 + \frac{\sqrt{3}}{2}v_3\right) \\ &= \frac{1}{\sqrt{3}}\left(v_3 - v_2\right). \end{aligned} \tag{16.50}$$

Durch zyklisches Verschieben der Indizes erhält man

$$u_2 = \frac{1}{\sqrt{3}}\left(v_1 - v_3\right), \tag{16.51}$$

$$u_3 = \frac{1}{\sqrt{3}}\left(v_2 - v_1\right). \tag{16.52}$$

Hiermit erhält man eine weitere Darstellung der Divergenz:

$$\boxed{D = \frac{2}{3\sqrt{3}}\left[\left(\frac{\partial v_2}{\partial x_3} - \frac{\partial v_3}{\partial x_2}\right) + \left(\frac{\partial v_3}{\partial x_1} - \frac{\partial v_1}{\partial x_3}\right) + \left(\frac{\partial v_1}{\partial x_2} - \frac{\partial v_2}{\partial x_1}\right)\right]} \tag{16.53}$$

Es gilt

$$\begin{aligned} \boldsymbol{v} &= \frac{2}{3}\left(v_1\boldsymbol{j}_1 + v_2\boldsymbol{j}_2 + v_3\boldsymbol{j}_3\right) = \frac{2}{3}\left[v_1\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} + v_2\begin{pmatrix} -\frac{\sqrt{3}}{2} \\ -\frac{1}{2} \end{pmatrix} + v_3\begin{pmatrix} \frac{\sqrt{3}}{2} \\ -\frac{1}{2} \end{pmatrix}\right] \\ &= \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{3}}v_3 - \frac{1}{\sqrt{3}}v_2 \\ \frac{2}{3}v_1 - \frac{v_2}{3} - \frac{v_3}{3} \end{pmatrix}. \end{aligned} \tag{16.54}$$

Für die Vorticity erhält man somit

$$\begin{aligned} \zeta &= \frac{\partial v}{\partial x} - \frac{\partial u}{\partial y} = \frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{2}{3}v_1 - \frac{v_2}{3} - \frac{v_3}{3}\right) - \frac{\partial}{\partial y}\left(\frac{1}{\sqrt{3}}v_3 - \frac{1}{\sqrt{3}}v_2\right) \\ &= \frac{\partial}{\partial x_1}\left(\frac{2}{3}v_1 - \frac{v_2}{3} - \frac{v_3}{3}\right) - \frac{1}{\sqrt{3}}\left(\frac{\partial}{\partial x_2} - \frac{\partial}{\partial x_3}\right)\left(\frac{1}{\sqrt{3}}v_3 - \frac{1}{\sqrt{3}}v_2\right) \\ &= \frac{2}{3}\frac{\partial v_1}{\partial x_1} + \frac{1}{3}\frac{\partial v_2}{\partial x_2} + \frac{1}{3}\frac{\partial v_3}{\partial x_3} - \frac{1}{3}\frac{\partial v_2}{\partial x_1} - \frac{1}{3}\frac{\partial v_3}{\partial x_1} - \frac{1}{3}\frac{\partial v_3}{\partial x_2} - \frac{1}{3}\frac{\partial v_2}{\partial x_3} \\ &= \frac{2}{3}\left(\frac{\partial v_1}{\partial x_1} + \frac{\partial v_2}{\partial x_2} + \frac{\partial v_3}{\partial x_3}\right) - \frac{1}{3}\left(\frac{\partial v_2}{\partial x_1} + \frac{\partial v_2}{\partial x_2} + \frac{\partial v_2}{\partial x_3} + \frac{\partial v_3}{\partial x_1} + \frac{\partial v_3}{\partial x_2} + \frac{\partial v_3}{\partial x_3}\right). \end{aligned} \tag{16.55}$$

Mit Glg. (16.36) folgt

$$\boxed{\zeta = \frac{2}{3}\left(\frac{\partial v_1}{\partial x_1} + \frac{\partial v_2}{\partial x_2} + \frac{\partial v_3}{\partial x_3}\right).} \tag{16.56}$$

Es gilt

$$\begin{aligned} v_1 &= \boldsymbol{v}\cdot\boldsymbol{j}_1 = \frac{2}{3}\left(u_1\boldsymbol{i}_1 + u_2\boldsymbol{i}_2 + u_3\boldsymbol{i}_3\right)\cdot\boldsymbol{j}_1 = \frac{2}{3}\left(u_1\boldsymbol{i}_1 + u_2\boldsymbol{i}_2 + u_3\boldsymbol{i}_3\right)\cdot\boldsymbol{j} \\ &= \frac{2}{3}\left(\frac{\sqrt{3}}{2}u_2 - \frac{\sqrt{3}}{2}u_3\right) = \frac{1}{\sqrt{3}}\left(u_2 - u_3\right). \end{aligned} \tag{16.57}$$

Durch zyklisches Verschieben der Indizes erhält man

$$v_2 = \frac{1}{\sqrt{3}}\left(u_3 - u_1\right), \tag{16.58}$$

$$v_3 = \frac{1}{\sqrt{3}}\left(u_1 - u_2\right). \tag{16.59}$$

Hieraus folgt eine weitere Darstellung der Vorticity:

$$\zeta = \frac{2}{3\sqrt{3}}\left(\frac{\partial u_2}{\partial x_1} - \frac{\partial u_3}{\partial x_1} + \frac{\partial u_3}{\partial x_2} - \frac{\partial u_1}{\partial x_2} + \frac{\partial u_1}{\partial x_3} - \frac{\partial u_2}{\partial x_3}\right) \tag{16.60}$$

Durch Umsortierung erhält man

$$\boxed{\zeta = \frac{2}{3\sqrt{3}}\left[\left(\frac{\partial u_3}{\partial x_2} - \frac{\partial u_2}{\partial x_3}\right) + \left(\frac{\partial u_1}{\partial x_3} - \frac{\partial u_3}{\partial x_1}\right) + \left(\frac{\partial u_2}{\partial x_1} - \frac{\partial u_1}{\partial x_2}\right)\right].} \tag{16.61}$$

Mit dem Hauptsatz der Vektoranalysis kann man das Vektorfeld $\boldsymbol{v}$ in der Form

$$\boldsymbol{v} = \boldsymbol{k}\times\nabla\psi + \nabla\chi \tag{16.62}$$

notieren. Dabei gelten

$$\boldsymbol{k} \times \nabla \psi = \frac{2}{3}\left(\frac{\partial \psi}{\partial x_1}\boldsymbol{j}_1 + \frac{\partial \psi}{\partial x_2}\boldsymbol{j}_2 + \frac{\partial \psi}{\partial x_3}\boldsymbol{j}_3\right), \tag{16.63}$$

$$\nabla \chi = \frac{2}{3}\left(\frac{\partial \chi}{\partial x_1}\boldsymbol{i}_1 + \frac{\partial \chi}{\partial x_2}\boldsymbol{i}_2 + \frac{\partial \chi}{\partial x_3}\boldsymbol{i}_3\right). \tag{16.64}$$

Hieraus folgen

$$u_1 = \frac{1}{\sqrt{3}}\left(\frac{\partial \psi}{\partial x_3} - \frac{\partial \psi}{\partial x_2}\right) + \frac{\partial \chi}{\partial x_1} = -\frac{1}{\sqrt{3}}\left(\frac{\partial \psi}{\partial x_2} - \frac{\partial \psi}{\partial x_3}\right) + \frac{\partial \chi}{\partial x_1}, \tag{16.65}$$

$$u_2 = -\frac{1}{\sqrt{3}}\left(\frac{\partial \psi}{\partial x_3} - \frac{\partial \psi}{\partial x_1}\right) + \frac{\partial \chi}{\partial x_2}, \tag{16.66}$$

$$u_3 = -\frac{1}{\sqrt{3}}\left(\frac{\partial \psi}{\partial x_1} - \frac{\partial \psi}{\partial x_2}\right) + \frac{\partial \chi}{\partial x_3}. \tag{16.67}$$

und

$$v_1 = \frac{\partial \psi}{\partial x_1} + \frac{1}{\sqrt{3}}\left(\frac{\partial \chi}{\partial x_2} - \frac{\partial \chi}{\partial x_3}\right), \tag{16.68}$$

$$v_2 = \frac{\partial \psi}{\partial x_2} + \frac{1}{\sqrt{3}}\left(\frac{\partial \chi}{\partial x_3} - \frac{\partial \chi}{\partial x_1}\right), \tag{16.69}$$

$$v_3 = \frac{\partial \psi}{\partial x_3} + \frac{1}{\sqrt{3}}\left(\frac{\partial \chi}{\partial x_1} - \frac{\partial \chi}{\partial x_2}\right). \tag{16.70}$$

Wegen

$$D = \Delta \chi, \tag{16.71}$$

$$\zeta = \Delta \psi \tag{16.72}$$

gelten weiter

$$\Delta u_1 = -\frac{1}{\sqrt{3}}\left(\frac{\partial \zeta}{\partial x_2} - \frac{\partial \zeta}{\partial x_3}\right) + \frac{\partial D}{\partial x_1}, \tag{16.73}$$

$$\Delta u_2 = -\frac{1}{\sqrt{3}}\left(\frac{\partial \zeta}{\partial x_3} - \frac{\partial \zeta}{\partial x_1}\right) + \frac{\partial D}{\partial x_2}, \tag{16.74}$$

$$\Delta u_3 = -\frac{1}{\sqrt{3}}\left(\frac{\partial \zeta}{\partial x_1} - \frac{\partial \zeta}{\partial x_2}\right) + \frac{\partial D}{\partial x_3}, \tag{16.75}$$

$$\Delta v_1 = \frac{\partial \zeta}{\partial x_1} + \frac{1}{\sqrt{3}}\left(\frac{\partial D}{\partial x_2} - \frac{\partial D}{\partial x_3}\right), \tag{16.76}$$

$$\Delta v_2 = \frac{\partial \zeta}{\partial x_2} + \frac{1}{\sqrt{3}}\left(\frac{\partial D}{\partial x_3} - \frac{\partial D}{\partial x_1}\right), \tag{16.77}$$

$$\Delta v_3 = \frac{\partial \zeta}{\partial x_3} + \frac{1}{\sqrt{3}}\left(\frac{\partial D}{\partial x_1} - \frac{\partial D}{\partial x_2}\right). \tag{16.78}$$

Bei einer ebenen dreieckigen oder hexagonalen C-Gitter-Diskretisierung sind die Geschwindigkeitskomponenten um 120 bzw. 60° gegenüber einander rotiert, jedoch sind die Komponenten nicht am selben Ort definiert. Daher gilt die Bedingung Glg. (16.32) nicht ohne weiteres für die Vektorkomponenten, sondern erst nach einer Interpolation an Referenzorte, wofür hier die Zentren der Zellen verwendet werden. Diese Interpolation erfolgt mittels Operatoren

$$\tilde{x}^{(i)} \tag{16.79}$$

mit $1 \leq i \leq 3$, wobei x eine beliebige Vektorkomponente ist. Für jede Raumrichtung i braucht man einen separaten Mittelungsoperator. Die Bedingungen Glg. (16.32) lassen sich also hier in der Form

$$\widetilde{u}_1^{(1)} + \widetilde{u}_2^{(2)} + \widetilde{u}_3^{(3)} = 0, \tag{16.80}$$

$$\widetilde{v}_1^{(1)} + \widetilde{v}_2^{(2)} + \widetilde{v}_3^{(3)} = 0 \tag{16.81}$$

notieren. Für jedes Skalarfeld a gilt weiter

$$\tilde{\delta}_1 a^{(1)} + \tilde{\delta}_2 a^{(2)} + \tilde{\delta}_3 a^{(3)} = 0, \tag{16.82}$$

wobei mit $\delta_i a$ für $1 \leq i \leq 3$ zentrale Differenzenquotienten des Skalarfeldes a in i-Richtung bezeichnet werden. Für die Helmholtz-Aufteilung Glg.en (16.65) - (16.70) folgt durch Mittelung in den jeweils relevanten Raumrichtungen

$$\widetilde{u}_1^{(1)} = \frac{1}{\sqrt{3}} \left(\delta_3 \tilde{\psi}^{(1)} - \delta_2 \tilde{\psi}^{(1)} \right) + \delta_1 \tilde{\chi}^{(1)}, \tag{16.83}$$

$$\widetilde{u}_2^{(2)} = \frac{1}{\sqrt{3}} \left(\delta_1 \tilde{\psi}^{(2)} - \delta_3 \tilde{\psi}^{(2)} \right) + \delta_2 \tilde{\chi}^{(2)}, \tag{16.84}$$

$$\widetilde{u}_3^{(3)} = \frac{1}{\sqrt{3}} \left(\delta_2 \tilde{\psi}^{(3)} - \delta_1 \tilde{\psi}^{(3)} \right) + \delta_3 \tilde{\chi}^{(3)}, \tag{16.85}$$

$$\widetilde{v}_1^{(1)} = \frac{1}{\sqrt{3}} \left(\delta_2 \tilde{\chi}^{(1)} - \delta_3 \tilde{\chi}^{(1)} \right) + \delta_1 \tilde{\psi}^{(1)}, \tag{16.86}$$

$$\widetilde{v}_2^{(2)} = \frac{1}{\sqrt{3}} \left(\delta_3 \tilde{\chi}^{(2)} - \delta_1 \tilde{\chi}^{(2)} \right) + \delta_2 \tilde{\psi}^{(2)}, \tag{16.87}$$

$$\widetilde{v}_3^{(3)} = \frac{1}{\sqrt{3}} \left(\delta_1 \tilde{\chi}^{(3)} - \delta_2 \tilde{\chi}^{(3)} \right) + \delta_3 \tilde{\psi}^{(3)}. \tag{16.88}$$

Hiermit sind die Glg.en (16.80) - (16.81) noch nicht erfüllt, vielmehr ist eine vorbereitende Mitttelung der Skalarfelder erforderlich:

$$\widetilde{u}_1^{(1)} = \frac{1}{\sqrt{3}} \left(\delta_3 \tilde{\psi}^{(2)(1)} - \delta_2 \tilde{\psi}^{(3)(1)} \right) + \delta_1 \tilde{\chi}^{(1)} \tag{16.89}$$

$$\widetilde{u}_2^{(2)} = \frac{1}{\sqrt{3}} \left(\delta_1 \tilde{\psi}^{(3)(2)} - \delta_3 \tilde{\psi}^{(1)(2)} \right) + \delta_2 \tilde{\chi}^{(2)} \tag{16.90}$$

$$\widetilde{u}_3^{(3)} = \frac{1}{\sqrt{3}} \left(\delta_2 \tilde{\psi}^{(1)(3)} - \delta_1 \tilde{\psi}^{(2)(3)} \right) + \delta_3 \tilde{\chi}^{(3)} \tag{16.91}$$

$$\widetilde{v}_1^{(1)} = \frac{1}{\sqrt{3}} \left(\delta_2 \tilde{\chi}^{(3)(1)} - \delta_3 \tilde{\chi}^{(2)(1)} \right) + \delta_1 \tilde{\psi}^{(1)} \tag{16.92}$$

$$\widetilde{v}_2^{(2)} = \frac{1}{\sqrt{3}} \left(\delta_3 \tilde{\chi}^{(1)(2)} - \delta_1 \tilde{\chi}^{(3)(2)} \right) + \delta_2 \tilde{\psi}^{(2)} \tag{16.93}$$

$$\widetilde{v}_3^{(3)} = \frac{1}{\sqrt{3}} \left(\delta_1 \tilde{\chi}^{(2)(3)} - \delta_2 \tilde{\chi}^{(1)(3)} \right) + \delta_3 \tilde{\psi}^{(3)} \tag{16.94}$$

16.5.1 Folgerungen

16.5.1.1 Neuformulierung der Rotation

16.5.1.2 Vorzug dex hexagonalen vorm dreieckigen Gitter

16.6 Vergleich quasi-uniformer sphärischer C-Gitter

17 Datenassimilation

17.1 3D-Var

17.2 4D-Var

18 Entwicklung eines dynamischen Kerns

Der Begriff *dynamischer Kern* wird häufig nicht präzise definiert, was hier jedoch getan werden soll. Dazu werden verschiedene Unterkomponenten definiert:

- Der *reversible Teil des dynamischen Kerns* löst die Gleichungen einer trockenadiabatischen Atmosphäre ohne molekulare und numerische Diffusionsterme. Bei Modellen, bei denen dieser Teil des dynamischen Kerns den Zweiten Hauptsatz nicht exakt einhält, sollte man diesen Teil besser als *primären Teil des dynamischen Kerns* bezeichnen.

- Der *irreversible Teil des dynamischen Kerns* behandelt molekulare und numerische diffusive Flüsse. Dabei kann es sich um Wärme-, Massen- oder Impulsflüsse handeln. Die Parametrisierung der numerischen diffusiven Flüsse bezeichnet man auch als Turbulenzparametrisierungen. Bei Modellen, bei denen der zuvor definierte Teil des dynamischen Kerns den Zweiten Hauptsatz nicht exakt einhält, sollte man diesen Teil besser als *sekundären Teil des dynamischen Kerns* bezeichnen. Zusammen mit dem zuvor definierten Teil bildet dieser Teil den *trockenen dynamischen Kern*.

- Der *erweiterte dynamische Kern* behandelt die Advektion von Tracern und stellt sicher, dass keine negativen Tracerdichten auftreten. Dabei kann es sich um Wasserkomponenten, Aerosole oder Gase handeln.

18.1 Horizontales Gitter

18.1.1 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

$$E = \frac{3 \cdot 20}{5} = 12, \tag{18.1}$$

da jede Ecke von fünf Polygonen berührt wird. Die Anzahl K der Kanten ist

$$K = \frac{3 \cdot 20}{2} = 30. \tag{18.2}$$

Nun wird jedes Dreieck $n-$mal in jeweils vier Dreiecke unterteilt, hierbei ist $n \in \mathbb{N}$. Anschließend existieren

$$D = 20 \cdot 4^n \tag{18.3}$$

Dreiecke. Die Flächen dieser Dreiecke sind identisch, sie betragen

$$A_D = r^2 \frac{4\pi}{D} = \frac{\pi r^2}{5 \cdot 4^n}. \tag{18.4}$$

Das duale Gitter des so entstehenden Gitters ist das hexagonale Gitter. Dieses besteht aus

$$N = N_5 + N_6 \tag{18.5}$$

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

$$\frac{5N_5 + 6N_6}{3} = D = 20 \cdot 4^n, \tag{18.6}$$

da jede Ecke von drei Polygonen berührt wird; dies ist gleich der Anzahl der Dreiecke. Also folgt

$$5N_5 + 6N_6 = 60 + 6N_6 = 60 \cdot 4^n \Rightarrow N_6 = 10\,(4^n - 1) \Rightarrow N = 10\,(4^n - 1) + 12. \tag{18.7}$$

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

$$N_V^{(H)} = \frac{5N_5 + 6N_6}{2} = \frac{60 \cdot 4^n}{2} = 30 \cdot 4^n. \tag{18.8}$$

Index	geographische Breite	geographische Länge
0	$\frac{\pi}{2}$	0
1	$\arctan\left(\frac{1}{2}\right)$	0
2	$\arctan\left(\frac{1}{2}\right)$	$\frac{2\pi}{5}$
3	$\arctan\left(\frac{1}{2}\right)$	$2\,\frac{2\pi}{5}$
4	$\arctan\left(\frac{1}{2}\right)$	$3\,\frac{2\pi}{5}$
5	$\arctan\left(\frac{1}{2}\right)$	$4\,\frac{2\pi}{5}$
6	$-\arctan\left(\frac{1}{2}\right)$	$\frac{2\pi}{10}$
7	$-\arctan\left(\frac{1}{2}\right)$	$\frac{2\pi}{10}+\frac{2\pi}{5}$
8	$-\arctan\left(\frac{1}{2}\right)$	$\frac{2\pi}{10}+2\,\frac{2\pi}{5}$
9	$-\arctan\left(\frac{1}{2}\right)$	$\frac{2\pi}{10}+3\,\frac{2\pi}{5}$
10	$-\arctan\left(\frac{1}{2}\right)$	$\frac{2\pi}{10}+4\,\frac{2\pi}{5}$
11	$-\frac{\pi}{2}$	0

Tabelle 18.1: Ecken des in die Einheitskugel eingeschriebenen Ikosaeders.

Die Anzahl der Layer N_L willkürlich zu

$$N_L = 2 + 6 \cdot n \tag{18.9}$$

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

$$N_V = N_L \cdot N_V^{(H)} + N_S^{(H)} \cdot (N_L + 1) \tag{18.10}$$

der Vektoren zu erhalten. Für die Gesamtzahl der Skalare N_S gilt

$$N_S = N_L \cdot N_S^{(H)} = N_L \left[10\left(4^n - 1\right) + 12\right]. \tag{18.11}$$

Die Grundflächen A_5 der Pentagone ergeben sich zu

$$A_5 = \frac{5}{3} A_D = \frac{\pi r^2}{3 \cdot 4^n}, \tag{18.12}$$

diejenigen der Hexagone zu

$$A_6 = \frac{6}{3} A_D = \frac{2\pi r^2}{5 \cdot 4^n}. \tag{18.13}$$

Auf dem dualen Gitter (dem Dreiecksgitter) gelten

$$\begin{aligned}
{}^{(D)}N_S^{(H)} &= 20 \cdot 4^n, && (18.14)\\
{}^{(D)}N_S &= 20 \cdot 4^n \left(N_L + 1\right), && (18.15)\\
{}^{(D)}N_V^{(H)} &= 30 \cdot 4^n, && (18.16)\\
{}^{(D)}N_V &= 30 \cdot 4^n \left(N_L + 1\right) + 20 \cdot 4^n \cdot N_L. && (18.17)
\end{aligned}$$

18.1.2 Gittergenerierung auf der Einheitskugel

18.1.3 Gitteroptimierung

18.2 Vertikales Gitter

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, Vertikalkomponenten von Vektorfeldern in den Levels.
- Die Radialkomponente eines Vektorfeldes zeigt positiv nach oben.

Sei ein Gitter mit n Layern gegeben. Nach Abschnitt 14.2 sind zentrale Differenzenquotienten zweiter Ordnung, während andere Arten von Differenzenquotienten nur erster Ordnung sind. Deshalb legt man für die z-Koordinaten der Level fest, dass sie sich in der Mitte der skalaren Gitterpunkte der benachbarten Layer befinden sollen, also

$$z_{\text{Level}} = \frac{z_{\text{Layer darüber}} + z_{\text{Layer darunter}}}{2}. \tag{18.18}$$

Es sind also zunächst die z-Koordinaten der skalaren Gitterpunkte (z_{Layer}) festzulegen. Es ist sinnvoll, die Layer alle möglichst gleich dick zu wählen, sodass die Auflösung möglichst homogen ist. In der Nähe der Erdoberfläche müssen die Gitterboxen der Orographie folgen. Da dies zu numerischem Mehraufwand führt, ist es nützlich, dies oberhalb einer gewissen Höhe $\tilde{z}$ nicht mehr zu tun. Diese Größe ist ein Kompromiss aus Genauigkeit und Rechenzeit. Die Höhe $\tilde{z}$ wird vom Benutzer indirekt festgelegt. Dieser legt die Höhe H der Modellatmosphäre fest sowie die Anzahl N_L der Layer. Zusätzlich legt er eine Zahl $1 \leq N_{L,O} \leq N_L$ an Layern fest, die der Orographie folgen sollen. $\tilde{z}$ ist dann ein horizontales Skalarfeld, welches durch

$$\tilde{z}\left(\varphi, \lambda\right) = h\left(\varphi, \lambda\right) + \frac{N_{L,O}}{N_L}\left(H - h\left(\varphi, \lambda\right)\right) \tag{18.19}$$

in Termen der Orographie $h = h\left(\varphi, \lambda\right)$ festgelegt ist.[1] Hieraus berechnet man wie folgt vorläufige Positionen $z_{w,\text{pre},i}$ vertikaler Vektoren, wobei i der Layerindex ist:

$$z_{w,\text{pre},i} = \begin{cases} H - i\frac{H-\tilde{z}}{N_L - N_{L,O}}, & \text{falls } i < N_{L,O}, \\ h + \left(N_L - i\right)\frac{\tilde{z}-h}{N_{L,O}}, & \text{sonst.} \end{cases} \tag{18.20}$$

Die skalaren Gitterpunkte werden anschließend in die Mitte zweier angrenzender vertikaler Vektoren gelegt, bevor Glg. (18.18) angewandt wird, um die Position der Level endgültig festzulegen. Für die horizontalen vektoriellen Punkte wird festgelegt, dass diese auch vertikal in der Mitte der beiden angrenzenden Boxen platziert werden, also

$$z_{\text{Vektor, h}} = \frac{z_{\text{Skalar, Herkunft}} + z_{\text{Skalar, Ziel}}}{2}. \tag{18.21}$$

Analog geht man für duale Skalarfelder vor, hier ist die bestimmende Größe die Position $z_{j,i}$ der dualen skalaren Gitterpunkte, wobei j der horizontale Index ist und i wieder das Layer. Für diese Größe legt man

$$z_{j,i} = \frac{1}{3}\sum_{j' \in \text{APC}(j)} z_{j',w,i} \tag{18.22}$$

fest, sie ist also der Mittelwert der z-Positionen der vertikalen Vektoren der drei umliegenden Zellen.

[1] Die Vorstellung, dass h eine Funktion der horizontalen Koordinaten ist, ist falsch, wenn man an Gebäude, Pflanzen und Schluchten denkt. Diese Strukturen sind jedoch kleinräumig. Erst, wenn die horizontale Modellauflösung die Größenordnung von zehn Metern erreicht, muss man sie berücksichtigen.

18.2.1 Funktionaldeterminante einer generalisierten Vertikalkoordinate

Ausgangspunkt sind Kugelkoordinaten mit einer generalisierten Vertikalkoordinate ζ, die von den horizontalen Koordinaten abhängt. Die Transformation auf globale Koordinaten lautet

$$x = r(\zeta,\varphi,\lambda)\cos(\varphi)\cos(\lambda), \tag{18.23}$$
$$y = r(\zeta,\varphi,\lambda)\cos(\varphi)\sin(\lambda), \tag{18.24}$$
$$z = r(\zeta,\varphi,\lambda)\sin(\varphi). \tag{18.25}$$

Die kovarianten Basiselemente dieses Koordinatensystems

$$\boldsymbol{j}_\eta = \frac{\partial r}{\partial \zeta}\boldsymbol{e}_r, \tag{18.26}$$
$$\boldsymbol{j}_\varphi = r\boldsymbol{e}_\varphi + \frac{\partial r}{\partial \varphi}\boldsymbol{e}_r, \tag{18.27}$$
$$\boldsymbol{j}_\lambda = r\cos(\varphi)\,\boldsymbol{e}_\lambda + \frac{\partial r}{\partial \lambda}\boldsymbol{e}_r. \tag{18.28}$$
$$\tag{18.29}$$

Hieraus folgt für die sechs relevanten Skalarprodukte der Basiselemente

$$\boldsymbol{j}_\eta\cdot\boldsymbol{j}_\eta = \left(\frac{\partial r}{\partial \zeta}\right)^2, \tag{18.30}$$
$$\boldsymbol{j}_\eta\cdot\boldsymbol{j}_\varphi = \frac{\partial r}{\partial \zeta}\frac{\partial r}{\partial \varphi}, \tag{18.31}$$
$$\boldsymbol{j}_\eta\cdot\boldsymbol{j}_\lambda = \frac{\partial r}{\partial \zeta}\frac{\partial r}{\partial \lambda}, \tag{18.32}$$
$$\boldsymbol{j}_\varphi\cdot\boldsymbol{j}_\varphi = r^2 + \left(\frac{\partial r}{\partial \varphi}\right)^2, \tag{18.33}$$
$$\boldsymbol{j}_\varphi\cdot\boldsymbol{j}_\lambda = \frac{\partial r}{\partial \varphi}\frac{\partial r}{\partial \lambda}, \tag{18.34}$$
$$\boldsymbol{j}_\lambda\cdot\boldsymbol{j}_\lambda = r^2\cos^2(\varphi) + \left(\frac{\partial r}{\partial \lambda}\right)^2. \tag{18.35}$$

Für die Determinante des metrischen Tensors folgt durch Entwicklung nach der ersten Zeile

$$\begin{aligned}
g &= \begin{vmatrix} \left(\frac{\partial r}{\partial \zeta}\right)^2 & \frac{\partial r}{\partial \zeta}\frac{\partial r}{\partial \varphi} & \frac{\partial r}{\partial \zeta}\frac{\partial r}{\partial \lambda} \\ \frac{\partial r}{\partial \zeta}\frac{\partial r}{\partial \varphi} & r^2 + \left(\frac{\partial r}{\partial \varphi}\right)^2 & \frac{\partial r}{\partial \varphi}\frac{\partial r}{\partial \lambda} \\ \frac{\partial r}{\partial \zeta}\frac{\partial r}{\partial \lambda} & \frac{\partial r}{\partial \varphi}\frac{\partial r}{\partial \lambda} & r^2\cos^2(\varphi) + \left(\frac{\partial r}{\partial \lambda}\right)^2 \end{vmatrix} \\
&= \left(\frac{\partial r}{\partial \zeta}\right)^2\left[r^4\cos^2(\varphi) + r^2\left(\frac{\partial r}{\partial \lambda}\right)^2 + \left(\frac{\partial r}{\partial \varphi}\right)^2 r^2\cos^2(\varphi) + \left(\frac{\partial r}{\partial \varphi}\right)^2\left(\frac{\partial r}{\partial \lambda}\right)^2 - \left(\frac{\partial r}{\partial \varphi}\right)^2\left(\frac{\partial r}{\partial \lambda}\right)^2\right] \\
&\quad -\frac{\partial r}{\partial \zeta}\frac{\partial r}{\partial \varphi}\left[\frac{\partial r}{\partial \zeta}\frac{\partial r}{\partial \varphi}r^2\cos^2(\varphi) + \frac{\partial r}{\partial \zeta}\frac{\partial r}{\partial \varphi}\left(\frac{\partial r}{\partial \lambda}\right)^2 - \frac{\partial r}{\partial \zeta}\frac{\partial r}{\partial \lambda}\frac{\partial r}{\partial \varphi}\frac{\partial r}{\partial \lambda}\right] \\
&\quad +\frac{\partial r}{\partial \zeta}\frac{\partial r}{\partial \lambda}\left[\frac{\partial r}{\partial \zeta}\frac{\partial r}{\partial \varphi}\frac{\partial r}{\partial \varphi}\frac{\partial r}{\partial \lambda} - \frac{\partial r}{\partial \zeta}\frac{\partial r}{\partial \lambda}r^2 - \frac{\partial r}{\partial \zeta}\frac{\partial r}{\partial \lambda}\left(\frac{\partial r}{\partial \varphi}\right)^2\right] \\
&= \left(\frac{\partial r}{\partial \zeta}\right)^2 r^4\cos^2(\varphi).
\end{aligned} \tag{18.36}$$

Die farblich markierten Terme heben sich gegenseitig auf. Für die Funktionaldeterminante erhält man

$$\boxed{\sqrt{g} = \left|\frac{\partial r}{\partial \zeta}\right| r^2\cos(\varphi).} \tag{18.37}$$

Verwendet man für η den linear interplierten Levelindex, folgt

$$\sqrt{g} \overset{\text{Modell}}{=} \Delta z r^2 \cos\left(\varphi\right). \tag{18.38}$$

Die *shallow-atmosphere*-Aprroximation geht von $r = a = \text{const.}$ aus, wobei a der Erdradius ist. Als Konstante kann man diesen Faktor vernachlässigen und erhält

$$\sqrt{g} \overset{\text{shallow-atmosphere-Modell}}{=} \Delta z \cos\left(\varphi\right). \tag{18.39}$$

18.3 Felder

Zunächst einige Definitionen. Seien f ein Skalarfeld und $\boldsymbol{v}, \boldsymbol{w}$ Vektorfelder, dann bezeichne die diskretisierten Versionen dieser Felder durch $f', \boldsymbol{v}', \boldsymbol{w}'$. 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 Verbindungslinien entlang eines Großkreises berechnet werden.

Der Strich als Symbol der Diskretisierung wird von nun an vernachlässigt.

18.3.1 Skalarfelder

Die Übersetzung $f \to f'$ definiert man durch

$$f'_B := \frac{1}{V(B)} \int_B f d^3 r \tag{18.40}$$

für alle Gitterboxen B. Die Gitterpunkte der skalaren Variablen befinden sich in den massengewichteten Zentren der Gitterboxen, wobei von der Standardatmosphäre ausgegangen wird.

18.3.2 Vektorfelder

Für Vektorfelder verwendet man in der Horizontalen kovariante Komponenten, während man in der Vertikalen die kontravariante Komponente verwendet, damit in der Impulsgleichung unter der SGA keine Schwere auftritt. Dies ist zwar ungewöhnlich, aber nicht unmöglich, da die auftretenden Basisvektoren immer linear unabhöngig sind, außerdem werden die Geschwindigkeitskomponenten ja nicht am selben Ort platziert.

Im Falle von Kugelkoordinaten, also oberhalb des Layers oberhalb von $\tilde{z}$, tritt eine richtungsmäßige Unterscheidung von ko- und kontravarianten Basisvektoren nicht mehr auf, die Kugelkkordinaten nach Absch. B.2.1 orthogonal sind.

18.3.3 Rotationsfelder

18.4 Prognostische Variablen

Eine Variable ist eine *prognostische Variable*, wenn für sie eine Evolutionsgleichung gelöst wird, anonsten handelt es sich um eine *diagnostische Variable*.

18.5 Diskretisierung der Poisson-Klammern

18.5.1 Volumengewichtete Mittelungsoperatoren

In der Horizontalen sind die kontravarianten Maßzahlen prognostische Variablen und müssen daher nicht rekonstruiert werden. In der Vertikalen benötigt man jedoch

$$\boldsymbol{v} \cdot \boldsymbol{e}^{(v)} = v^{(v)}. \tag{18.41}$$

Es gilt also

$$v^{(v)}_{b,k+\frac{1}{2}} = w_{b,k+\frac{1}{2}} - \overline{\overline{u^{(h)}_{e,k} J_{n,e,k}}^{(b)}}^{k+\frac{1}{2}}. \tag{18.42}$$

18.5.2 Die innere-Energie-Klammer

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

$$\frac{D\boldsymbol{v}}{Dt} = -\frac{1}{\varrho}\nabla p - \boldsymbol{f} \times \boldsymbol{v} + \boldsymbol{g}, \tag{18.43}$$

$$\frac{\partial \varrho}{\partial t} + \nabla \cdot \left(\varrho \boldsymbol{v}\right) = 0, \tag{18.44}$$

$$c^{(v)} \frac{DT}{Dt} - \frac{p}{\varrho^2}\frac{D\varrho}{Dt} = 0, \tag{18.45}$$

$$p = \varrho R_d T \tag{18.46}$$

ohne Näherungen mit der Randbedingung

$$\boldsymbol{v} \cdot \boldsymbol{n} = 0 \tag{18.47}$$

auf ∂A.

Das Produkt eines Skalarfeldes ψ mit einem Vektorfeld $\boldsymbol{v}$ ist ein Vektorfeld $\boldsymbol{w}$, man notiert

$$\boldsymbol{w} = \psi \boldsymbol{v}. \tag{18.48}$$

An der Fläche i legt man fest

$$w_i = \frac{\psi_{\text{Skalar, Herkunft}} + \psi_{\text{Skalar, Ziel}}}{2} v_i \tag{18.49}$$

Diese Approximation ist zweiter Ordnung, da die vektoriellen Punkte in allen drei Dimensionen in der Mitte der beiden benachbarten skalaren Punkte liegen.

Für das Mittel

$$\overline{\nabla \cdot \boldsymbol{v}} = \frac{1}{V(B)} \int_B \nabla \cdot \boldsymbol{v} d^3 r \tag{18.50}$$

der Divergenz von $\boldsymbol{v}$ in der Menge B gilt mit dem Gauß'schen Satz

$$\overline{\nabla \cdot \boldsymbol{v}} = \frac{1}{V(B)} \int_{\partial B} \boldsymbol{v} \cdot d\boldsymbol{n}. \tag{18.51}$$

Man definiert somit

$$\nabla \cdot \boldsymbol{v} := \frac{1}{V(B)} \sum_{A \in B_A} s\left(B, A\right) V_2\left(A\right) u_A. \tag{18.52}$$

Das Gradientenfeld ∇f ist ein Vektorfeld. Sei $\left(\nabla f\right)_A$ mit $A \in B_A$ eine Komponente dieses Feldes, dann definiert

man diese durch

$$(\nabla f)_A := s(B,A)\,\frac{f_{B'(A)} - f_B}{L_{B,B'}}. \tag{18.53}$$

Die spezifische kinetische Energie k_b in der Zelle mit dem Index $1 \leq b \leq N_b$ schreibt man als eine Summe von n_k Quadraten benachbarter Geschwindigkeitskomponenten:

$$k_b = \sum_{i=1}^{n_k} C_{k,b,i} v_{k,b,i}^2 \tag{18.54}$$

In kartesichen Koordinaten gilt

$$k = \frac{1}{2}\left(v_x^2 + v_y^2 + v_z^2\right), \tag{18.55}$$

woraus man die Bedingung

$$\sum_{i=1}^{n_k} C_{k,b,i} = \frac{3}{2} \tag{18.56}$$

für alle $1 \leq b \leq N_b$ ableitet.

Gesucht wird nach einer Diskretisierung $\times$ des Vektorproduktes $\times$ so, dass die Eigenschaften

$$\boldsymbol{v} \times \boldsymbol{v}_h = -\boldsymbol{v}_h \times \boldsymbol{v} \tag{18.57}$$

sowie

$$\boldsymbol{v} \cdot (\boldsymbol{v} \times \boldsymbol{v}_h) = \boldsymbol{v}_h \cdot (\boldsymbol{v} \times \boldsymbol{v}_h) = 0 \tag{18.58}$$

erhalten bleiben.

18.5.3 Die kinetische-Energie-Klammer

18.6 Neuformulierung des PV-Flusses

18.7 Zeitschrittverfahren: Variante I

Sei $\psi : A \subseteq \mathbb{R}^3 \times \mathbb{R} \to \mathbb{R}^n$ der atmosphärische Zustandsvektor. Alle fundamentalen physikalischen Gesetze sind erster Ordnung in der Zeit, daher kann man schreiben

$$\frac{d\psi}{dt} = F(\psi), \tag{18.59}$$

wobei F die Physik enthält. Diskretisiert man dies auf ein zeitliches Gitter $n\Delta t$ mit $n \in \mathbb{Z}$ und interpoliert zwischen zwei Zeitschritten n, $n+l$, erhält man

$$\psi_{n+l} - \psi_n = \int_{n\Delta t}^{(n+l)\Delta t} F(\psi)\, dt. \tag{18.60}$$

Die Anzahl der dabei involvierten Zeitschritte ist $l+1$. Man kann nun das Integral auf der rechten Seite auf vielfälitge Art und Weise diskretisieren. Das explizite Euler-Verfahren ergibt sich mit $l = 1$ über die Näherung

$$\int_{n\Delta t}^{(n+1)\Delta t} F(\psi)\, dt \approx F(\psi_n)\,\Delta t \tag{18.61}$$

mit $\psi_n := \psi(n\Delta t)$. Das implizite Euler-Verfahren hingegen erhält man über

$$\int_{n\Delta t}^{(n+1)\Delta t} F(\psi)\, dt \approx F\left(\psi_{n+1}\right)\Delta t \tag{18.62}$$

Es besteht folgender Konflikt zwischen expliziten und impliziten Verfahren:

- Explizite Verfahren sind einfach zu implementieren und schnell. Der aus dem CFL-Kriterium folgende Zeitschritt ist jedoch meist deutlich kleiner als der physikalisch notwendige. Dies mindert die Performance expliziter Verfahren erheblich. Explizite Multischrittverfahren machen darüber hinaus Filter erforderlich, welche mimetische Eigenschaften zerstören können.

- Implizite Verfahren sind aufwendiger zu implementieren. Ihre Geschwindigkeit hängt von der Komplexität des Problems ab. Sie sind stabiler als explizite Verfahren.

Hieraus folgt, dass ein schnelles implizites Verfahren ideal für einen dynamischen Kern wäre. Da die zu lösenden Gleichungen jedoch nichtlinear sind, ist ein dreidimensional implizites Verfahren nur über ein iteratives Vorgehen möglich. Bisher ist es nicht gelungen, hier eine zufriedenstellende Konvergenzgeschwindigkeit zu erreichen. Daher wählt man als Kompromiss das *HEVI-Konzept*, was für *horizontally explicit*, *vertically implicit* steht. Das grundlegende Zeitschrittverfahren des Modells ist das Runge-Kutta-Verfahren dritter Ordnung. Das prinzipielle Verfahren bei jedem der drei Unterschritte ist folgendes:

1. Zunächst werden die Geschwindigkeitstendenzen des expliziten Anteils berechnet.

2. Anschließend wird die vertikale Advektion von $\boldsymbol{v}_h$ mittels eines impliziten Verfahrens berechnet, s. Absch. 18.7.1.1.

3. Anschließend wird mittels der neuen Werte von $\boldsymbol{v}_h$ die Vertikalgeschwindigkeit an der Erdoberfläche aus der Bedingung $\boldsymbol{v} \cdot \boldsymbol{n} = 0$ am neuen Zeitschritt berechnet.

4. Anschließend wird die vertikale Advektion von w mittels eines impliziten Verfahrens berechnet, s. Absch. 18.7.1.2.

5. Nun werden die horizontalen Divergenzen mittels der alten Werte der skalaren Variablen und der neuen Werte der horizontalen Geschwindigkeitskomponenten berechnet.

6. Mittels des in Absch. 18.7.1.3 beschriebenen Sound wave solvers werden die kontravarianten Vertikalgeschwindigkeiten ermittelt.

7. Zuletzt werden mittels der generalisierten Kontinuitätsgleichungen die neuen Werte der Entropie- und Massendichte berechnet, wobei für die Horizontaldivergenz die in Schritt 5 und die Vertikaldivergenz die in Schritt 6 berechneten Windkomponenten verwendet werden.

Aus Energieerhaltungsgründen wird für den kovarianten Druckgradienten in allen drei Unterschritten ein gleicher, spezieller Wert verwendet. Die Festlegung auf genau dieses und nicht etwa ein abgewandeltes Verfahren beruht auch auf Erfahrungswerten.

18.7.1 Modifikation zur Stabilisierung

Um in der vertikalen Richtung nicht all zu sehr an das CFL-Kriterium gebunden zu sein, wird die vertikale Impulsadvektion implizit behandelt. Damit dies nicht auf ein globales nichtlineares Problem führt, muss man dies für jeden horizontalen skalaren und vektoriellen Datenpunkt separat tun.

18.7.1.1 Vertikale Advektion des Horizontalwindes

Sei v eine horizontale Vektorkomponente. Vorbereitend wird das Crank-Nicolson-Verfahren mit n als gegenwärtigem Zeitschritt notiert:

$$v_{n+1} = v_n + \frac{\Delta t}{2}\left(\frac{\partial v_n}{\partial t} + \frac{\partial v_{n+1}}{\partial t}\right) \tag{18.63}$$

An dieser Stelle geht es dabei nur um vertikale Advektion, die anderen Terme werden explizit berechnet:

$$v_{n+1} = v_n + \Delta t \dot{v}_n^{(\mathrm{expl})} - \frac{w_n \Delta t}{2}\left(\frac{\partial v_n}{\partial z} + \frac{\partial v_{n+1}}{\partial z}\right) \tag{18.64}$$

Die vertikale Diskretisierung erfordert einen Layerindex $0 \leq i \leq N_L - 1$:

$$v_{n+1}^{(i)} = v_n^{(i)} + \Delta t \dot{v}_n^{(\mathrm{expl})} - \frac{\overline{w_n}^{(i)} \Delta t}{2}\left(\frac{v_n^{(i-1)} - v_n^{(i+1)}}{z^{(i-1)} - z^{(i+1)}} + \frac{v_{n+1}^{(i-1)} - v_{n+1}^{(i+1)}}{z^{(i-1)} - z^{(i+1)}}\right) \tag{18.65}$$

Diese Gleichung wird noch einmal notiert, dabei werden die Unbekannten rot notiert, die Bekannten blau und die Vorfaktoren der Unbekannten schwarz:

$$v_{n+1}^{(i)} = v_n^{(i)} + \Delta t \dot{v}_n^{(\mathrm{expl})} - \frac{\overline{w_n}^{(i)} \Delta t}{2} \frac{v_n^{(i-1)} - v_n^{(i+1)}}{z^{(i-1)} - z^{(i+1)}} - \frac{\overline{w_n}^{(i)} \Delta t}{2\left(z^{(i-1)} - z^{(i+1)}\right)} v_{n+1}^{(i-1)} + \frac{\overline{w_n}^{(i)} \Delta t}{2\left(z^{(i-1)} - z^{(i+1)}\right)} v_{n+1}^{(i+1)} \tag{18.66}$$

Im nullten (obersten) Layer gilt

$$v_{n+1}^{(i)} = v_n^{(i)} + \Delta t \dot{v}_n^{(\mathrm{expl})} - \frac{\overline{w_n}^{(i)} \Delta t}{2} \frac{v_n^{(i)} - v_n^{(i+1)}}{z^{(i)} - z^{(i+1)}} - \frac{\overline{w_n}^{(i)} \Delta t}{2\left(z^{(i)} - z^{(i+1)}\right)} v_{n+1}^{(i)} + \frac{\overline{w_n}^{(i)} \Delta t}{2\left(z^{(i)} - z^{(i+1)}\right)} v_{n+1}^{(i+1)}. \tag{18.67}$$

Hier ist $i = 0$:

$$v_{n+1}^{(0)} = v_n^{(0)} + \Delta t \dot{v}_n^{(\mathrm{expl})} - \frac{\overline{w_n}^{(0)} \Delta t}{2} \frac{v_n^{(0)} - v_n^{(1)}}{z^{(0)} - z^{(1)}} - \frac{\overline{w_n}^{(0)} \Delta t}{2\left(z^{(0)} - z^{(1)}\right)} v_{n+1}^{(0)} + \frac{\overline{w_n}^{(0)} \Delta t}{2\left(z^{(0)} - z^{(1)}\right)} v_{n+1}^{(1)} \tag{18.68}$$

Im $N_L - 1$–ten (untersten) Layer gilt

$$v_{n+1}^{(i)} = v_n^{(i)} + \Delta t \dot{v}_n^{(\mathrm{expl})} - \frac{\overline{w_n}^{(i)} \Delta t}{2} \frac{v_n^{(i-1)} - v_n^{(i)}}{z^{(i-1)} - z^{(i)}} - \frac{\overline{w_n}^{(i)} \Delta t}{2\left(z^{(i-1)} - z^{(i)}\right)} v_{n+1}^{(i-1)} + \frac{\overline{w_n}^{(i)} \Delta t}{2\left(z^{(i-1)} - z^{(i)}\right)} v_{n+1}^{(i)}. \tag{18.69}$$

Hier ist $i = N_L - 1$:

$$\begin{aligned} v_{n+1}^{(N_L-1)} \quad = \quad & v_n^{(N_L-1)} + \Delta t \dot{v}_n^{(\mathrm{expl})} - \frac{\overline{w_n}^{(N_L-1)} \Delta t}{2} \frac{v_n^{(N_L-2)} - v_n^{(N_L-1)}}{z^{(N_L-2)} - z^{(N_L-1)}} - \frac{\overline{w_n}^{(N_L-1)} \Delta t}{2\left(z^{(N_L-2)} - z^{(N_L-1)}\right)} v_{n+1}^{(N_L-2)} \\ & + \frac{\overline{w_n}^{(N_L-1)} \Delta t}{2\left(z^{(N_L-2)} - z^{(N_L-1)}\right)} v_{n+1}^{(N_L-1)} \end{aligned} \tag{18.70}$$

Man definiert den Vektor $\boldsymbol{V}$ der Unbekannten durch

$$\boldsymbol{V} = \begin{pmatrix} v_{n+1}^{(0)} \\ v_{n+1}^{(1)} \\ \vdots \\ v_{n+1}^{(N_L-1)} \end{pmatrix}, \tag{18.71}$$

für diesen gilt ein lineares Gleichungssystem

$$\overleftrightarrow{A} \cdot \boldsymbol{V} = \boldsymbol{b} \tag{18.72}$$

mit einer Matrix $\overleftrightarrow{A}$ und einer rechten Seite $\boldsymbol{b}$. Für diese rechte Seite gilt

$$\boldsymbol{b} = \begin{pmatrix} v_n^{(0)} + \Delta t \dot{v}_n^{(\mathrm{expl})} - \frac{\overline{w_n}^{(0)} \Delta t}{2} \frac{v_n^{(0)} - v_n^{(1)}}{z^{(0)} - z^{(1)}} \\ v_n^{(1)} + \Delta t \dot{v}_n^{(\mathrm{expl})} - \frac{\overline{w_n}^{(1)} \Delta t}{2} \frac{v_n^{(0)} - v_n^{(2)}}{z^{(0)} - z^{(2)}} \\ v_n^{(2)} + \Delta t \dot{v}_n^{(\mathrm{expl})} - \frac{\overline{w_n}^{(2)} \Delta t}{2} \frac{v_n^{(1)} - v_n^{(3)}}{z^{(1)} - z^{(3)}} \\ \vdots \\ v_n^{(N_L-2)} + \Delta t \dot{v}_n^{(\mathrm{expl})} - \frac{\overline{w_n}^{(N_L-2)} \Delta t}{2} \frac{v_n^{(N_L-3)} - v_n^{(N_L-1)}}{z^{(N_L-3)} - z^{(N_L-1)}} \\ v_n^{(N_L-1)} + \Delta t \dot{v}_n^{(\mathrm{expl})} - \frac{\overline{w_n}^{(N_L-1)} \Delta t}{2} \frac{v_n^{(N_L-2)} - v_n^{(N_L-1)}}{z^{(N_L-2)} - z^{(N_L-1)}} \end{pmatrix}. \tag{18.73}$$

Für die Matrix $\overleftrightarrow{A}$ erhält man

$$\overleftrightarrow{A} = \begin{pmatrix} \left(1 + \frac{\overline{w_n}^{(0)}\Delta t}{2\left(z^{(0)}-z^{(1)}\right)}\right) & -\left(\frac{\overline{w_n}^{(0)}\Delta t}{2\left(z^{(0)}-z^{(1)}\right)}\right) & \cdots & 0 \\ \left(\frac{\overline{w_n}^{(1)}\Delta t}{2\left(z^{(0)}-z^{(2)}\right)}\right) & 1 & -\left(\frac{\overline{w_n}^{(1)}\Delta t}{2\left(z^{(0)}-z^{(2)}\right)}\right) & \cdots & 0 \\ \vdots & & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & \left(\frac{\overline{w_n}^{(N_L-1)}\Delta t}{2\left(z^{(N_L-2)}-z^{(N_L-1)}\right)}\right) & \left(1 - \frac{\overline{w_n}^{(N_L-1)}\Delta t}{2\left(z^{(N_L-2)}-z^{(N_L-1)}\right)}\right) \end{pmatrix}. \tag{18.74}$$

18.7.1.2 Vertikale Advektion des Vertikalwindes

Sei w eine vertikale Vektorkomponente. Vorbereitend wird das Crank-Nicolson-Verfahren mit n als gegenwärtigem Zeitschritt notiert:

$$w_{n+1} = w_n + \frac{\Delta t}{2}\left(\frac{\partial w_n}{\partial t} + \frac{\partial w_{n+1}}{\partial t}\right) \tag{18.75}$$

An dieser Stelle geht es dabei nur um vertikale Advektion, die anderen Terme werden explizit berechnet:

$$w_{n+1} = w_n + \Delta t \dot{w}_n^{(\text{expl})} - \frac{w_n \Delta t}{2}\left(\frac{\partial w_n}{\partial z} + \frac{\partial w_{n+1}}{\partial z}\right) \tag{18.76}$$

Die vertikale Diskretisierung erfordert einen Levelindex $0 \leq i \leq N_L - 2$. Hierbei ist $i = 1$ das erste Level (nicht das nullte), da im nullten Level w aus der oberen Randbedingung bekannt ist.

$$w_{n+1}^{(i)} = w_n^{(i)} + \Delta t \dot{w}_n^{(\text{expl})} - \frac{w_n^{(i)}\Delta t}{2}\left(\frac{w_n^{(i-1)} - w_n^{(i+1)}}{z^{(i-1)} - z^{(i+1)}} + \frac{w_{n+1}^{(i-1)} - w_{n+1}^{(i+1)}}{z^{(i-1)} - z^{(i+1)}}\right) \tag{18.77}$$

Diese Gleichung wird noch einmal notiert, dabei werden die Unbekannten rot notiert, die Bekannten blau und die Vorfaktoren der Unbekannten schwarz:

$$w_{n+1}^{(i)} = w_n^{(i)} + \Delta t \dot{w}_n^{(\text{expl})} - \frac{w_n^{(i)}\Delta t}{2}\frac{w_n^{(i-1)} - w_n^{(i+1)}}{z^{(i-1)} - z^{(i+1)}} - \frac{w_n^{(i)}\Delta t}{2\left(z^{(i-1)} - z^{(i+1)}\right)} w_{n+1}^{(i-1)} + \frac{w_n^{(i)}\Delta t}{2\left(z^{(i-1)} - z^{(i+1)}\right)} w_{n+1}^{(i+1)} \tag{18.78}$$

Im nullten Level gilt

$$w_{n+1}^{(0)} = w_n^{(0)} + \Delta t \dot{w}_n^{(\text{expl})} - \frac{w_n^{(0)}\Delta t}{2}\frac{w_n^{(-1)} - w_n^{(1)}}{z^{(-1)} - z^{(1)}} - \frac{w_n^{(0)}\Delta t}{2\left(z^{(-1)} - z^{(1)}\right)} w_{n+1}^{(-1)} + \frac{w_n^{(0)}\Delta t}{2\left(z^{(-1)} - z^{(1)}\right)} w_{n+1}^{(1)} \tag{18.79}$$

Hierbei ist $w^{(-1)} = 0$ aus der oberen Randbedingung bekannt. Im untersten Level gilt mit $i = N_L - 2$ die Gleichung

$$\begin{aligned} w_{n+1}^{(N_L-2)} &= w_n^{(N_L-2)} + \Delta t \dot{w}_n^{(\text{expl})} - \frac{w_n^{(N_L-2)}\Delta t}{2}\frac{w_n^{(N_L-3)} - w_n^{(N_L-1)}}{z^{(N_L-3)} - z^{(N_L-1)}} - \frac{w_n^{(N_L-2)}\Delta t}{2\left(z^{(N_L-3)} - z^{(N_L-1)}\right)} w_{n+1}^{(N_L-3)} \\ &\quad + \frac{w_n^{(N_L-2)}\Delta t}{2\left(z^{(N_L-3)} - z^{(N_L-1)}\right)} w_{n+1}^{(N_L-1)} \end{aligned} \tag{18.80}$$

$w_{n+1}^{(N_L-1)}$ ist aus der unteren Randbedingung bekannt. Man definiert den Vektor $\boldsymbol{W}$ der Unbekannten durch

$$\boldsymbol{W} = \begin{pmatrix} w_{n+1}^{(0)} \\ w_{n+1}^{(1)} \\ \vdots \\ w_{n+1}^{(N_L-2)} \end{pmatrix}, \tag{18.81}$$

für diesen gilt ein lineares Gleichungssystem

$$\overleftrightarrow{A} \cdot \boldsymbol{W} = \boldsymbol{b} \tag{18.82}$$

mit einer Matrix $\overleftrightarrow{A}$ und einer rechten Seite $\boldsymbol{b}$. Für diese rechte Seite gilt

$$\boldsymbol{b} = \begin{pmatrix} w_n^{(0)} + \Delta t \dot{w}_n^{(\text{expl})} - \frac{w_n^{(0)} \Delta t}{2} \frac{w_n^{(-1)} - w_n^{(1)}}{z^{(-1)} - z^{(1)}} \\ w_n^{(1)} + \Delta t \dot{w}_n^{(\text{expl})} - \frac{w_n^{(1)} \Delta t}{2} \frac{w_n^{(0)} - w_n^{(2)}}{z^{(0)} - z^{(2)}} \\ w_n^{(2)} + \Delta t \dot{w}_n^{(\text{expl})} - \frac{w_n^{(2)} \Delta t}{2} \frac{w_n^{(1)} - w_n^{(3)}}{z^{(1)} - z^{(3)}} \\ \vdots \\ w_n^{(N_L-3)} + \Delta t \dot{w}_n^{(\text{expl})} - \frac{w_n^{(N_L-3)} \Delta t}{2} \frac{w_n^{(N_L-4)} - w_n^{(N_L-2)}}{z^{(N_L-4)} - z^{(N_L-2)}} \\ w_n^{(N_L-2)} + \Delta t \dot{w}_n^{(\text{expl})} - \frac{w_n^{(N_L-2)} \Delta t}{2} \frac{w_n^{(N_L-3)} - w_n^{(N_L-1)}}{z^{(N_L-3)} - z^{(N_L-1)}} \end{pmatrix}. \tag{18.83}$$

Für die Matrix $\overleftrightarrow{A}$ erhält man

$$\overleftrightarrow{A} = \begin{pmatrix} \left(1 + \frac{w_n^{(0)} \Delta t}{2\left(z^{(-1)} - z^{(1)}\right)}\right) & -\left(\frac{w_n^{(0)} \Delta t}{2\left(z^{(-1)} - z^{(1)}\right)}\right) & \cdots & 0 \\ \left(\frac{w_n^{(1)} \Delta t}{2\left(z^{(0)} - z^{(2)}\right)}\right) & 1 & -\left(\frac{w_n^{(1)} \Delta t}{2\left(z^{(0)} - z^{(2)}\right)}\right) & \cdots & 0 \\ \vdots & & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & \left(\frac{w_n^{(N_L-2)} \Delta t}{2\left(z^{(N_L-3)} - z^{(N_L-1)}\right)}\right) & \left(1 - \frac{w_n^{(N_L-2)} \Delta t}{2\left(z^{(N_L-3)} - z^{(N_L-1)}\right)}\right) \end{pmatrix}. \tag{18.84}$$

18.7.1.3 Vertikaler Sound wave solver

Zunächst muss festgestellt werden, welche der Terme in Entropieformulierung Schallwellen beschreiben, da diese impliizit behandelt werden müssen. Da Schallwellen adiabatisch sind ist nicht zu erwarten, dass der Anteil des Druckgradienten, der mit dem Gradienten der Entropie zusammenhängt, nicht zu Schallwellen beiträgt. Anders ist es mit dem Gradienten der Enthalpie. Um ein geschlossenes Gleichungssystem zu erhalten, muss daher eine prognostische Gleichung für die Temperatur gefunden werden. Man notiert dazu Glg. (3.289) in der Form

$$\frac{\partial \tilde{T}}{\partial t} = -\nabla \cdot \left(\tilde{T}\boldsymbol{v}\right) - \frac{R_d}{c^{(v)}} \tilde{T} \nabla \cdot \boldsymbol{v} \tag{18.85}$$

als Gleichung für $\tilde{T} := \varrho T$. Der erste Term beschreibt die Advektion, diese ist für Schallwellen üblicherweise nicht relevant. Man notiert daher als eindimensionales Gleichungssystem

$$\frac{\partial w}{\partial t} = -c^{(p)} \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{\tilde{T}}{\varrho}\right), \tag{18.86}$$

$$\frac{\partial \tilde{T}}{\partial t} = -\frac{R_d}{c^{(v)}} \tilde{T} \frac{\partial w}{\partial z}. \tag{18.87}$$

Um zu verifizieren, dass dieses tatsächlich Schallwellen beschreibt, macht man den Ansatz

$$w = w_1 \exp\left(ikz - i\omega t\right), \tag{18.88}$$

$$\tilde{T} = \tilde{T}_0 + \tilde{T}_1 \exp\left(ikz - i\omega t\right). \tag{18.89}$$

Die Dichte wird als homogen angenommen. Setzt man dies in Glg.en (18.86) - (18.87) ein, folgt

$$-i\omega w_1 = -c^{(p)} ik \frac{\tilde{T}_1}{\varrho}, \tag{18.90}$$

$$-i\omega \tilde{T}_1 = -\frac{R_d}{c^{(v)}} \tilde{T}_0 ikw_1. \tag{18.91}$$

In Matrixschreibweise erhält man

$$\begin{pmatrix} -i\omega & c^{(p)} ik \frac{1}{\rho} \\ \frac{R_d}{c^{(v)}} \tilde{T}_0 ik & -i\omega \end{pmatrix} \begin{pmatrix} w_1 \\ \tilde{T}_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}. \tag{18.92}$$

Durch Nullsetzen der Determinante erhält man

$$\omega^2 = \varkappa R_d T k^2. \tag{18.93}$$

Es ergibt sich also die gleiche Dispersionsrelation wie Glg. (6.47). Hiermit ist verifiziert, dass die in den Glg.en (18.86) - (18.87) aufgeführten Terme in der Tat Schallwellen beschreiben.

18.7.1.4 Vertikale Advektion einer generalisierten Dichte

18.8 Zeitschrittverfahren: Variante II

18.9 Randbedingungen

18.9.1 Obere Randbedingung

18.9.2 Untere Randbedingung

18.10 Betrachtung der Impulserhaltung

18.11 Betrachtung der Drehimpulserhaltung

18.12 Betrachtung der EPV-Advektion

18.13 Regionaler Modus

18.14 Tests

18.14.1 JW-Test

Der Jablonowski-Williamson-Test [13] (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?

18.14.1.1 Stationärer Grundzustand

18.14.1.2 Störung

18.14.2 Steile Orographie

18.14.2.1 Ruhende Atmosphäre

18.14.2.2 Bewegte Atmosphäre

18.14.3 Superzelle

18.15 Horizontale Diffusion

18.15.1 Temperaturdiffuson

18.15.2 Massendiffuson

18.15.3 Impulsdiffusion

18.15.3.1 Dissipation

18.16 Vertikale Diffusion

18.16.1 Temperaturdiffuson

18.16.2 Massendiffuson

18.16.3 Impulsdiffusion

18.16.3.1 Dissipation

18.17 Turbulenzparametrisierungen

18.17.1 Held-Suarez-Test

18.18 Rahmen für die Berücksichtigung von Tracern

Führt man $N \geq 1$ Tracer 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, anstattdessen muss man den Hauptsatz für trockene Luft modifizieren. Der Druckgradientterm in der Impulsgleichung ist mit $\frac{\varrho_h}{\varrho}$ zu multiplizieren, um die Massenträgheit der Kondensate zu berücksichtigen.

18.18.1 Limiter

18.19 Model output statistics (MOS)

19 Strahlungstransportalgorithmen

Strahlung wird in Modellen durch separate Simulationen, sogenannte *Strahlungstransportmodelle* behandelt. Dies läuft in folgenden Schritten ab, gegebenenfalls ist das Vorgehen in der konkreten Implementierung leicht modifiziert:

- Zunächst werden die Dichten der Komponenten der Luft an das Strahlungsmodell übermittelt.
- Anschließend werden mittels dieser Dichten und tabellierter Spektren der Stoffe Strahlungseigenschaften der Materie berechnet.
- Nun wird durch Lösen der Strahlungsübertragungsgleichung die spektrale Strahldichte berechnet.
- Durch spektrale Integration der Konvergenz der Strahlungsflussdichte werden Wärmeleistungsdichten ermittelt, die an den dynamischen Kern zurückübermittelt werden. Hieraus gehen Heizraten hervor.

Da das Lösen der Strahlungsübertragungsgleichung zu einem globalen linearen Gleichungssystem führen würde, unterteilt man die Atmosphäre hierzu in nicht wechselwirkende Säulen ein, die mindestens so eine horizontale Ausdehnung haben, wie eine Gitterzelle.

Teil V

Anhang

A 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:

$$1\,\mathrm{dyn} := 1\,\mathrm{gcm/s^2} \tag{A.1}$$

Das Coulomb-Gesetz für die Kraft $\boldsymbol{F}$ auf eine Punktladung q_1 am Ort $\boldsymbol{r}_1$ aufgrund der elektrostatischen Wechselwirkung mit einer Punktladung q_2 am Ort $\boldsymbol{r}_2$ lautet

$$\boldsymbol{F} = kq_1q_2\frac{\boldsymbol{r}_1 - \boldsymbol{r}_2}{|\boldsymbol{r}_1 - \boldsymbol{r}_2|^3} \tag{A.2}$$

mit $k > 0$. Im cgs-System setzt man

$$k := 1. \tag{A.3}$$

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

$$\begin{aligned} 1\,\mathrm{dyn} &= \mathrm{esu}^2/\,\mathrm{cm}^2 \\ \Leftrightarrow 1\,\mathrm{esu} &= \mathrm{cm}\sqrt{\mathrm{g\,cm/s^2}} \\ \Leftrightarrow 1\,\mathrm{esu} &= \mathrm{cm}^{3/2}\mathrm{g}^{1/2}/\mathrm{s}. \end{aligned} \tag{A.4}$$

Ein Vorteil des cgs-Systems ist die Tatsache, dass $\boldsymbol{E}$ und $\boldsymbol{B}$ 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

$$\sum_{i=0}^{n} i = \frac{n(n+1)}{2}. \tag{A.5}$$

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

$$\sum_{i=0}^{n+1} i = \frac{n(n+1)}{2} + n + 1 = \frac{n^2 + 3n + 2}{2} = \frac{(n+1)(n+2)}{2}. \tag{A.6}$$

Damit ist die Aussage bewiesen.

Der *Satz über die geometrische Reihe* lautet

$$\sum_{n=0}^{\infty} q^n = \frac{1}{1-q} \tag{A.7}$$

für $q \in \mathbb{C}$ mit $|q| < 1$.

Zunächst gilt für $N \in \mathbb{N}$

$$\sum_{n=0}^{N} q^n = \frac{1-q^{N+1}}{1-q}. \tag{A.8}$$

Dies zeigt man durch *vollständige Induktion*. Für $N = 0$ ist dies klar, die Aussage gelte für N. Dann gilt

$$\sum_{n=0}^{N+1} q^n = \frac{1-q^{N+1}}{1-q} + q^{N+1} = \frac{1-q^{N+1}}{1-q} + \frac{q^{N+1}-q^{N+2}}{1-q} = \frac{1-q^{N+2}}{1-q}. \tag{A.9}$$

Mit den Rechenregeln für Folgengrenzwerte und

$$\sum_{n=0}^{\infty} q^n = \lim_{N\to\infty} \sum_{n=0}^{N} q^n \tag{A.10}$$

folgt die Aussage. Weiterhin gilt nach [1]

$$\sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n^4} = \frac{\pi^4}{90}. \tag{A.11}$$

A.3 Kombinatorik

Man definiert den Binomialkoeffizienten

$$\binom{n}{k} := \frac{n!}{k!\,(n-k)!} \tag{A.12}$$

mit der *Fakultät*

$$n! := 1 \cdot 2 \cdot \ldots \cdot n \tag{A.13}$$

mit $n, k \in \mathbb{N}$ und $n \geq k$. Die Anzahl der Möglichkeiten, $n \in \mathbb{N}$ Elemente anzuordnen, 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 anzuordnen. Eine *Permutation* ist eine Bijetion auf der Menge $\{1, 2, \ldots, N\}$ mit $1 \leq N \in \mathbb{N}$. Die Menge all dieser Abbildungen wird mit S_N bezeichnet. Aufgrund der gerade bewiesenen Aussage gilt für die Anzahl $|S_N|$ aller Permutationen

$$|S_N| = N!. \tag{A.14}$$

Man definiert weiter das *Vorzeichen einer Permutation* $\pi \in S_N$ durch $\operatorname{sign}(\pi) := (-1)^M$ mit M als der Anzahl aller paarweisen Vertauschungen, die vorzunehmen sind, um $\mathrm{id} \to \pi$ 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 $n \cdot (n-1) \cdot \ldots \cdot (n-k+1) = \frac{n!}{(n-k)!}$. Hierbei wurden jedoch Mengen doppelt gezählt. Weil die Anzahl der Möglichkeiten, k Elemente anzuordnen, $k!$ beträgt, ist die Anzahl der $k-$elementigen Teilmengen einer $n-$elementigen Menge gleich $\frac{n!}{k!(n-k)!} = \binom{n}{k}$.

Seien $n, n_1, \ldots, n_k \in \mathbb{N}$ mit $\sum_{i=1}^{k} n_i = n$. Man definiert den *Multinomialkoeffizienten* durch

$$\binom{n}{n_1, \ldots, n_k} := \frac{n!}{n_1! \ldots n_k!}. \tag{A.15}$$

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 $n_1, \ldots, n_k$ fest, die angeben, wie oft die Elemente gezogen wurden, das Ergebnis ist also das Tupel $(n_1, \ldots, n_k)$. Der Multinomialkoeffizient $\binom{n}{n_1, \ldots, n_k}$ ist die Anzahl der Ziehungen mit Ergebnis $(n_1, \ldots, n_k)$. $n!$ ist die Anzahl aller Möglichkeiten, die n gezogenen Elemente anzuordnen. Für jede solche Anordnung kann man aber die gleichartigen Elemente untereinander vertauschen, ohne das Ergebnis zu verändern. Die Anzahl der Vertauschungen beträgt $n_1! \ldots n_k!$.

Der *binomische Lehrsatz*, auch als allgemeine binomische Formel bezeichnet, lautet

$$(a+b)^n = \sum_{k=0}^{n} \binom{n}{k} a^k b^{n-k}. \tag{A.16}$$

Für $n = 0$ ist dies klar. Weiter gilt

$$\begin{aligned}
(a+b)^{n+1} &= (a+b)^n (a+b) = (a+b) \sum_{k=0}^{n} \binom{n}{k} a^k b^{n-k} \\
&= \sum_{k=0}^{n} \frac{n!}{k!\,(n-k)!} a^{k+1} b^{n-k} + \sum_{k=0}^{n} \frac{n!}{k!\,(n-k)!} a^k b^{n-k+1} \\
&= \sum_{k=1}^{n+1} \frac{n!}{(k-1)!\,(n+1-k)} a^k b^{n-k+1} + \sum_{k=0}^{n} \frac{n!}{k!\,(n-k)!} a^k b^{n-k+1} \\
&= \sum_{k=1}^{n+1} \frac{(n+1)!}{k!\,(n+1-k)!} \frac{k}{n+1} a^k b^{n-k+1} \\
&\quad + \sum_{k=0}^{n} \frac{(n+1)!}{k!\,(n+1-k)!} \frac{n+1-k}{n+1} a^k b^{n-k+1} \\
&= \sum_{k=0}^{n+1} \frac{(n+1)!}{k!\,(n+1-k)!} a^k b^{n-k+1} \left(\frac{k+n+1-k}{n+1} \right) \\
&= \sum_{k=0}^{n+1} \frac{(n+1)!}{k!\,(n+1-k)!} a^k b^{n+1-k} = \sum_{k=0}^{n+1} \binom{n+1}{k} a^k b^{n+1-k}.
\end{aligned} \tag{A.17}$$

Seien (x_1, x_2, x_3) drei kartesische Koordinaten und $(\boldsymbol{e}_1, \boldsymbol{e}_2, \boldsymbol{e}_3)$ die zugehörige Basis. Man definiert das *Levi-Civita-Symbol* $\varepsilon_{i,j,k}$ durch

$$\varepsilon_{i,j,k} := \begin{cases} 1, & (i,j,k) \text{ gerade Permutation von } (1,2,3), \\ -1, & (i,j,k) \text{ ungerade Permutation von } (1,2,3), \\ 0, & \text{sonst.} \end{cases} \tag{A.18}$$

Dies bedeutet inbesondere

$$\varepsilon_{i,j,k} = \varepsilon_{k,i,j} = \varepsilon_{j,k,i} = -\varepsilon_{j,i,k} = -\varepsilon_{k,j,i} = -\varepsilon_{i,k,j}, \tag{A.19}$$

$$\varepsilon_{i,i,j} = \varepsilon_{i,j,i} = \varepsilon_{j,i,i} = 0. \tag{A.20}$$

Es gilt

$$\begin{aligned}
&\sum_{n=1}^{3} \varepsilon_{l,n,k}\varepsilon_{n,o,j} - \varepsilon_{l,n,j}\varepsilon_{n,o,k} = \sum_{n=1}^{3} \varepsilon_{l,n,k}\varepsilon_{j,n,o} + \varepsilon_{l,n,j}\varepsilon_{k,o,n} = \sum_{n=1}^{3} \varepsilon_{j,o,n}\varepsilon_{l,k,n} + \varepsilon_{j,l,n}\varepsilon_{k,o,n} \\
= &\sum_{n=1}^{3} \varepsilon_{j,o,n}\varepsilon_{l,k,n} - \varepsilon_{j,l,n}\varepsilon_{o,k,n}.
\end{aligned} \tag{A.21}$$

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

$$\sum_{n=1}^{3} \varepsilon_{j,o,n}\varepsilon_{l,k,n} - \varepsilon_{j,l,n}\varepsilon_{o,k,n} \quad = \quad \delta_{j,l}\delta_{o,k} - \delta_{j,o}\delta_{l,k} = \sum_{n=1}^{3} \varepsilon_{j,k,n}\varepsilon_{l,o,n}, \tag{A.22}$$

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

$$\det\left(\overleftrightarrow{A}\right) := \sum_{\pi\in S_N} \operatorname{sign}(\pi)\, A_{1,\pi(1)} \cdot \ldots \cdot A_{N,\pi(N)}. \tag{A.23}$$

Gelegentlich verwendet man auch die Schreibweise

$$\begin{vmatrix} A_{1,1} & \ldots & A_{1,N} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ A_{N,1} & \ldots & A_{N,N} \end{vmatrix} := \det(A). \tag{A.24}$$

Zunächst gilt

$$\det\left(A^T\right) \quad = \quad \sum_{\pi\in S_N} \operatorname{sign}(\pi)\, A^T_{1,\pi(1)} \cdot \ldots \cdot A^T_{N,\pi(N)} = \sum_{\pi\in S_N} \operatorname{sign}(\pi)\, A_{\pi(1),1} \cdot \ldots \cdot A_{\pi(N),N}. \tag{A.25}$$

Indem man jeden einzelnen Summanden nach aufsteigenden Zeilenindizes sortiert, erhält man

$$\det\left(A^T\right) \quad = \quad \sum_{\pi\in S_N} \operatorname{sign}(\pi)\, A_{\pi(1),1} \cdot \ldots \cdot A_{\pi(N),N} = \sum_{\pi\in S_N} \operatorname{sign}(\pi)\, A_{1,\pi(1)} \cdot \ldots \cdot A_{N,\pi(N)} = \det(A). \tag{A.26}$$

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

$$\det(A) = 0. \tag{A.27}$$

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 $\operatorname{sign}(\pi) = -\operatorname{sign}(\pi')$, 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

$$\det(A) = 0, \tag{A.28}$$

indem man C einfach vor die die Determinante definierende Summme zieht. Ist die $j-$te Zeile eine Linearkombination der anderen $N-1$ Zeilen, exisitieren also Konstanten $C_l \in \mathbb{C}$ für $1 \leq l \leq N$ mit $l \neq j$ mit $A_{j,k} = \sum_{\substack{l=1,\\ l\neq j}}^{N} C_l A_{l,k}$ für alle $1 \leq k \leq N$, so gilt auch in diesem Fall

$$\det(A) = 0. \tag{A.29}$$

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

$$p(x) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n (x - x_0)^n . \tag{A.30}$$

Für ihre Ableitungen gilt (man erinnere sich an die Summenregel)

$$p'(x) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n n (x - x_0)^{n-1} = \sum_{n=1}^{\infty} a_n n (x - x_0)^{n-1} \sum_{n=0}^{\infty} a_{n+1} (n+1) (x - x_0)^n , \tag{A.31}$$

$$\frac{d^2}{dx^2} \sum_{n=0}^{N} a_i x^i = \sum_{n=0}^{\infty} (n+2)(n+1) a_{n+2} (x - x_0)^n , \tag{A.32}$$

$$\frac{d^m}{dx^m} \sum_{n=0}^{N} a_i x^i = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(n+m)!}{n!} a_{n+m} (x - x_0)^n \tag{A.33}$$

Diese Formeln sind auch auf abbrechende Potenzreihen, sogenannte *Polynome*, anwendbar.

Seien $K \in \{\mathbb{R}, \mathbb{C}\}$ und $f : K \to K$ 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

$$f(x) = p(x) . \tag{A.34}$$

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*

$$\exp(x) := \sum_{n=0}^{\infty} \frac{x^n}{n!} . \tag{A.35}$$

- Die *natürliche Logarithmusfunktion*

$$\ln := \exp^{-1} . \tag{A.36}$$

- Die *Hyperbelfunktionen*

$$\sinh(x) := \frac{\exp(x) - \exp(-x)}{2} , \tag{A.37}$$

$$\cosh(x) := \frac{\exp(x) + \exp(-x)}{2} , \tag{A.38}$$

$$\tanh := \frac{\sinh}{\cosh} . \tag{A.39}$$

- Die entsprechend eingeschränkten Umkehrfunktionen der Hyperbelfunktionen, die sogenannten *Areafunktionen*

$$\operatorname{arsinh} := \sinh^{-1} , \tag{A.40}$$

$$\operatorname{arcosh} := \cosh^{-1} , \tag{A.41}$$

$$\operatorname{artanh} := \tanh^{-1} . \tag{A.42}$$

- Die *trigonometrischen Funktionen*

$$\begin{aligned}
\sin(x) &:= -i\sinh(ix)\,, && \text{(A.43)}\\
\cos(x) &:= \cosh(ix)\,, && \text{(A.44)}\\
\tan &:= \frac{\sin}{\cos}. && \text{(A.45)}
\end{aligned}$$

- Die entsprechend eingeschränkten Umkehrfunktionen der trigonometrischen Funktionen, die sogenannten *Arcusfunktionen*

$$\begin{aligned}
\arcsin &:= \sin^{-1}, && \text{(A.46)}\\
\arccos &:= \cos^{-1}, && \text{(A.47)}\\
\arctan &:= \tan^{-1} && \text{(A.48)}
\end{aligned}$$

Die Exponentialfunktion erfüllt die Rechenregel

$$\begin{aligned}
\exp(x+y) &\overset{\text{Glg. (A.16)}}{=} \sum_{k=0}^{\infty}\frac{1}{k!}\sum_{l=0}^{k}\binom{k}{l}x^l y^{k-l} = \sum_{k=0}^{\infty}\frac{1}{k!}\sum_{l=0}^{k}\frac{k!}{l!\,(k-l)!}x^l y^{k-l} = \sum_{k=0}^{\infty}\sum_{l=0}^{k}\frac{1}{l!\,(k-l)!}x^l y^{k-l}\\
&= \sum_{l=0}^{\infty}\sum_{k=l}^{\infty}\frac{1}{l!\,(k-l)!}x^l y^{k-l} = \sum_{l=0}^{\infty}\frac{x^l}{l!}\sum_{k=0}^{\infty}\frac{y^k}{k!} = \exp(x)\exp(y)\,. && \text{(A.49)}
\end{aligned}$$

Hieraus folgt weiter

$$\begin{aligned}
1 &= \exp(x-x) = \exp(x)\exp(-x)\\
\Rightarrow \exp(-x) &= \frac{1}{\exp(x)}. && \text{(A.50)}
\end{aligned}$$

Es ist

$$\exp(x) > 0 \qquad \text{(A.51)}$$

für alle $x \in \mathbb{R}$. Für $x \geq 0$ ist dies klar. Für $x < 0$ gilt

$$\exp(x) = \frac{1}{\exp(-x)} > 0. \qquad \text{(A.52)}$$

Somit gelten

$$\begin{aligned}
\cosh^2(x) &= \frac{1}{4}\left(e^{2x}+e^{-2x}+2\right) = \frac{1}{4}\left(e^{2x}+e^{-2x}-2\right)+1 = \sinh^2(x)+1, && \text{(A.53)}\\
\sin^2(x)+\cos^2(x) &= -\sinh^2(ix)+\cosh^2(ix) = 1, && \text{(A.54)}\\
\tanh' &= \frac{\cosh^2-\sinh^2}{\cosh^2} = 1-\tanh^2 = \frac{1}{\cosh^2}, && \text{(A.55)}\\
\tan' &= \frac{\cos^2+\sin^2}{\cos^2} = 1+\tan^2 = \frac{1}{\cos^2}. && \text{(A.56)}
\end{aligned}$$

Die Grundfunktionen erfüllen folgende Symmetrieeigenschaften:

$$\begin{aligned}
\sinh(-x) &= \frac{e^{-x}-e^{x}}{2} = -\frac{e^{x}-e^{-x}}{2} = -\sinh(x) && \text{(A.57)}\\
\cosh(-x) &= \frac{e^{-x}+e^{x}}{2} = \frac{e^{x}+e^{-x}}{2} = \cosh(x) && \text{(A.58)}\\
\Rightarrow \tanh(-x) &= -\tanh(x) && \text{(A.59)}\\
\sin(-x) &= -i\sinh(-ix) = i\sinh(ix) = -\left(-i\sinh(ix)\right) = -\sin(x) && \text{(A.60)}\\
\cos(-x) &= \cosh(-ix) = \cosh(ix) = \cos(x) && \text{(A.61)}\\
\Rightarrow \tan(-x) &= -\tan(x) && \text{(A.62)}
\end{aligned}$$

Es gelten die sogenannten *Additionstheoreme*

$$\begin{aligned}
\sinh(x+y) &= \frac{e^x e^y - e^{-x}e^{-y}}{2} = \frac{1}{4}\left(2e^x e^y - 2e^{-x}e^{-y}\right) = \frac{1}{4}\left(\left(e^x - e^{-x}\right)\left(e^y + e^{-y}\right) + \left(e^y - e^{-y}\right)\left(e^x + e^{-x}\right)\right) \\
&= \sinh(x)\cosh(y) + \cosh(x)\sinh(y)\,, && \text{(A.63)} \\
\cosh(x+y) &= \frac{e^x e^y + e^{-x}e^{-y}}{2} = \frac{1}{4}\left(2e^x e^y + 2e^{-x}e^{-y}\right) = \frac{1}{4}\left(\left(e^x + e^{-x}\right)\left(e^y + e^{-y}\right) + \left(e^y - e^{-y}\right)\left(e^x - e^{-x}\right)\right) \\
&= \cosh(x)\cosh(y) + \sinh(x)\sinh(y)\,, && \text{(A.64)} \\
\tanh(x+y) &= \frac{\sinh(x+y)}{\cosh(x+y)} = \frac{\sinh(x)\cosh(y) + \cosh(x)\sinh(y)}{\cosh(x)\cosh(y) + \sinh(x)\sinh(y)} = \frac{\tanh(x)\cosh(y) + \sinh(y)}{\cosh(y) + \tanh(x)\sinh(y)} \\
&= \frac{\tanh(x) + \tanh(y)}{1 + \tanh(x)\tanh(y)}. && \text{(A.65)}
\end{aligned}$$

Wendet man dies auf die trigonometrischen Funktionen an, erhält man

$$\begin{aligned}
\sin(x+y) &= -i\sinh(ix+iy) = -i\sinh(ix)\cosh(iy) - i\cosh(ix)\sinh(iy) \\
&= \sin(x)\cos(y) + \cos(x)\sin(y)\,, && \text{(A.66)} \\
\cos(x+y) &= \cosh(ix+iy) = \cosh(ix)\cosh(iy) + \sinh(ix)\sinh(iy) \\
&= \cos(x)\cos(y) - \sin(x)\sin(y)\,. && \text{(A.67)}
\end{aligned}$$

Hieraus folgt

$$\cos(a) = \cos^2\left(\frac{a}{2}\right) - \sin^2\left(\frac{a}{2}\right) = 1 - 2\sin^2\left(\frac{a}{2}\right) = 2\cos^2\left(\frac{a}{2}\right) - 1. \tag{A.68}$$

Weiter gilt die sogenannte *Euler-Identität*

$$\exp(ix) = \frac{\exp(ix) + \exp(-ix) + \exp(ix) - \exp(-ix)}{2} = \cosh(ix) + \sinh(ix) = \cos(x) + i\sin(x)\,. \tag{A.69}$$

Für die Ableitungen der Grundfunktionen gilt

$$\begin{aligned}
\exp'(x) &\overset{\text{Glg. (A.31)}}{=} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{n+1}{(n+1)!}x^n = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{x^n}{n!} = \exp(x)\,, && \text{(A.70)} \\
\sinh'(x) &= \cosh(x)\,, && \text{(A.71)} \\
\cosh'(x) &= \sinh(x)\,, && \text{(A.72)} \\
\sin'(x) &= \cosh(ix) = \cos(x)\,, && \text{(A.73)} \\
\cos'(x) &= -\sin(x)\,. && \text{(A.74)}
\end{aligned}$$

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

$$\begin{aligned}
\lim_{x\to\infty} \sinh(x) &= \infty, && \text{(A.75)} \\
\lim_{x\to-\infty} \sinh(x) &= -\infty. && \text{(A.76)}
\end{aligned}$$

Also ist

$$\operatorname{arsinh} : \mathbb{R} \to \mathbb{R} \tag{A.77}$$

definiert, weiterhin gilt

$$\operatorname{arsinh}'(x) = \frac{1}{\cosh\left(\operatorname{arsinh}'(x)\right)} = \frac{1}{\sqrt{1+x^2}}. \tag{A.78}$$

Es gelten weiterhin

$$\lim_{x\to\infty} \cosh(x) = \infty, \tag{A.79}$$

$$\lim_{x\to-\infty} \cosh(x) = \infty, \tag{A.80}$$

das Minimum befindet sich bei $x = 0$, dort ist $\cosh(0) = 1$, also definiert man

$$\operatorname{arcosh}[1,\infty) \to [0,\infty). \tag{A.81}$$

Für die Ableitung gilt

$$\operatorname{arcosh}'(x) = \frac{1}{\sinh(\operatorname{arcosh}(x))} = \frac{1}{\sqrt{x^2-1}}. \tag{A.82}$$

Die Arcusfunktionen haben die Definitions- und Bildmengen

$$\arcsin: \quad [-1,1] \to \left[-\frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{2}\right], \tag{A.83}$$

$$\arccos: \quad [-1,1] \to [0,\pi], \tag{A.84}$$

$$\arctan: \quad (-\infty,\infty) \to \left(-\frac{\pi}{2}.\frac{\pi}{2}\right). \tag{A.85}$$

Ihre Ableitungen berechnen sich zu

$$\arcsin'(x) = \frac{1}{\cos(\arcsin(x))} = \frac{1}{\sqrt{1-x^2}}, \tag{A.86}$$

$$\arccos'(x) = -\frac{1}{\sin(\arccos(x))} = \frac{1}{\sqrt{1-x^2}}, \tag{A.87}$$

$$\arctan'(x) = \frac{1}{\tan'(\arctan(x))} = \frac{1}{1+x^2}. \tag{A.88}$$

Für die Taylor-Entwicklungen erster Ordnung der Grundfunktionen zum Entwicklungspunkt Null folgt

$$\exp(x) \approx 1 + x, \tag{A.89}$$

$$\sinh(x) \approx x, \tag{A.90}$$

$$\cosh(x) \approx 1, \tag{A.91}$$

$$\tanh(x) \approx x, \tag{A.92}$$

$$\sin(x) \approx x, \tag{A.93}$$

$$\cos(x) \approx 1, \tag{A.94}$$

$$\tan(x) \approx x. \tag{A.95}$$

Sei $p(x) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n x^n$ eine Potenzreihe $\mathbb{C} \to \mathbb{C}$ 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 $|x| \to \infty$ 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 $f = f(x)$

$$\int_{a<0}^{b>0} \delta(x) f(x)\, dx = f(0) \tag{A.96}$$

gilt. Es ist nach [7]

$$\lim_{t\to\infty} \frac{4\sin^2\left(\frac{\Omega t}{2}\right)}{\Omega^2 t} = 2\pi\delta\left(\Omega\right). \tag{A.97}$$

Nach [5] gilt

$$\delta\left(x - x_0\right) = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} \exp\left(ik\left(x - x_0\right)\right) dk. \tag{A.98}$$

A.7 Integralformeln

Seien $f, g : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ Riemann-integrierbar. Dann gilt mit der Produktregel

$$(fg)' \quad = \quad f'g + fg' \Leftrightarrow fg = \int f'g dx + \int fg' dx \Leftrightarrow \int f'g dx = fg - \int fg' dx. \tag{A.99}$$

Dies bezeichnet man als *partielle Integration*.

Seien $a, b \in \mathbb{R}$ mit $a < b$, $f : [a, b] \to \mathbb{R}$ Riemann-integrierbar, $I \subseteq \mathbb{R}$ ein Intervall, $\varphi : I \to [a, b]$ stetig-differenzierbar und bijektiv und F eine Stammfunktion von f. Dann gilt

$$\int_a^b f(x)\, dx = \left[F(x)\right]_a^b = \left[F\left(\varphi\left(x\right)\right)\right]_{\varphi^{-1}(a)}^{\varphi^{-1}(b)} = \int_{\varphi^{-1}(a)}^{\varphi^{-1}(b)} \frac{d}{dx}\left(F\left(\varphi\left(x\right)\right)\right) dx = \int_{\varphi^{-1}(a)}^{\varphi^{-1}(b)} f\left(\varphi\left(x\right)\right)\varphi'\left(x\right) dx. \tag{A.100}$$

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 $h : [a, b] \to \mathbb{R}$ Riemann-integrierbar, $f : [a, b] \to \mathbb{R}$ stetig-differenzierbar und bijektiv und $g : f([a, b]) \to \mathbb{R}$ Riemann-integrierbar mit $g(y) \neq 0$ für alle $y \in f([a, b])$. Man will die Differenzialgleichung

$$\frac{df}{dx} = g\left(f\right) h\left(x\right) \tag{A.101}$$

auf $[a, b]$ lösen. Man rechnet

$$\frac{1}{g\left(f\right)}\frac{df}{dx} = h\left(x\right). \tag{A.102}$$

Dies integriert man nun von a bis zu einem gewünschten $x \in [a, b]$:

$$\int_a^x \frac{1}{g\left(f\left(x'\right)\right)}\frac{df}{dx'} dx' \quad = \quad \int_a^x h\left(x'\right) dx' \Leftrightarrow \int_{f(a)}^{f(x)} \frac{1}{g\left(f\right)} df = \int_a^x h\left(x'\right) dx' \tag{A.103}$$

Hierbei wurde die Substitutionsregel verwendet. Sind diese beiden Integrale lösbar, erhält man einen algebraischen Ausdruck für $f(x)$. Nun soll

$$\int_0^\infty x^n e^{-\beta x} dx = \frac{n!}{\beta^{n+1}} \tag{A.104}$$

mit $\beta \in \mathbb{R}$, $\beta > 0$, $n \in \mathbb{N}$ eingesehen werden. Dies tut man am besten per vollständiger Induktion. Für $n = 0$ gilt

$$\int_0^\infty e^{-\beta x} dx = \frac{1}{\beta}, \tag{A.105}$$

also stimmt die Aussage für $n = 0$. Nun gelte die Aussage für n bereits. Dann folgt per partieller Integration

$$\int_0^\infty x^{n+1} e^{-\beta x} \quad = \quad \left[-\frac{1}{\beta} x^{n+1} e^{-\beta x}\right]_0^\infty + \frac{n+1}{\beta}\int_0^\infty x^n e^{-\beta x} dx = \frac{n+1}{\beta}\frac{n!}{\beta^{n+1}} = \frac{(n+1)!}{\beta^{n+2}}. \tag{A.106}$$

Somit gilt die Aussage für alle $n \in \mathbb{N}$. Weiterhin gilt

$$\int_0^\infty \frac{x^3}{e^x - 1} dx = \frac{\pi^4}{15}. \tag{A.107}$$

Hierfür rechnet man zunächst mit Glg. (A.7)

$$\frac{1}{e^x - 1} = \frac{e^{-x}}{1 - e^{-x}} = \frac{e^{-x} + 1 - 1}{1 - e^{-x}} = \frac{1}{1 - e^{-x}} - 1 = \sum_{n=0}^{\infty} e^{-nx} - 1 = \sum_{n=1}^{\infty} e^{-nx}. \tag{A.108}$$

Damit folgt mit den Glg.en (A.104) und (A.11)

$$\int_0^\infty \frac{x^3}{e^x - 1} dx \quad = \quad \sum_{n=1}^{\infty} \int_0^\infty x^3 e^{-nx} dx = 6 \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n^4} = \frac{\pi^4}{15}. \tag{A.109}$$

Die *Fehlerfunktion* erf ist definiert durch

$$\operatorname{erf}(x) := \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^x e^{-t^2} dt. \tag{A.110}$$

Es gilt nach [1]

$$\lim_{x \to \infty} \operatorname{erf}(x) = 1. \tag{A.111}$$

Für $C > 0$ folgt

$$\lim_{x \to \infty} \int_0^\infty e^{-Cx^2} dx = \frac{1}{\sqrt{C}} \lim_{x \to \infty} \int_0^\infty e^{-x^2} dx = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\pi}{C}}. \tag{A.112}$$

Es folgen

$$\int_0^\infty e^{-Cx^2} x^2 dx \quad = \quad \left[x \left(-\frac{1}{2C} e^{-Cx^2} \right) \right]_0^\infty + \frac{1}{2C} \int_0^\infty e^{-Cx^2} dx = \frac{1}{4} \sqrt{\frac{\pi}{C^3}}, \tag{A.113}$$

$$\begin{aligned} \int_0^\infty e^{-Cx^2} x^3 dx &= \left[x^2 \cdot \left(-\frac{1}{2C} e^{-Cx^2} \right) \right]_0^\infty + \int_0^\infty \frac{x}{C} e^{-Cx^2} dx \\ &= \int_0^\infty \frac{x}{C} e^{-Cx^2} dx = -\frac{1}{2C^2} \left[e^{-Cx^2} \right]_0^\infty = \frac{1}{2C^2}. \end{aligned} \tag{A.114}$$

Man definiert die *Gammafunktion* für $x > 0$ durch

$$\Gamma(x) := \int_0^\infty t^{x-1} e^{-t} dt. \tag{A.115}$$

Für $n \in \mathbb{N}$ gilt wegen Glg. (A.104)

$$\Gamma(n+1) = \int_0^\infty t^n e^{-t} dt = n!. \tag{A.116}$$

Damit folgt insbesondere

$$\Gamma(n+1) \quad = \quad n! = n(n-1)! = n\Gamma(n). \tag{A.117}$$

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

$$n! = \Gamma(n+1) = \int_0^\infty t^n e^{-t} dt = \int_0^\infty e^{-t + n\ln(t)} dt = \int_0^\infty e^{-n\varphi(t)} dt \tag{A.118}$$

mit

$$\varphi(t) = \frac{n}{-}\ln(t). \tag{A.119}$$

Es gelten

$$\lim_{t\to 0}\varphi(t) = \infty, \tag{A.120}$$
$$\lim_{\to\infty}\varphi(t) = \infty. \tag{A.121}$$

Für die ersten beiden Ableitungen gilt

$$\varphi'(t) = \frac{1}{n} - \frac{1}{,} \tag{A.122}$$
$$\varphi''(t) = \frac{1}{t^2}. \tag{A.123}$$

Das eindeutige Minimum liegt also bei $t = n$. Die Taylor-Entwicklung bis zur zweiten Ordnung zum Punkt $x = n$ lautet also

$$\varphi(t) = 1 - \ln(n) + \frac{1}{2}\frac{(t-n)^2}{n^2} + \mathcal{O}\left((t-n)^3\right). \tag{A.124}$$

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:

$$n! \approx \int_0^\infty e^{-n+n\ln(n)-\frac{1}{2}\frac{(t-n)^2}{n}}dt = n^n e^{-n}\int_0^\infty e^{-\frac{t^2}{2n}}dt = n^n e^{-n}\sqrt{2\pi n}. \tag{A.125}$$

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

$$+ : V \times V \to V; (\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}) \mapsto \boldsymbol{x} + \boldsymbol{y} \tag{A.126}$$

sowie eine andere Abbildung

$$\cdot : K \times V \to V; (\lambda, \boldsymbol{x}) \mapsto \lambda\boldsymbol{x}. \tag{A.127}$$

Diese beiden Funktionen haben die folgenden Eigenschaften:

$$(\boldsymbol{x} + \boldsymbol{y}) + \boldsymbol{z} = \boldsymbol{x} + (\boldsymbol{y} + \boldsymbol{z}), \tag{A.128}$$
$$\boldsymbol{x} + \boldsymbol{y} = \boldsymbol{y} + \boldsymbol{x}, \tag{A.129}$$
$$0 + \boldsymbol{x} = \boldsymbol{x}. \tag{A.130}$$

Für jedes $\boldsymbol{x} \in V$ existiert ein $(-\boldsymbol{x}) \in V$ mit

$$(-\boldsymbol{x}) + \boldsymbol{x} = 0. \tag{A.131}$$

Weiterhin sollen gelten

$$\lambda_1 \cdot (\lambda_2\boldsymbol{x}) = (\lambda_1\lambda_2) \cdot \boldsymbol{x}, \tag{A.132}$$
$$1 \cdot \boldsymbol{x} = \boldsymbol{x}, \tag{A.133}$$
$$\lambda(\boldsymbol{x} + \boldsymbol{y}) = \lambda\boldsymbol{x} + \lambda\boldsymbol{y}, \tag{A.134}$$
$$(\lambda_1 + \lambda_2)\boldsymbol{x} = \lambda_1\boldsymbol{x} + \lambda_2\boldsymbol{x}. \tag{A.135}$$

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 $\boldsymbol{b} = (b_1, \ldots, b_n)^T$ definiert man durch,

$$\overleftrightarrow{A}\boldsymbol{b} = \sum_{i=1}^{m}\sum_{j=1}^{n} A_{i,j} b_j \boldsymbol{e}_i, \tag{A.136}$$

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

$$(A \cdot B)_{i,j} := \sum_{a=1}^{n} A_{i,a} B_{a,j}. \tag{A.137}$$

Es gilt

$$(A \cdot B)^T_{i,j} = (A \cdot B)_{j,i} = \sum_{a=1}^{n} A_{j,a} B_{a,i} = \sum_{a=1}^{n} B_{a,i} A_{j,a} = \sum_{a=1}^{n} B^T_{i,a} A^T_{a,j} = \left(B^T \cdot A^T\right)_{i,j} \tag{A.138}$$

und somit ist in diesem Fall

$$\left(\overleftrightarrow{A} \cdot \overleftrightarrow{B}\right)^T = \overleftrightarrow{B}^T \cdot \overleftrightarrow{A}^T. \tag{A.139}$$

Man definiert weiter das Skalarprodukt zweier Vektoren $\boldsymbol{a}, \boldsymbol{b} \in \mathbb{R}^n$ durch

$$\boldsymbol{a} \cdot \boldsymbol{b} = \langle \boldsymbol{a} | \boldsymbol{b} \rangle := \boldsymbol{a}^T \boldsymbol{b}. \tag{A.140}$$

Ist $\overleftrightarrow{A}$ eine reelle Matrix, so folgt

$$\left\langle \boldsymbol{a} \middle| \overleftrightarrow{A}\boldsymbol{b} \right\rangle = \boldsymbol{a}^T \overleftrightarrow{A}\boldsymbol{b} = \left(\overleftrightarrow{A}^T \boldsymbol{a}\right)^T \boldsymbol{b} = \left\langle \overleftrightarrow{A}^T \boldsymbol{a} \middle| \boldsymbol{b} \right\rangle. \tag{A.141}$$

Matrizen mit genauso vielen Zeilen wie Spalten bezeichnet man als *quadratisch*.

Operatoren sind Funktionen zwischen Funktionen. In der Meteorologie sind nur zwei Funktionenräume relevant:

$$F_1 = \{A \times \mathbb{R} \to \mathbb{R}, \text{ unendlich oft stetig-differenzierbar}\} \tag{A.142}$$

$$F_2 = \{A \times \mathbb{R} \to \mathbb{R}^3, \text{ unendlich oft stetig-differenzierbar}\} \tag{A.143}$$

Hierbei ist A die Atmosphäre. Operatoren werden mit einem Dachsymbol gekennzeichnet. Man definiert

$$\begin{aligned} & \hat{A} \text{ linearer Operator :} \\ \Leftrightarrow \quad & \hat{A}\left(\lambda\psi\right) = \lambda\hat{A}\left(\psi\right) \wedge \hat{A}\left(\psi_1 + \psi_2\right) = \hat{A}\left(\psi_1\right) + \hat{A}\left(\psi_2\right) \end{aligned} \tag{A.144}$$

für jedes $\lambda \in \mathbb{C}$. Seien $\hat{A}$ und $\hat{B}$ Operatoren, dann definiere

$$\hat{A}\hat{B} := \hat{A} \circ \hat{B} \tag{A.145}$$

Sind $\hat{A}$ und $\hat{B}$ linear, gilt

$$\hat{A}\left(\hat{B}\left(\lambda\psi\right)\right) = \hat{A}\left(\lambda\hat{B}\left(\psi\right)\right) = \lambda\hat{A}\left(\hat{B}\left(\psi\right)\right) \Leftrightarrow \hat{A}\hat{B}\left(\lambda\psi\right) = \lambda\hat{A}\hat{B}\left(\psi\right) \tag{A.146}$$

Weiterhin gilt

$$\hat{A}\hat{B}\left(\psi_1 + \psi_2\right) = \hat{A}\left(\hat{B}\left(\psi_1\right) + \hat{B}\left(\psi_2\right)\right) = \hat{A}\hat{B}\left(\psi_1\right) + \hat{A}\hat{B}\left(\psi_2\right). \tag{A.147}$$

Hintereinanderausführungen linearer Operatoren sind also linear. Weiterhin lässt man die Klammern um das

Argument bei Operatoren häufig weg:

$$\hat{A}\psi := \hat{A}\left(\psi\right) \tag{A.148}$$

Außerdem gilt

$$\begin{aligned}\left(\lambda_1\hat{A} + \lambda_2\hat{B}\right)\lambda\psi &= \lambda_1\hat{A}\lambda\psi + \lambda_2\hat{B}\lambda\psi = \lambda_1\lambda\hat{A}\psi + \lambda_2\lambda\hat{B}\psi = \lambda\left(\lambda_1\hat{A}\psi + \lambda_2\hat{B}\psi\right) \\ &= \lambda\left(\lambda_1\hat{A} + \lambda_2\hat{B}\right)\psi \end{aligned} \tag{A.149}$$

sowie

$$\begin{aligned}\left(\lambda_1\hat{A} + \lambda_2\hat{B}\right)\left(\psi_1 + \psi_2\right) &= \lambda_1\hat{A}\left(\psi_1 + \psi_2\right) + \lambda_2\hat{B}\left(\psi_1 + \psi_2\right) \\ &= \lambda_1\hat{A}\psi_1 + \lambda_1\hat{A}\psi_2 + \lambda_2\hat{B}\psi_1 + \lambda_2\hat{B}\psi_2 \\ &= \left(\lambda_1\hat{A} + \lambda_2\hat{B}\right)\psi_1 + \left(\lambda_1\hat{A} + \lambda_2\hat{B}\right)\psi_2. \end{aligned} \tag{A.150}$$

Linearkombinationen linearer Operatoren sind also linear. Da für partielle Ableitungen die normalen Ableitungsregeln gelten, erhält man

$$\frac{\partial}{\partial x_i}\lambda\psi = \lambda\frac{\partial}{\partial x_i}\psi \tag{A.151}$$

$$\frac{\partial}{\partial x_i}\left(\psi_1 + \psi_2\right) = \frac{\partial}{\partial x_i}\psi_1 + \frac{\partial}{\partial x_i}\psi_2, \tag{A.152}$$

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 $\left(x_1, x_2, x_3\right)$ drei kartesische Koordinaten und $\left(\boldsymbol{e}_1, \boldsymbol{e}_2, \boldsymbol{e}_3\right)$ die zugehörige Basis. Man definiert das Vektorprodukt $\boldsymbol{A} \times \boldsymbol{B}$ zweier Vektoren $\boldsymbol{A} = \left(A_1, A_2, A_3\right)^T$, $B = \left(B_1, B_2, B_3\right)^T$ durch

$$\boldsymbol{A} \times \boldsymbol{B} := \sum_{i,j,k=1}^{3} \varepsilon_{i,j,k} A_i B_j \boldsymbol{e}_k. \tag{A.153}$$

Dieses ist linear, denn für $\lambda \in \mathbb{R}$ und $\boldsymbol{C} \in \mathbb{R}^3$ gelten

$$\begin{aligned}\boldsymbol{A} \times (\boldsymbol{B} + \boldsymbol{C}) &= \sum_{i,j,k=1}^{3} \varepsilon_{i,j,k} A_i \left(B_j + C_j\right) \boldsymbol{e}_k = \sum_{i,j,k=1}^{3} \varepsilon_{i,j,k} A_i B_j \boldsymbol{e}_k + \sum_{i,j,k=1}^{3} \varepsilon_{i,j,k} A_i C_j \boldsymbol{e}_k \\ &= \boldsymbol{A} \times \boldsymbol{B} + \boldsymbol{A} \times \boldsymbol{C}, \end{aligned} \tag{A.154}$$

$$\boldsymbol{A} \times (\lambda\boldsymbol{B}) = \sum_{i,j,k=1}^{3} \varepsilon_{i,j,k} A_i \lambda B_j \boldsymbol{e}_k = \lambda\boldsymbol{A} \times \boldsymbol{B}. \tag{A.155}$$

Weiterhin ist es antikommutativ,

$$\boldsymbol{A} \times \boldsymbol{B} = \sum_{i,j,k=1}^{3} \varepsilon_{i,j,k} A_i B_j \boldsymbol{e}_k = \sum_{i,j,k=1}^{3} -\varepsilon_{j,i,k} B_j A_i \boldsymbol{e}_k = -\boldsymbol{B} \times \boldsymbol{A}. \tag{A.156}$$

Für die $l-$te Komponente, $1 \leq l \leq 3$, des Vektorproduktes findet man

$$(\boldsymbol{A} \times \boldsymbol{B})_l = \left(\sum_{i,j,k=1}^{3} \varepsilon_{i,j,k} A_i B_j \boldsymbol{e}_k\right) \cdot \boldsymbol{e}_l = \sum_{i,j,k=1}^{3} \varepsilon_{i,j,k} A_i B_j \delta_{k,l} = \sum_{i,j=1}^{3} \varepsilon_{i,j,l} A_i B_j. \tag{A.157}$$

Das Vektorprodukt hat die Orthogonalitätseigenschaften

$$\begin{aligned}\boldsymbol{A}\cdot(\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{B}) &= \sum_{i=1}^{3} A_i\,(\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{B})_i = \sum_{i=1}^{3} A_i \sum_{j,k=1}^{3} \varepsilon_{j,k,i} A_j B_k = \sum_{k=1}^{3} B_k \sum_{i,j=1}^{3} \varepsilon_{k,i,j} A_i A_j \\ &= \sum_{k=1}^{3} B_k \sum_{i,j=1}^{3} A_i A_j - A_j A_i = 0 \end{aligned} \tag{A.158}$$

sowie

$$\boldsymbol{B}\cdot(\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{B}) \overset{\text{Glg. (A.156)}}{=} -\boldsymbol{B}\cdot(\boldsymbol{B}\times\boldsymbol{A}) = -0 = 0. \tag{A.159}$$

Ferner gilt die sogenannte *Graßmann-Identität*:

$$\begin{aligned}\boldsymbol{A}\times(\boldsymbol{B}\times\boldsymbol{C}) &= \sum_{i,j,k=1}^{3} \varepsilon_{i,j,k} A_i\,(\boldsymbol{B}\times\boldsymbol{C})_j\,\boldsymbol{e}_k = \sum_{i,j,k=1}^{3} \varepsilon_{i,j,k} A_i \left(\sum_{l,m,n=1}^{3} \varepsilon_{l,m,n} B_l C_m \boldsymbol{e}_n\right)_j \boldsymbol{e}_k \\ &= \sum_{i,j,k=1}^{3} \varepsilon_{i,j,k} A_i \sum_{l,m=1}^{3} \varepsilon_{l,m,j} B_l C_m \boldsymbol{e}_k = \sum_{k=1}^{3} \boldsymbol{e}_k \sum_{i=1}^{3} A_i \sum_{j,l,m=1}^{3} \varepsilon_{j,k,i}\varepsilon_{j,l,m} B_l C_m \\ &= \sum_{k=1}^{3} \boldsymbol{e}_k \sum_{i=1}^{3} A_i\,(B_k C_i - B_i C_k) = \boldsymbol{B}\,(\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{C}) - \boldsymbol{C}\,(\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{B}) \end{aligned} \tag{A.160}$$

Dies bezeichnet man einprägsamerweise auch als *BAC-CAB-Regel*. Man kann weiterhin schreiben

$$\boldsymbol{B} \equiv \boldsymbol{B}_{\parallel} + \boldsymbol{B}_{\perp}, \tag{A.161}$$

wobei $\boldsymbol{B}_{\parallel}$ den zu $\boldsymbol{A}$ parallelen Anteil von $\boldsymbol{B}$ bezeichnen soll und

$$\boldsymbol{B}_{\perp} := \boldsymbol{B} - \boldsymbol{B}_{\parallel} \tag{A.162}$$

den verblebenden Anteil von $\boldsymbol{B}$, der senkrecht auf $\boldsymbol{A}$ steht, wie noch gezeigt werden wird. Es gilt

$$\boldsymbol{B}_{\parallel} = \left(\frac{1}{|\boldsymbol{A}|^2}\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{B}\right)\boldsymbol{A}. \tag{A.163}$$

Hieraus folgt

$$\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{B}_{\perp} = \boldsymbol{A}\cdot\left(\boldsymbol{B}-\boldsymbol{B}_{\parallel}\right) = \boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{B} - \boldsymbol{A}\cdot\left(\frac{1}{|\boldsymbol{A}|^2}\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{B}\right)\boldsymbol{A} = 0, \tag{A.164}$$

also steht $\boldsymbol{B}_{\perp}$ in der Tat senkrecht auf $\boldsymbol{A}$. Mit Glg. (A.160) kann man ferner notieren

$$\begin{aligned}\boldsymbol{A}\times(\boldsymbol{B}\times\boldsymbol{A}) &= \boldsymbol{B}A^2 - \boldsymbol{A}\,(\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{B}) = A^2\boldsymbol{B} - A^2\boldsymbol{B}_{\parallel} = A^2\boldsymbol{B}_{\perp} \\ \Rightarrow \boldsymbol{B}_{\perp} &= \frac{1}{A^2}\boldsymbol{A}\times(\boldsymbol{B}\times\boldsymbol{A})\,. \end{aligned} \tag{A.165}$$

B Vektoranalysis

B.1 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 $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^m$ differenzierbar. Dann ist die Ableitung eine Funktion $f' : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^{m \times n}$ und es gilt

$$(f')_{i,j} = \left(\frac{\partial f_i}{\partial x_j} \right). \tag{B.1}$$

Die Matrix $\overleftrightarrow{f}'$ heißt die *Jacobi-Matrix* von f. Insbesondere ergibt sich die Definition des Gradienten einer differenzierbaren skalaren Funktion $g : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ als Transponierte der Ableitung:

$$\operatorname{grad}(g) := (g')^T = \left(\frac{\partial g}{\partial x_i} \right) \tag{B.2}$$

Definiere den Nablaoperator ∇ durch

$$\nabla := \sum_{i=1}^{3} \boldsymbol{e}_i \frac{\partial}{\partial x_i}. \tag{B.3}$$

Seien $n, m \in \mathbb{N}$ mit $n, m \geq 1$ und eine differenzierbare Funktion $T : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^m$ gegeben und sei eine differenzierbare Kurve $r : \mathbb{R} \to \mathbb{R}^n$ gegeben. Man definiert eine Funktion $\tau : \mathbb{R} \to \mathbb{R}^m$ durch $\tau(t) := T(r(t))$. Für die Ableitung $\frac{d\tau}{dt} = \frac{d}{dt} T(r(t))$ gilt

$$\frac{d\tau}{dt} = T' \frac{dr}{dt}. \tag{B.4}$$

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 $\boldsymbol{r}(t) = (x(t), y(t), z(t), t)^T$ eine 4-Teilchentrajektorie ist, so ist $T(t) = T(\boldsymbol{r}(t)) = T(x(t), y(t), z(t), t)$ die Temperatur am Ort des Teilchens zur Zeit t. Mit der mehrdimensionalen Kettenregel gilt

$$\frac{dT}{dt} = \frac{\partial T}{\partial t} + \frac{dx}{dt}\frac{\partial T}{\partial x} + \frac{dy}{dt}\frac{\partial T}{\partial y} + \frac{dz}{dt}\frac{\partial T}{\partial z}. \tag{B.5}$$

Dies bezeichnet man als die *materielle Ableitung* oder *totale Ableitung*, weil hier die Eigenschaft eines festen Teilchens betrachtet wird. Man definiert einen Differenzialoperator

$$\frac{D}{Dt} := \frac{\partial}{\partial t} + u\frac{\partial}{\partial x} + v\frac{\partial}{\partial y} + w\frac{\partial}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial t} + \boldsymbol{v} \cdot \nabla \tag{B.6}$$

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

$$\frac{D}{Dt} = \frac{\partial}{\partial t} + \sum_{i=1}^{3} u_i \frac{\partial}{\partial x_i} \tag{B.7}$$

mit den generalisierten Geschwindigkeiten u_i. Die *Divergenz* div eines Vektorfeldes $\boldsymbol{w} = \left(w_1, w_2, w_3\right)^T$ definiert man durch

$$\operatorname{div}(\boldsymbol{w}) := \nabla \cdot \boldsymbol{w} = \sum_{i=1}^{3} \frac{\partial w_i}{\partial x_i}. \tag{B.8}$$

Der *Laplace-Operator* Δ eines Skalarfeldes ψ ist die Divergenz des Gradienten, also

$$\Delta\psi := \operatorname{div}\left(\operatorname{grad}\left(\psi\right)\right) = \nabla^2\psi = \sum_{i=1}^{3} \frac{\partial^2\psi}{\partial x_i^2}. \tag{B.9}$$

Der auf ein Vektorfeld angewandte Laplace-Operator wird definiert durch

$$\Delta\boldsymbol{w} := \sum_{i=1}^{3} \boldsymbol{e}_i \Delta w_i. \tag{B.10}$$

Die Rotation rot eines Vektorfeldes wird durch

$$\operatorname{rot}\left(\boldsymbol{w}\right) := \nabla \times \boldsymbol{w} = \sum_{i,j,k=1}^{3} \varepsilon_{i,j,k} \boldsymbol{e}_k \frac{\partial}{\partial x_i} w_j \tag{B.11}$$

definiert. Man definiert weiterhin den Operator der horizontalen materiellen Ableitung durch

$$\frac{D_h}{Dt} := \frac{\partial}{\partial t} + u\frac{\partial}{\partial x} + v\frac{\partial}{\partial y} = \frac{\partial}{\partial t} + \boldsymbol{v}_h \cdot \nabla \tag{B.12}$$

Analog definiert man den *horizontalen* $\nabla-$*Operator* durch

$$\nabla_h := \nabla - \boldsymbol{k} \cdot \nabla. \tag{B.13}$$

Der horizontale Laplace-Operator Δ_h ist definiert durch

$$\Delta_h := \frac{1}{r^2}\Delta_{\theta,\varphi} = \left(\nabla_h\right)^2 \tag{B.14}$$

mit dem Winkelanteil des Laplace-Operators, s. Glg. (B.107), und r als Kugelradius. Da die $i-$Komponente der Rotation die Rotation des betrachteten Vektorfeldes in der $x_{j,k}-$Ebene ist, kann man

$$\boldsymbol{k} \cdot \boldsymbol{w} \tag{B.15}$$

als Horizontalkomponente der Rotation des Vektorfeldes $\boldsymbol{w}$ auffassen. Der Operator

$$-\boldsymbol{v} \cdot \nabla \tag{B.16}$$

ist der *Advektionsoperator*, der auf Skalar- und Vektorfelder anwendbar ist. Der horizontale Anteil hiervon ist

$$-\boldsymbol{v}_h \cdot \nabla. \tag{B.17}$$

Hat man nämlich eine differenzielle Bilanzgleichung der Größe in der Form

$$\frac{D\psi}{Dt} = \sum_i F_i \tag{B.18}$$

gegeben mit physikalischen Forcings F_i, so folgt hieraus für die lokalzeitliche Änderung von ψ die Gleichung

$$\frac{\partial\psi}{\partial t} = -\boldsymbol{v} \cdot \nabla T + \sum_i F_i = -\boldsymbol{v}_h \cdot \nabla - w\frac{\partial L}{\partial z} + \sum_i F_i, \tag{B.19}$$

die *Advektion* ist also der Anteil der lokalzeitlichen Änderung, der durch Herantransport bewirkt wird.

B.1.1 Krümmungradius

Man stelle sich eine Trajektorie

$$\boldsymbol{r} : I \subseteq \mathbb{R} \to \mathbb{R}^2; a \mapsto (x, y)^T \tag{B.20}$$

vor, wobei I ein Intervall sei. Man betrachte hier nur ein kleines Teilstück

$$\boldsymbol{r} : I' \subseteq I \to \mathbb{R}^2; \tau \mapsto (x, y)^T, \tag{B.21}$$

I' sei ebenfalls ein Intervall, und definiere

$$\begin{aligned}
\tau_1 &:= \sup(I'), && \text{(B.22)}\\
\tau_2 &:= \sup(I'), && \text{(B.23)}\\
\boldsymbol{r}_1 = (x_1, y_1)^T &:= f(\tau_1), && \text{(B.24)}\\
\boldsymbol{r}_2 = (x_2, y_2)^T &:= f(\tau_2). && \text{(B.25)}\\
& && \text{(B.26)}
\end{aligned}$$

O. B. d. A. kann man den Ursprung des KS in $\boldsymbol{r}_1$ legen. Man sucht nun einen Punkt $\boldsymbol{r}_0 := (x_0, y_0)^T$, von dem gefordert wird, dass er zu $\boldsymbol{r}_1$ und $\boldsymbol{r}_2$ möglicht den gleichen Abstand $|r|$ habe, also

$$\begin{aligned}
\sqrt{(\boldsymbol{r}_1 - \boldsymbol{r}_0)^2} &\overset{!}{=} \sqrt{(\boldsymbol{r}_2 - \boldsymbol{r}_0)^2}, && \text{(B.27)}\\
\Rightarrow r_1^2 + r_0^2 - 2\boldsymbol{r}_1 \cdot \boldsymbol{r}_0 &= r_2^2 + r_0^2 - 2\boldsymbol{r}_2 \cdot \boldsymbol{r}_0, && \text{(B.28)}\\
\Rightarrow 0 &= r_2^2 - 2\boldsymbol{r}_2 \cdot \boldsymbol{r}_0. && \text{(B.29)}
\end{aligned}$$

Nun entwickelt man $\boldsymbol{r}_2$ bis zur zweiten Ordnung,

$$\boldsymbol{r}_2 = \boldsymbol{r}_1 + \frac{d\boldsymbol{r}}{d\tau}\Delta\tau + \frac{1}{2}\frac{d^2\boldsymbol{r}}{d\tau^2}\Delta\tau^2 + \mathcal{O}(\Delta\tau^3) \tag{B.30}$$

mit

$$\Delta\tau := \tau_2 - \tau_1, \tag{B.31}$$

wobei die Terme höherer Ordnung nun nicht mehr mitnotiert werden:

$$\begin{aligned}
x_2 &= x'\Delta\tau + \frac{1}{2}x''\Delta\tau^2 && \text{(B.32)}\\
y_2 &= y'\Delta\tau + \frac{1}{2}y''\Delta\tau^2 && \text{(B.33)}
\end{aligned}$$

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. (B.29) ein, folgt

$$\begin{aligned}
0 = {} & x'^2\Delta\tau^2 + \frac{1}{4}x''^2\Delta\tau^4 + x'x''\Delta\tau^3 + y'^2\Delta\tau^2 + \frac{1}{4}y''^2\Delta\tau^4 + y'y''\Delta\tau^3\\
& -2x'\Delta\tau x_0 - x''\Delta\tau^2 x_0 - 2y'\Delta\tau y_0 - y''\Delta\tau^2 y_0. && \text{(B.34)}
\end{aligned}$$

Die erste Ordnung von $\Delta\tau$ impliziert:

$$2x'x_0 + 2y'y_0 = 0 \tag{B.35}$$

Die zweite Ordnung von $\Delta\tau$ impliziert:

$$x''x_0 + y''y_0 = x'^2 + y'^2 \tag{B.36}$$

Aus Glg. (B.35) folgt

$$x_0 = -\frac{y'y_0}{x'}. \tag{B.37}$$

In Glg. (B.36) eingestzt ergibt dies

$$\begin{aligned}
-x''y'\frac{y_0}{x'} + y''y_0 &= x'^2 + y'^2\\
\Rightarrow y_0 &= \frac{x'^2 + y'^2}{y'' - x''\frac{y'}{x'}}. && \text{(B.38)}
\end{aligned}$$

Mit Glg. (B.37) folgt

$$x_0 = -\frac{y'}{x'}\frac{x'^2 + y'^2}{y'' - x''\frac{y'}{x'}}. \tag{B.39}$$

Somit folgt für den Betrag des Krümmungsradius

$$|r| = \sqrt{1 + \frac{y'^2}{x'^2}}\frac{x'^2 + y'^2}{\left|y'' - x''\frac{y'}{x'}\right|}. \tag{B.40}$$

O. B. d. A. kann man $\tau = x$ setzen, daraus folgen

$$x' = 1, \tag{B.41}$$
$$x'' = 0. \tag{B.42}$$

Somit gilt

$$|r| = \sqrt{1 + y'^2}\frac{1 + y'^2}{|y''|}$$
$$\Rightarrow |r| = \frac{(1 + y'^2)^{3/2}}{|y''|}. \tag{B.43}$$

Bezüglich des Vorzeichens von r legt man fest, dass dieses positiv seins soll, falls sich die Trajektorie nach links krümmt, also

$$r = \frac{(1 + y'^2)^{3/2}}{y''}. \tag{B.44}$$

Benötigt man einen linearen Ausdruck für $1/r$, verwendet man meist

$$\frac{1}{r} \approx y''. \tag{B.45}$$

B.1.2 Rechenregeln für Differenzialoperatoren

Seien $\boldsymbol{u}, \boldsymbol{v}, \boldsymbol{w} : \mathbb{R}^3 \to \mathbb{R}^3$ mit $\boldsymbol{u} = \left(u_1, u_2, u_3\right)^T$, $\boldsymbol{v} = \left(v_1, v_2, v_3\right)^T$ und $\boldsymbol{w} = \left(w_1, w_2, w_3\right)^T$ drei Vektorfelder, $\psi, \chi : \mathbb{R}^3 \to \mathbb{R}$ zwei Skalarfelder und $\lambda \in \mathbb{C}$ ein Skalar. Es wird definiert

$$\Delta \boldsymbol{v} := \sum_{i=1}^{3} \Delta v_i \boldsymbol{e}_i. \tag{B.46}$$

Es gelten

$$\nabla\left(\psi + \chi\right) = \nabla\psi + \nabla\chi, \tag{B.47}$$
$$\nabla \times (\boldsymbol{v} + \boldsymbol{w}) = \nabla \times \boldsymbol{v} + \nabla \times \boldsymbol{w}, \tag{B.48}$$

$$\nabla\left(\lambda\psi\right) = \lambda\nabla\psi, \tag{B.49}$$
$$\nabla \times (\lambda\boldsymbol{v}) = \lambda\nabla \times \boldsymbol{v} \tag{B.50}$$

nach den Feststellungen in Absch. A.8. Weiterhin gelten

$$\nabla \times \nabla \psi = \sum_{i,j,k=1}^{3} \varepsilon_{i,j,k} \frac{\partial}{\partial x_i} \frac{\partial \psi}{\partial x_j} \boldsymbol{e}_k = \sum_{i,j,k=1}^{3} \varepsilon_{i,j,k} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x_i \partial x_j} \boldsymbol{e}_k = 0, \tag{B.51}$$

$$\nabla \cdot \nabla \times \boldsymbol{v} = \left(\sum_{l=1}^{3} \boldsymbol{e}_l \frac{\partial}{\partial x_l} \right) \cdot \left(\sum_{i,j,k=1}^{3} \varepsilon_{i,j,k} \frac{\partial}{\partial x_i} v_j \boldsymbol{e}_k \right) = \sum_{i,j,k=1}^{3} \varepsilon_{i,j,k} \frac{\partial^2 v_j}{\partial x_k \partial x_i} = 0, \tag{B.52}$$

$$\nabla \cdot (\psi \boldsymbol{v}) = \sum_{i=1}^{3} \frac{\partial}{\partial x_i} (\psi v_i) = \sum_{i=1}^{3} v_i \frac{\partial \psi}{\partial x_i} + \psi \frac{\partial v_i}{\partial x_i} = \boldsymbol{v} \cdot \nabla \psi + \psi \nabla \cdot \boldsymbol{v}, \tag{B.53}$$

$$\frac{\partial}{\partial x_i} \nabla \times \boldsymbol{v} = \frac{\partial}{\partial x_i} \sum_{j,k.l=1}^{3} \varepsilon_{j,k,l} \frac{\partial}{\partial x_j} v_k \boldsymbol{e}_l = \sum_{j,k,l=1}^{3} \varepsilon_{j,k,l} \frac{\partial}{\partial x_j} \frac{\partial v_k}{\partial x_i} \boldsymbol{e}_l = \nabla \times \frac{\partial}{\partial x_i} \boldsymbol{v}, \tag{B.54}$$

$$\begin{aligned}
\nabla \times \psi \boldsymbol{v} &= \sum_{i,j,k=1}^{3} \varepsilon_{i,j,k} \frac{\partial}{\partial x_i} (\psi v_j) \boldsymbol{e}_k = \sum_{i,j,k=1}^{3} \varepsilon_{i,j,k} \left(v_j \frac{\partial \psi}{\partial x_i} + \psi \frac{\partial v_j}{\partial x_i} \right) \boldsymbol{e}_k \\
&= \sum_{i,j,k=1}^{3} \varepsilon_{i,j,k} \frac{\partial \psi}{\partial x_i} v_j \boldsymbol{e}_k + \sum_{i,j,k=1}^{3} \psi \frac{\partial}{\partial x_i} v_j \boldsymbol{e}_k = (\nabla \psi) \times \boldsymbol{v} + \psi \nabla \times \boldsymbol{v} \\
&= -\boldsymbol{v} \times \nabla \psi + \psi \nabla \times \boldsymbol{v},
\end{aligned} \tag{B.55}$$

$$\begin{aligned}
\nabla (\boldsymbol{v} \cdot \boldsymbol{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) \boldsymbol{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) \boldsymbol{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) \boldsymbol{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) \boldsymbol{e}_i \\
&= \sum_{i,j=1}^{3} w_j \frac{\partial v_i}{\partial x_j} \boldsymbol{e}_i + \sum_{i,j=1}^{3} v_j \frac{\partial w_i}{\partial x_j} \boldsymbol{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) \boldsymbol{e}_i \\
&= \sum_{j=1}^{3} w_j \frac{\partial}{\partial x_j} \sum_{i=1}^{3} v_i \boldsymbol{e}_i + \sum_{j=1}^{3} v_j \frac{\partial}{\partial x_j} \sum_{i=1}^{3} w_i \boldsymbol{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) \boldsymbol{e}_k \\
&= (\boldsymbol{w} \cdot \nabla) \boldsymbol{v} + (\boldsymbol{v} \cdot \nabla) \boldsymbol{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) \boldsymbol{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) \boldsymbol{e}_k \\
&= (\boldsymbol{v} \cdot \nabla) \boldsymbol{w} + (\boldsymbol{w} \cdot \nabla) \boldsymbol{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) \boldsymbol{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) \boldsymbol{e}_k \\
&= (\boldsymbol{v} \cdot \nabla) \boldsymbol{w} + (\boldsymbol{w} \cdot \nabla) \boldsymbol{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) \boldsymbol{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) \boldsymbol{e}_k \\
&= (\boldsymbol{v} \cdot \nabla) \boldsymbol{w} + (\boldsymbol{w} \cdot \nabla) \boldsymbol{v} + \sum_{i,j,k=1}^{3} \varepsilon_{i,j,k} v_i (\nabla \times \boldsymbol{w})_j \boldsymbol{e}_k + \sum_{i,j,k=1}^{3} \varepsilon_{i,j,k} w_i (\nabla \times \boldsymbol{v})_j \boldsymbol{e}_k \\
&= (\boldsymbol{v} \cdot \nabla) \boldsymbol{w} + (\boldsymbol{w} \cdot \nabla) \boldsymbol{v} + \boldsymbol{v} \times (\nabla \times \boldsymbol{w}) + \boldsymbol{w} \times (\nabla \times \boldsymbol{v}),
\end{aligned} \tag{B.56}$$

$$
\begin{aligned}
\nabla \times (\boldsymbol{v} \times \boldsymbol{w}) &= \sum_{i,j,k=1}^{3} \varepsilon_{i,j,k} \frac{\partial}{\partial x_i} (\boldsymbol{v} \times \boldsymbol{w})_j \boldsymbol{e}_k = \sum_{i,j,k=1}^{3} \varepsilon_{i,j,k} \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\varepsilon_{ikj} v_i w_k + \varepsilon_{kij} v_k w_i\right) \boldsymbol{e}_k \\
&= \sum_{i,j,k=1}^{3} \varepsilon_{i,j,k}^2 \frac{\partial}{\partial x_i} (v_k w_i - v_i w_k) \boldsymbol{e}_k = \sum_{i,k=1}^{3} \frac{\partial}{\partial x_i} (v_k w_i - v_i w_k) \boldsymbol{e}_k \\
&= \sum_{i,k=1}^{3} \left(\frac{\partial v_k}{\partial x_i} w_i + v_k \frac{\partial w_i}{\partial x_i} - v_i \frac{\partial w_k}{\partial x_i} - w_k \frac{\partial v_i}{\partial x_i} \right) \boldsymbol{e}_k = \sum_{i=1}^{3} w_i \frac{\partial}{\partial x_i} \sum_{k=1}^{3} v_k \boldsymbol{e}_k - \sum_{i=1}^{3} v_i \frac{\partial}{\partial x_i} \sum_{k=1}^{3} w_k \boldsymbol{e}_k \\
&\quad + \sum_{i=1}^{3} \frac{\partial w_i}{\partial x_i} \sum_{k=1}^{3} v_k \boldsymbol{e}_k - \sum_{i=1}^{3} \frac{\partial v_i}{\partial x_i} \sum_{k=1}^{3} w_k \boldsymbol{e}_k \\
&= (\boldsymbol{w} \cdot \nabla) \boldsymbol{v} - \boldsymbol{w} (\nabla \cdot \boldsymbol{v}) + \boldsymbol{v} (\nabla \cdot \boldsymbol{w}) - (\boldsymbol{v} \cdot \nabla) \boldsymbol{w},
\end{aligned} \tag{B.57}
$$

$$
\begin{aligned}
\nabla (\nabla \cdot \boldsymbol{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} \boldsymbol{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) \boldsymbol{e}_i \\
&= \Delta \boldsymbol{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) \boldsymbol{e}_i = \Delta \boldsymbol{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) \boldsymbol{e}_i \\
&= \Delta \boldsymbol{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) \boldsymbol{e}_i = \Delta \boldsymbol{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] \boldsymbol{e}_i \\
&= \Delta \boldsymbol{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 \boldsymbol{v})_k \right] \boldsymbol{e}_i = \Delta \boldsymbol{v} + \sum_{i,j,k=1}^{3} \varepsilon_{i,j,k} \frac{\partial}{\partial x_j} (\nabla \times \boldsymbol{v})_k \boldsymbol{e}_i \\
&= \Delta \boldsymbol{v} + \sum_{i,j,k=1}^{3} \varepsilon_{i,j,k} \frac{\partial}{\partial x_i} (\nabla \times \boldsymbol{v})_j \boldsymbol{e}_k \\
&= \Delta \boldsymbol{v} + \sum_{i,j,k=1}^{3} \left(\nabla \times \varepsilon_{i,j,k} \frac{\partial}{\partial x_i} \boldsymbol{v} \right)_j \boldsymbol{e}_k = \Delta \boldsymbol{v} + \nabla \times \left(\sum_{i,j,k=1}^{3} \varepsilon_{i,j,k} \frac{\partial}{\partial x_i} \boldsymbol{v} \right)_j \boldsymbol{e}_k \\
&= \Delta \boldsymbol{v} + \nabla \times \sum_{i,j,k=1}^{3} \varepsilon_{i,j,k} \frac{\partial}{\partial x_i} v_j \boldsymbol{e}_k = \Delta \boldsymbol{v} + \nabla \times (\nabla \times \boldsymbol{v}),
\end{aligned} \tag{B.58}
$$

$$
\begin{aligned}
\nabla \cdot (\boldsymbol{v} \times \boldsymbol{w}) &= \sum_{i=1}^{3} \frac{\partial}{\partial x_i} (\boldsymbol{v} \times \boldsymbol{w})_i = \sum_{i=1}^{3} \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\varepsilon_{k,j,i} v_k w_j + \varepsilon_{j,k,i} v_j w_k \right) \\
&= \sum_{i=1}^{3} \left(\varepsilon_{k,j,i} \frac{\partial v_k}{\partial x_i} w_j + \varepsilon_{k,j,i} v_k \frac{\partial w_j}{\partial x_i} + \varepsilon_{j,k,i} \frac{\partial v_j}{\partial x_i} w_k + \varepsilon_{j,k,i} v_j \frac{\partial w_k}{\partial x_i} \right) \\
&= \sum_{i=1}^{3} w_i \left(\varepsilon_{k,j,i} \frac{\partial v_j}{\partial x_k} + \varepsilon_{j,k,i} \frac{\partial v_k}{\partial x_j} \right) - v_i \left(\varepsilon_{k,j,i} \frac{\partial w_j}{\partial x_k} + \varepsilon_{j,k,i} \frac{\partial w_k}{\partial x_j} \right) \\
&= \sum_{i=1}^{3} w_i (\nabla \times \boldsymbol{v})_i - v_i (\nabla \times \boldsymbol{w})_i = \boldsymbol{w} \cdot (\nabla \times \boldsymbol{v}) - \boldsymbol{v} \cdot (\nabla \times \boldsymbol{w}),
\end{aligned} \tag{B.59}
$$

$$
\begin{aligned}
\boldsymbol{v} \cdot \left[(\boldsymbol{v} \cdot \nabla) \nabla \psi \right] &= \sum_{i=1}^{3} u_i \left[(\boldsymbol{v} \cdot \nabla) \nabla \psi \right]_i = \sum_{i=1}^{3} u_i \left[(\boldsymbol{v} \cdot \nabla) \frac{\partial \psi}{\partial x_i} \right] = \sum_{i=1}^{3} u_i \sum_{j=1}^{3} v_j \frac{\partial^2 \psi}{\partial x_j \partial x_i} \\
&= \sum_{i,j=1}^{3} u_i v_j \frac{\partial^2 \psi}{\partial x_j \partial x_i} = \sum_{i,j=1}^{3} v_i u_j \frac{\partial^2 \psi}{\partial x_j \partial x_i} = \sum_{i=1}^{3} v_i \sum_{j=1}^{3} u_j \frac{\partial}{\partial x_j} (\nabla \psi)_i \\
&= \sum_{i=1}^{3} v_i \left[(\boldsymbol{v} \cdot \nabla) \nabla \psi \right]_i = \boldsymbol{v} \cdot \left[(\boldsymbol{v} \cdot \nabla) \nabla \psi \right].
\end{aligned} \tag{B.60}
$$

Außerdem gilt

$$(\boldsymbol{v}\cdot\nabla)\,\boldsymbol{v} \overset{\text{Glg. (B.56)}}{=} \frac{1}{2}\nabla\left(\boldsymbol{v}\cdot\boldsymbol{v}\right) - \boldsymbol{v}\times\left(\nabla\times\boldsymbol{v}\right). \tag{B.61}$$

Dies bezeichnet man als *Lamb-Transformation*. Weiterhin gilt für die Advektion eines Skalarproduktes

$$\begin{aligned}(\boldsymbol{u}\cdot\nabla)\,(\boldsymbol{v}\cdot\boldsymbol{w}) &= \left(\sum_{i=1}^{3} u_i\frac{\partial}{\partial x_i}\right)\left(\sum_{j=1}^{3} v_j w_j\right) = \sum_{i,j=1}^{3} u_i\left[\frac{\partial v_j}{\partial x_i}w_j + \frac{\partial w_j}{\partial x_i}v_j\right]\\ &= \sum_{j=1}^{3} w_j\sum_{i=1}^{3} u_i\frac{\partial v_j}{\partial x_i} + \sum_{j=1}^{3} v_j\sum_{i=1}^{3} u_i\frac{\partial w_j}{\partial x_i} = \boldsymbol{w}\cdot\left[(\boldsymbol{u}\cdot\nabla)\,\boldsymbol{v}\right] + \boldsymbol{v}\cdot\left[(\boldsymbol{u}\cdot\nabla)\,\boldsymbol{w}\right].\end{aligned} \tag{B.62}$$

Seien $\boldsymbol{k} = \left(k_1, k_2, k_3\right)^T \in \mathbb{C}^3$ und $\varphi : \mathbb{R}^3 \to \mathbb{C}; \varphi\left(\boldsymbol{r}\right) = \exp\left(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}\right)$. Dann gelten

$$\begin{aligned}\nabla\varphi\left(\boldsymbol{r}\right) &= \sum_{i=1}^{3}\frac{\partial}{\partial x_i}\varphi\left(\boldsymbol{r}\right)\boldsymbol{e}_i = \sum_{i=1}^{3}\frac{\partial}{\partial x_i}\exp\left(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}\right)\boldsymbol{e}_i = \sum_{i=1}^{3}\frac{\partial}{\partial x_i}\exp\left(\sum_{j=1}^{3}k_j x_j\right)\boldsymbol{e}_i\\ &= \sum_{i=1}^{3} k_i\exp\left(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}\right)\boldsymbol{e}_i = \varphi\left(\boldsymbol{r}\right)\boldsymbol{k},\end{aligned} \tag{B.63}$$

$$\Delta\varphi\left(\boldsymbol{r}\right) = \nabla\cdot\nabla\varphi\left(\boldsymbol{r}\right) = \nabla\cdot\left(\varphi\left(\boldsymbol{r}\right)\boldsymbol{k}\right) = \boldsymbol{k}\cdot\nabla\varphi = \boldsymbol{k}^2\varphi\left(\boldsymbol{r}\right). \tag{B.64}$$

B.2 Differenzialoperatoren unter Koordinatentransformationen

Allgemein bezeichnet man Punkte im $\mathbb{R}^3$ durch drei reelle Zahlen $x = \left(x_1, x_2, x_3\right)$, die in Linearkombination mit der Standardbasis $\boldsymbol{c}_1, \boldsymbol{c}_2, \boldsymbol{c}_3$ einen Vektor $\boldsymbol{r}$ ergeben:

$$\boldsymbol{r} = x_1\boldsymbol{c}_1 + x_2\boldsymbol{c}_2 + x_3\boldsymbol{c}_3 \tag{B.65}$$

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 $q = \left(q_1, q_2, q_3\right)$. 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 $\boldsymbol{v}$ in generalisierten Koordinaten notieren, so wäre die einfachste Idee, auch die Werte von $\boldsymbol{v}$ in generalisierten Koordinaten zu notieren. Ist $\boldsymbol{v}$ ein Geschwindigkeitsfeld, so könnte man die Werte von $\boldsymbol{v}$ in den Formen $\dot{q}$ oder $\boldsymbol{v} \equiv \boldsymbol{r}(q)$ notieren. Da dies häufig unanschaulich ist, führt man in allgemeinen Koordinatensystemen (man sagt auch in *krummlinigen Koordinaten*) eine ortsabhängige Basis ein, deren Elemente definiert sind durch

$$\boldsymbol{e}_i := \frac{1}{\left|\frac{\partial\boldsymbol{r}}{\partial q_i}\right|}\frac{\partial\boldsymbol{r}}{\partial q_i}. \tag{B.66}$$

Diese Elemente sind normiert. Lässt sich

$$\boldsymbol{e}_1 \times \boldsymbol{e}_2 = \boldsymbol{e}_3 \tag{B.67}$$

durch Vertauschen der $\boldsymbol{e}_i$ erreichen, bezeichnet man die q als *orthogonal*; Koordnaten, die dies verletzen werden in diesem Buch nicht behandelt. Man schreibt dann für Vektorfelder

$$\boldsymbol{v} = \sum_{i=1}^{3} v_i\boldsymbol{e}_i, \tag{B.68}$$

wobei sowohl die v_i als auch die $\boldsymbol{e}_i$ vom Ort abhängen. Man definiert partielle Ableitungen bezüglich der lokalen Basis durch Richtungsableitungen entlang der lokalen Koordinatenachsen:

$$\frac{\partial}{\partial x_i} := \boldsymbol{e}_i\cdot\nabla = \frac{1}{\left|\frac{\partial\boldsymbol{r}}{\partial q_i}\right|}\left(\frac{\partial x}{\partial q_i}\frac{\partial}{\partial x} + \frac{\partial y}{\partial q_i}\frac{\partial}{\partial y} + \frac{\partial z}{\partial q_i}\frac{\partial}{\partial z}\right) = \frac{1}{\left|\frac{\partial\boldsymbol{r}}{\partial q_i}\right|}\frac{\partial}{\partial q_i}. \tag{B.69}$$

Seien $\boldsymbol{v}$, $\boldsymbol{w}$ zwei Vektorfelder, dann gilt für das Skalarprodukt

$$\boldsymbol{v} \cdot \boldsymbol{w} = v^{(m)} w^{(n)} g_{m,n}. \tag{B.70}$$

Für das Vektorprodukt gilt

$$\boldsymbol{v} \times \boldsymbol{w} = \begin{vmatrix} \boldsymbol{q}_2 \times \boldsymbol{q}_3 & \boldsymbol{q}_3 \times \boldsymbol{q}_1 & \boldsymbol{q}_1 \times \boldsymbol{q}_2 \\ v^{(1)} & v^{(2)} & v^{(3)} \\ w^{(1)} & w^{(2)} & w^{(3)} \end{vmatrix} \tag{B.71}$$

Sei f ein Skalarfeld, dann gilt für den Gradienten von f in generalisierten Koordinaten

$$\nabla f = \boldsymbol{q}^{(n)} \frac{\partial}{\partial q^{(n)}} = \boldsymbol{q}^{(n)} \nabla_n f. \tag{B.72}$$

Somit gilt in generalisierten Koordinaten

$$\nabla \cdot \boldsymbol{v} = \frac{1}{\sqrt{g}} \frac{\partial}{\partial q^{(n)}} \left(\boldsymbol{q}^{(n)} \cdot \boldsymbol{v} \sqrt{g} \right). \tag{B.73}$$

Es gilt also

$$\nabla \times \boldsymbol{v} = \frac{1}{\sqrt{g}} \begin{vmatrix} \boldsymbol{q}_1 & \boldsymbol{q}_2 & \boldsymbol{q}_3 \\ \frac{\partial}{\partial q^{(1)}} & \frac{\partial}{\partial q^{(2)}} & \frac{\partial}{\partial q^{(3)}} \\ v_1 & v_2 & v_3 \end{vmatrix} \tag{B.74}$$

B.2.1 Kugelkoordinaten

In diesem Abschnitt sind $\boldsymbol{v}$ ein Vektorfeld und f ein Skalarfeld, beide sollen alle notwendigen Eigenschaften haben. In Kugelkoordinaten gilt

$$\boldsymbol{r} = r \begin{pmatrix} \sin(\theta) \cos(\varphi) \\ \sin(\theta) \sin(\varphi) \\ \cos(\theta) \end{pmatrix}. \tag{B.75}$$

Sei $\boldsymbol{r} = \boldsymbol{r}(r, \theta, \varphi)$ die Transformation von Kugel- in kartesische Koordinaten, dann gilt für deren Ableitung $\overleftrightarrow{J}$ die Gleichung

$$\overleftrightarrow{J} = \begin{pmatrix} \frac{\partial x}{\partial r} & \frac{\partial x}{\partial \theta} & \frac{\partial x}{\partial \varphi} \\ \frac{\partial y}{\partial r} & \frac{\partial y}{\partial \theta} & \frac{\partial y}{\partial \varphi} \\ \frac{\partial z}{\partial r} & \frac{\partial z}{\partial \theta} & \frac{\partial z}{\partial \varphi} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sin(\theta) \cos(\varphi) & r\cos(\theta) \cos(\varphi) & -r\sin(\theta) \sin(\varphi) \\ \sin(\theta) \sin(\varphi) & r\cos(\theta) \sin(\varphi) & r\sin(\theta) \cos(\varphi) \\ \cos(\theta) & -r\sin(\theta) & 0 \end{pmatrix}. \tag{B.76}$$

Die normierten Spalten hiervon sind

$$\boldsymbol{e}_r = \boldsymbol{e}^{(r)} = \begin{pmatrix} \sin(\theta) \cos(\varphi) \\ \sin(\theta) \sin(\varphi) \\ \cos(\theta) \end{pmatrix}, \tag{B.77}$$

$$\boldsymbol{e}_\theta = \boldsymbol{e}^{(\theta)} = \begin{pmatrix} \cos(\theta) \cos(\varphi) \\ \cos(\theta) \sin(\varphi) \\ -\sin(\theta) \end{pmatrix}, \tag{B.78}$$

$$\boldsymbol{e}_\varphi = \boldsymbol{e}^{(\varphi)} = \begin{pmatrix} -\sin(\varphi) \\ \cos(\varphi) \\ 0 \end{pmatrix}. \tag{B.79}$$

Die Spalten von $\overleftrightarrow{J}$ sind die kovarianten Basisvektoren

$$\boldsymbol{q}_r = \begin{pmatrix} \sin(\theta)\cos(\varphi) \\ \sin(\theta)\sin(\varphi) \\ \cos(\theta) \end{pmatrix}, \tag{B.80}$$

$$\boldsymbol{q}_\theta = r\begin{pmatrix} \cos(\theta)\cos(\varphi) \\ \cos(\theta)\sin(\varphi) \\ -\sin(\theta) \end{pmatrix}, \tag{B.81}$$

$$\boldsymbol{q}_\varphi = r\sin(\theta)\begin{pmatrix} -\sin(\varphi) \\ \cos(\varphi) \\ 0 \end{pmatrix}. \tag{B.82}$$

Hieraus ergibt sich für die Determinante g des metrischen Tensors

$$g = \begin{vmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & r^2 & 0 \\ 0 & 0 & r^2\sin^2(\theta) \end{vmatrix} = r^4\sin^2(\theta). \tag{B.83}$$

Da diese Matrix diagonal ist, sind Kugelkoordinaten orthogonal. Somit gilt für die kontravarianten Basisvektoren

$$\boldsymbol{q}^{(r)} = \begin{pmatrix} \sin(\theta)\cos(\varphi) \\ \sin(\theta)\sin(\varphi) \\ \cos(\theta) \end{pmatrix}, \tag{B.84}$$

$$\boldsymbol{q}^{(\theta)} = \frac{1}{r}\begin{pmatrix} \cos(\theta)\cos(\varphi) \\ \cos(\theta)\sin(\varphi) \\ -\sin(\theta) \end{pmatrix}, \tag{B.85}$$

$$\boldsymbol{q}^{(\varphi)} = \frac{1}{r\sin(\theta)}\begin{pmatrix} -\sin(\varphi) \\ \cos(\varphi) \\ 0 \end{pmatrix}. \tag{B.86}$$

Man schreibt nun für ein Vektorfeld

$$\begin{aligned} \boldsymbol{v} &= v^{(r)}\boldsymbol{q}_r + v^{(\theta)}\boldsymbol{q}_\theta + v^{(\varphi)}\boldsymbol{q}_\varphi = v_r\boldsymbol{q}^{(r)} + v_\theta\boldsymbol{q}^{(\theta)} + v_\varphi\boldsymbol{q}^{(\varphi)} \\ &= \widetilde{v}^{(r)}\boldsymbol{e}_r + \widetilde{v}^{(\theta)}\boldsymbol{e}_\theta + \widetilde{v}^{(\varphi)}\boldsymbol{e}_\varphi = \widetilde{v}_r\boldsymbol{e}^{(r)} + \widetilde{v}_\theta\boldsymbol{e}^{(\theta)} + \widetilde{v}_\varphi\boldsymbol{e}^{(\varphi)}. \end{aligned} \tag{B.87}$$

Man mache sich an dieser Stelle klar, dass die Dimensionen der hier in der ersten Zeile auftretenden Komponenten von $\boldsymbol{v}$ nicht uniform sind, da es sich für die Bassielemente ebenso verhält. Aufgrund der Orthogonalität der Kugelkoordinaten gilt

$$\widetilde{v}^{(r)} = \widetilde{v}_r, \tag{B.88}$$

$$\widetilde{v}^{(\theta)} = \widetilde{v}_\theta, \tag{B.89}$$

$$\widetilde{v}^{(\varphi)} = \widetilde{v}_\varphi. \tag{B.90}$$

Die Umrechung der Komponenten lautet

$$v_r = \widetilde{v}_r, \tag{B.91}$$

$$v_\theta = r\widetilde{v}_\theta, \tag{B.92}$$

$$v_\varphi = r\sin(\theta)\,\widetilde{v}_\varphi, \tag{B.93}$$

$$v^{(r)} = \widetilde{v}_r, \tag{B.94}$$

$$v^{(\theta)} = \frac{1}{r}\widetilde{v}_\theta, \tag{B.95}$$

$$v^{(\varphi)} = \frac{1}{r\sin(\theta)}\widetilde{v}_\varphi. \tag{B.96}$$

Zunächst wird der Gradient betrachtet, mit Glg. (B.72) erhält man

$$\nabla f = \boldsymbol{q}^{(r)}\frac{\partial f}{\partial r} + \boldsymbol{q}^{(\theta)}\frac{\partial f}{\partial \theta} + \boldsymbol{q}^{(\varphi)}\frac{\partial f}{\partial \varphi} = \boldsymbol{e}^{(r)}\frac{\partial f}{\partial r} + \frac{1}{r}\boldsymbol{e}^{(\theta)}\frac{\partial f}{\partial \theta} + \frac{1}{r\sin(\theta)}\boldsymbol{e}^{(\varphi)}\frac{\partial f}{\partial \varphi}. \tag{B.97}$$

Nun wird die Divergenz betrachtet. Vm Glg. (B.73) anwenden zu können, rechnet man zunächst

$$\boldsymbol{q}^{(r)} \cdot \boldsymbol{v} = v^{(r)}, \tag{B.98}$$
$$\boldsymbol{q}^{(\theta)} \cdot \boldsymbol{v} = v^{(\theta)}, \tag{B.99}$$
$$\boldsymbol{q}^{(\varphi)} \cdot \boldsymbol{v} = v^{(\varphi)}. \tag{B.100}$$

Somit gilt

$$\begin{aligned}
\nabla \cdot \boldsymbol{v} &= \frac{1}{r^2 \sin(\theta)} \left(\frac{\partial \left(v^{(r)} r^2 \sin(\theta) \right)}{\partial r} + \frac{\partial \left(v^{(\theta)} r^2 \sin(\theta) \right)}{\partial \theta} + \frac{\partial \left(v^{(\varphi)} r^2 \sin(\theta) \right)}{\partial \varphi} \right) \\
&= \frac{\partial v^{(r)}}{\partial r} + \frac{\partial v^{(\theta)}}{\partial \theta} + \frac{\partial v^{(\varphi)}}{\partial \varphi} + \frac{2 v^{(r)}}{r} + \cot(\theta)\, v^{(\theta)} \\
&= \frac{\partial \widetilde{v}^{(r)}}{\partial r} + \frac{1}{r} \frac{\partial \widetilde{v}^{(\theta)}}{\partial \theta} + \frac{1}{r \sin(\theta)} \frac{\partial \widetilde{v}^{(\varphi)}}{\partial \varphi} + \frac{2 \widetilde{v}^{(r)}}{r} + \frac{\cot(\theta)}{r} \widetilde{v}^{(\theta)}.
\end{aligned} \tag{B.101}$$

Durch eine Kombination der Glg.en (B.97) und (B.101) folgt für den Laplace-Operator

$$\begin{aligned}
\Delta f &= \frac{\partial^2 f}{\partial r^2} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 f}{\partial \theta^2} + \frac{1}{r^2 \sin^2(\theta)} \frac{\partial^2 f}{\partial \varphi^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial f}{\partial r} + \frac{\cot(\theta)}{r^2} \frac{\partial f}{\partial \theta} \\
&= \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial f}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin(\theta)} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin(\theta) \frac{\partial f}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2(\theta)} \frac{\partial^2 f}{\partial \varphi^2}.
\end{aligned} \tag{B.102}$$

Dies kann man noch etwas umformen. Man verwendet hierfür den Diffeomorphismus

$$\theta \leftrightarrow \mu := \cos(\theta), \tag{B.103}$$

dann gilt

$$\frac{d}{d\theta} = \frac{d\mu}{d\theta} \frac{d}{d\mu} = -\sin(\theta) \frac{d}{d\mu}. \tag{B.104}$$

Damit wird der Laplace-Operator zu

$$\begin{aligned}
\Delta &= \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin(\theta)} \left(-\sin(\theta) \frac{\partial}{\partial \mu} \right) \left(\sin(\theta) \left(-\sin(\theta) \frac{d}{d\mu} \right) \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2(\theta)} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \\
&= \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial \mu} \left(1 - \mu^2 \right) \frac{\partial}{\partial \mu} + \frac{1}{r^2 \left(1 - \mu^2 \right)} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \\
&= \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \Delta_{\mu,\varphi}
\end{aligned} \tag{B.105}$$

mit

$$\Delta_{\mu,\varphi} = \frac{\partial}{\partial \mu} \left(1 - \mu^2 \right) \frac{\partial}{\partial \mu} + \frac{1}{1 - \mu^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \tag{B.106}$$

als Winkelanteil des Laplace-Operators. Dieser Winkelanteil wird in Kugelkoordinaten durch Vergleich mit Glg. (B.102) zu

$$\Delta_{\theta,\varphi} = \frac{1}{\sin(\theta)} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin(\theta) \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2(\theta)} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2}. \tag{B.107}$$

Nun wird die Rotation berechnet, es gilt mit Glg. (B.74)

$$\nabla \times \boldsymbol{v} = \frac{1}{r^2 \sin(\theta)} \left[\boldsymbol{q}_r \left(\frac{\partial v_\varphi}{\partial \theta} - \frac{\partial v_\theta}{\partial \varphi} \right) + \boldsymbol{q}_\theta \left(\frac{\partial v_r}{\partial \varphi} - \frac{\partial v_\varphi}{\partial r} \right) + \boldsymbol{q}_\varphi \left(\frac{\partial v_\theta}{\partial r} - \frac{\partial v_r}{\partial \theta} \right) \right]. \tag{B.108}$$

Mit der Umskalierung auf normierte Basiselemente erhält man

$$\begin{aligned}
\nabla \times \boldsymbol{v} &= \frac{1}{r^2 \sin(\theta)} \left[\boldsymbol{e}_r \left(\frac{\partial \left(r \sin(\theta) \widetilde{v}_\varphi \right)}{\partial \theta} - \frac{\partial \left(r \widetilde{v}_\theta \right)}{\partial \varphi} \right) + r \boldsymbol{e}_\theta \left(\frac{\partial \widetilde{v}_r}{\partial \varphi} - \frac{\partial \left(r \sin(\theta) \widetilde{v}_\varphi \right)}{\partial r} \right) \right. \\
&\quad \left. + r \sin(\theta) \boldsymbol{e}_\varphi \left(\frac{\partial \left(r \widetilde{v}_\theta \right)}{\partial r} - \frac{\partial \widetilde{v}_r}{\partial \theta} \right) \right] \\
&= \frac{\widetilde{v}_\theta}{r} \boldsymbol{e}_\varphi + \frac{\widetilde{v}_\varphi}{r \tan(\theta)} \boldsymbol{e}_r - \frac{\widetilde{v}_\varphi}{r} \boldsymbol{e}_\theta + \boldsymbol{e}_r \left(\frac{1}{r} \frac{\partial \widetilde{v}_\varphi}{\partial \theta} - \frac{1}{r \sin(\theta)} \frac{\partial \widetilde{v}_\theta}{\partial \varphi} \right) \\
&\quad + \boldsymbol{e}_\theta \left(\frac{1}{r \sin(\theta)} \frac{\partial \widetilde{v}_r}{\partial \varphi} - \frac{\partial \widetilde{v}_\varphi}{\partial r} \right) + \boldsymbol{e}_\varphi \left(\frac{\partial \widetilde{v}_\theta}{\partial r} - \frac{1}{r} \frac{\partial \widetilde{v}_r}{\partial \theta} \right)
\end{aligned} \tag{B.109}$$

Für die Geschwindigkeitsadvektion verwendet man die Lamb-Transformation Glg. (B.61)

$$(\boldsymbol{v} \cdot \nabla) \boldsymbol{v} = \frac{1}{2} \nabla (\boldsymbol{v} \cdot \boldsymbol{v}) + (\nabla \times \boldsymbol{v}) \times \boldsymbol{v}. \tag{B.110}$$

Vorbereitend stellt man mit Glg. (B.70) fest:

$$\boldsymbol{v}^2 = \left(v^{(r)} \right)^2 + r^2 \left(v^{(\theta)} \right)^2 + r^2 \sin^2(\theta) \left(v^{(\varphi)} \right)^2 \tag{B.111}$$

Hieraus folgt

$$\begin{aligned}
\frac{1}{2} \nabla (\boldsymbol{v} \cdot \boldsymbol{v}) &= \frac{1}{2} \boldsymbol{q}^{(r)} \frac{\partial}{\partial r} \left(\left(v^{(r)} \right)^2 + r^2 \left(v^{(\theta)} \right)^2 + r^2 \sin^2(\theta) \left(v^{(\varphi)} \right)^2 \right) \\
&\quad + \frac{1}{2} \boldsymbol{q}^{(\theta)} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\left(v^{(r)} \right)^2 + r^2 \left(v^{(\theta)} \right)^2 + r^2 \sin^2(\theta) \left(v^{(\varphi)} \right)^2 \right) \\
&\quad + \frac{1}{2} \boldsymbol{q}^{(\varphi)} \frac{\partial}{\partial \varphi} \left(\left(v^{(r)} \right)^2 + r^2 \left(v^{(\theta)} \right)^2 + r^2 \sin^2(\theta) \left(v^{(\varphi)} \right)^2 \right) \\
&= \boldsymbol{q}^{(r)} \left(v^{(r)} \frac{\partial v^{(r)}}{\partial r} + r^2 v^{(\theta)} \frac{\partial v^{(\theta)}}{\partial r} + r \left(v^{(\theta)} \right)^2 + r \sin^2(\theta) \left(v^{(\varphi)} \right)^2 + r^2 \sin^2(\theta) v^{(\varphi)} \frac{\partial v^{(\varphi)}}{\partial r} \right) \\
&\quad + \boldsymbol{q}^{(\theta)} \left(v^{(r)} \frac{\partial v^{(r)}}{\partial \theta} + r^2 v^{(\theta)} \frac{\partial v^{(\theta)}}{\partial \theta} + r^2 \sin(\theta) \cos(\theta) \left(v^{(\varphi)} \right)^2 + r^2 \sin^2(\theta) v^{(\varphi)} \frac{\partial v^{(\varphi)}}{\partial \theta} \right) \\
&\quad + \boldsymbol{q}^{(\varphi)} \left(v^{(r)} \frac{\partial v^{(r)}}{\partial \varphi} + r^2 v^{(\theta)} \frac{\partial v^{(\theta)}}{\partial \varphi} + r^2 \sin^2(\theta) v^{(\varphi)} \frac{\partial v^{(\varphi)}}{\partial \varphi} \right).
\end{aligned} \tag{B.112}$$

Vm Glg. (B.71) auswerten zu können, berechnet man zunächst

$$\boldsymbol{q}_r \times \boldsymbol{q}_\theta = \frac{1}{\sin(\theta)} \boldsymbol{q}_\varphi = r^2 \sin(\theta) \boldsymbol{q}^{(\varphi)}, \tag{B.113}$$

$$\boldsymbol{q}_\theta \times \boldsymbol{q}_\varphi = r^2 \sin(\theta) \boldsymbol{q}_r = r^2 \sin(\theta) \boldsymbol{q}^{(r)}, \tag{B.114}$$

$$\boldsymbol{q}_\varphi \times \boldsymbol{q}_r = \sin(\theta) \boldsymbol{q}_\theta = r^2 \sin(\theta) \boldsymbol{q}^{(\theta)}. \tag{B.115}$$

Es folgt mit Glg. (B.71)

$$
\begin{aligned}
& (\nabla \times \boldsymbol{v}) \times \boldsymbol{v} \\
= & \begin{vmatrix} \boldsymbol{q}^{(r)} & \boldsymbol{q}^{(\theta)} & \boldsymbol{q}^{(\varphi)} \\ \frac{\partial v_\varphi}{\partial \theta} - \frac{\partial v_\theta}{\partial \varphi} & \frac{\partial v_r}{\partial \varphi} - \frac{\partial v_\varphi}{\partial r} & \frac{\partial v_\theta}{\partial r} - \frac{\partial v_r}{\partial \theta} \\ v^{(r)} & v^{(\theta)} & v^{(\varphi)} \end{vmatrix} \\
= & \boldsymbol{q}^{(r)} \left[v^{(\varphi)} \left(\frac{\partial v_r}{\partial \varphi} - \frac{\partial v_\varphi}{\partial r} \right) - v^{(\theta)} \left(\frac{\partial v_\theta}{\partial r} - \frac{\partial v_r}{\partial \theta} \right) \right] \\
& + \boldsymbol{q}^{(\theta)} \left[v^{(r)} \left(\frac{\partial v_\theta}{\partial r} - \frac{\partial v_r}{\partial \theta} \right) - v^{(\varphi)} \left(\frac{\partial v_\varphi}{\partial \theta} - \frac{\partial v_\theta}{\partial \varphi} \right) \right] \\
& + \boldsymbol{q}^{(\varphi)} \left[v^{(\theta)} \left(\frac{\partial v_\varphi}{\partial \theta} - \frac{\partial v_\theta}{\partial \varphi} \right) - v^{(r)} \left(\frac{\partial v_r}{\partial \varphi} - \frac{\partial v_\varphi}{\partial r} \right) \right] \\
= & \boldsymbol{q}^{(r)} \left[v^{(\varphi)} \left(\frac{\partial v^{(r)}}{\partial \varphi} - \frac{\partial \left(r^2 \sin^2(\theta) v^{(\varphi)} \right)}{\partial r} \right) - v^{(\theta)} \left(\frac{\partial \left(r^2 v^{(\theta)} \right)}{\partial r} - \frac{\partial v^{(r)}}{\partial \theta} \right) \right] \\
& + \boldsymbol{q}^{(\theta)} \left[v^{(r)} \left(\frac{\partial \left(r^2 v^{(\theta)} \right)}{\partial r} - \frac{\partial v^{(r)}}{\partial \theta} \right) - v^{(\varphi)} \left(\frac{\partial \left(r^2 \sin^2(\theta) v^{(\varphi)} \right)}{\partial \theta} - \frac{\partial \left(r^2 v^{(\theta)} \right)}{\partial \varphi} \right) \right] \\
& + \boldsymbol{q}^{(\varphi)} \left[v^{(\theta)} \left(\frac{\partial \left(r^2 \sin^2(\theta) v^{(\varphi)} \right)}{\partial \theta} - \frac{\partial \left(r^2 v^{(\theta)} \right)}{\partial \varphi} \right) - v^{(r)} \left(\frac{\partial v^{(r)}}{\partial \varphi} - \frac{\partial \left(r^2 \sin^2(\theta) v^{(\varphi)} \right)}{\partial r} \right) \right] \\
= & \boldsymbol{q}^{(r)} \left[v^{(\varphi)} \left(\frac{\partial v^{(r)}}{\partial \varphi} - r^2 \sin^2(\theta) \frac{\partial v^{(\varphi)}}{\partial r} - 2 r \sin^2(\theta) v^{(\varphi)} \right) - v^{(\theta)} \left(2 r v^{(\theta)} + r^2 \frac{\partial v^{(\theta)}}{\partial r} - \frac{\partial v^{(r)}}{\partial \theta} \right) \right] \\
& + \boldsymbol{q}^{(\theta)} \left[v^{(r)} \left(2 r v^{(\theta)} + r^2 \frac{\partial v^{(\theta)}}{\partial r} - \frac{\partial v^{(r)}}{\partial \theta} \right) - v^{(\varphi)} \left(r^2 \sin^2(\theta) \frac{\partial v^{(\varphi)}}{\partial \theta} + 2 r^2 \sin(\theta) \cos(\theta) v^{(\varphi)} - r^2 \frac{\partial v^{(\theta)}}{\partial \varphi} \right) \right] \\
& + \boldsymbol{q}^{(\varphi)} \Bigg[v^{(\theta)} \left(r^2 \sin^2(\theta) \frac{\partial v^{(\varphi)}}{\partial \theta} + 2 r^2 \sin(\theta) \cos(\theta) v^{(\varphi)} - r^2 \frac{\partial v^{(\theta)}}{\partial \varphi} \right) \\
& - v^{(r)} \left(\frac{\partial v^{(r)}}{\partial \varphi} - 2 r \sin^2(\theta) v^{(\varphi)} - r^2 \sin^2(\theta) \frac{\partial v^{(\varphi)}}{\partial r} \right) \Bigg].
\end{aligned}
\tag{B.116}
$$

Somit folgt

$$
\begin{aligned}
& (\boldsymbol{v} \cdot \nabla) \boldsymbol{v} \\
= & \boldsymbol{q}^{(r)} \left[v^{(r)} \frac{\partial v^{(r)}}{\partial r} + v^{(\theta)} \frac{\partial v^{(r)}}{\partial \theta} + v^{(\varphi)} \frac{\partial v^{(r)}}{\partial \varphi} - r \left(v^{(\theta)} \right)^2 - r \sin^2(\theta) \left(v^{(\varphi)} \right)^2 \right] \\
& + \boldsymbol{q}^{(\theta)} \left[r^2 \left(v^{(r)} \frac{\partial v^{(\theta)}}{\partial r} + v^{(\theta)} \frac{\partial v^{(\theta)}}{\partial \theta} + v^{(\varphi)} \frac{\partial v^{(\theta)}}{\partial \varphi} \right) - r^2 \sin(\theta) \cos(\theta) \left(v^{(\varphi)} \right)^2 + 2 r v^{(\theta)} v^{(r)} \right] \\
& + \boldsymbol{q}^{(\varphi)} \Bigg[r^2 \sin^2(\theta) \left(v^{(r)} \frac{\partial v^{(\varphi)}}{\partial r} + v^{(\theta)} \frac{\partial v^{(\varphi)}}{\partial \theta} + v^{(\varphi)} \frac{\partial v^{(\varphi)}}{\partial \varphi} \right) \\
& + 2 r \sin(\theta) v^{(\varphi)} \left(\sin(\theta) v^{(r)} + r \cos(\theta) v^{(\theta)} \right) \Bigg] \\
= & \boldsymbol{e}_r \left[\widetilde{v}_r \frac{\partial \widetilde{v}_r}{\partial r} + \widetilde{v}_\theta \frac{1}{r} \frac{\partial \widetilde{v}_r}{\partial \theta} + \widetilde{v}_\varphi \frac{1}{r \sin(\theta)} \frac{\partial \widetilde{v}_r}{\partial \varphi} - \frac{1}{r} \left(\widetilde{v}_\theta \right)^2 - \frac{1}{r} \left(\widetilde{v}_\varphi \right)^2 \right] \\
& + \frac{1}{r} \boldsymbol{e}_\theta \left[r^2 \left(\widetilde{v}_r \frac{1}{r} \frac{\partial \widetilde{v}_\theta}{\partial r} - \frac{\widetilde{v}_r \widetilde{v}_\theta}{r^2} + \widetilde{v}_\theta \frac{1}{r^2} \frac{\partial \widetilde{v}_\theta}{\partial \theta} + \widetilde{v}_\varphi \frac{1}{r^2 \sin(\theta)} \frac{\partial \widetilde{v}_\theta}{\partial \varphi} \right) - \frac{1}{\tan(\theta)} \left(\widetilde{v}_\varphi \right)^2 + 2 \widetilde{v}_\theta \widetilde{v}_r \right] \\
& + \frac{1}{r \sin(\theta)} \boldsymbol{e}_\varphi \Bigg[r \sin(\theta) \left(\widetilde{v}_r \frac{\partial \widetilde{v}_\varphi}{\partial r} + \frac{1}{r} \widetilde{v}_\theta \frac{\partial \widetilde{v}_\varphi}{\partial \theta} + \widetilde{v}_\varphi \frac{1}{r \sin(\theta)} \frac{\partial \widetilde{v}_\varphi}{\partial \varphi} \right) - \sin(\theta) \widetilde{v}_r \widetilde{v}_\varphi - \cos(\theta) \widetilde{v}_\theta \widetilde{v}_\varphi \\
& + 2 \widetilde{v}_\varphi \left(\sin(\theta) \widetilde{v}_r + r \cos(\theta) \frac{1}{r} \widetilde{v}_\theta \right) \Bigg].
\end{aligned}
\tag{B.117}
$$

Für die materielle Ableitung gilt also

$$\begin{aligned}\frac{D\boldsymbol{v}}{Dt} &= \boldsymbol{e}_r\left(\frac{D\widetilde{v}_r}{Dt}-\frac{\widetilde{v}_\varphi^2+\widetilde{v}_\theta^2}{r}\right)+\boldsymbol{e}_\theta\left(\frac{D\widetilde{v}_\theta}{Dt}+\frac{\widetilde{v}_r\widetilde{v}_\theta}{r}-\frac{\widetilde{v}_\varphi^2}{r\tan(\theta)}\right)\\ &\quad+\boldsymbol{e}_\varphi\left(\frac{D\widetilde{v}_\varphi}{Dt}+\frac{\widetilde{v}_r\widetilde{v}_\varphi}{r}+\frac{\widetilde{v}_\theta\widetilde{v}_\varphi}{r\tan(\theta)}\right)\end{aligned} \tag{B.118}$$

B.2.1.1 Transformation auf geographische Koordinaten

Um auf geographische Koordinaten zu transformieren, beachtet man die Definition dieses KS in Absch. D.1.3 sowie Glg. (B.69):

$$\frac{\partial}{\partial x} = \frac{1}{r\cos(\varphi)}\frac{\partial}{\partial\lambda}=\frac{1}{r\sin(\theta)}\frac{\partial}{\partial\varphi} \tag{B.119}$$

$$\frac{\partial}{\partial y} = \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial\varphi}=-\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial\theta} \tag{B.120}$$

$$\frac{\partial}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial r} \tag{B.121}$$

Die letzte Identität transformiert in die gewöhnlichen Kugelkoordinaten. Analog gilt dies für zweite Ableitungen. Für die Darstellung des Laplace-Operators Glg. (B.102) folgt

$$\begin{aligned}\Delta &= \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right)+\frac{1}{r^2\cos^2(\varphi)}\frac{\partial^2}{\partial\lambda^2}+\frac{1}{r^2\cos(\varphi)}\frac{\partial}{\partial\varphi}\left(\cos(\varphi)\frac{\partial}{\partial\varphi}\right)\\ &= \frac{\partial^2}{\partial z^2}+\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial z}-\frac{\tan(\varphi)}{r}\frac{\partial}{\partial y}.\end{aligned} \tag{B.122}$$

Glg. (B.101) wird zu

$$\begin{aligned}\nabla\cdot\boldsymbol{v} &= \frac{\partial v_z}{\partial r}+\frac{1}{r}\frac{\partial v_y}{\partial\varphi}+\frac{1}{r\cos(\varphi)}\frac{\partial v_x}{\partial\lambda}+\frac{2v_z}{r}-\frac{v_y\tan(\varphi)}{r}=\nabla\cdot\boldsymbol{v}\\ &= \frac{\partial v_z}{\partial r}+\frac{\partial v_y}{\partial y}+\frac{\partial v_x}{\partial x}+\frac{2v_z}{r}-\frac{v_y\tan(\varphi)}{r}.\end{aligned} \tag{B.123}$$

Ist $\boldsymbol{v}=(u,v,w)^T$ der Windvektor, folgt

$$\nabla\cdot\boldsymbol{v} = \frac{\partial u}{\partial x}+\frac{\partial v}{\partial y}+\frac{\partial w}{\partial z}-\frac{v\tan(\varphi)}{r}+\frac{2w}{r}. \tag{B.124}$$

Glg. (B.109) wird zu

$$\begin{aligned}\nabla\times\boldsymbol{v} &= -\frac{v_y}{r}\boldsymbol{i}+\frac{v_x\tan(\varphi)}{r}\boldsymbol{k}+\frac{v_x}{r}\boldsymbol{j}+\boldsymbol{k}\left(-\frac{1}{r}\frac{\partial v_x}{\partial\varphi}+\frac{1}{r\cos(\varphi)}\frac{\partial v_y}{\partial\lambda}\right)\\ &\quad-\boldsymbol{j}\left(\frac{1}{r\cos(\varphi)}\frac{\partial v_z}{\partial\lambda}-\frac{\partial v_x}{\partial r}\right)+\boldsymbol{i}\left(-\frac{\partial v_y}{\partial r}+\frac{1}{r}\frac{\partial v_z}{\partial\varphi}\right)\\ &= -\frac{v_y}{r}\boldsymbol{i}+\frac{v_x\tan(\varphi)}{r}\boldsymbol{k}+\frac{v_x}{r}\boldsymbol{j}+\boldsymbol{k}\left(-\frac{\partial v_x}{\partial y}+\frac{\partial v_y}{\partial x}\right)\\ &\quad-\boldsymbol{j}\left(\frac{\partial v_z}{\partial x}-\frac{\partial v_x}{\partial r}\right)+\boldsymbol{i}\left(-\frac{\partial v_y}{\partial r}+\frac{\partial v_z}{\partial y}\right).\end{aligned} \tag{B.125}$$

Ist $\boldsymbol{v}$ wieder der Windvektor, folgt

$$\nabla\times\boldsymbol{v} = \left(\frac{\partial w}{\partial y}-\frac{\partial v}{\partial z}\right)\boldsymbol{i}+\left(\frac{\partial u}{\partial z}-\frac{\partial w}{\partial x}\right)\boldsymbol{j}+\left(\frac{\partial v}{\partial x}-\frac{\partial u}{\partial y}\right)\boldsymbol{k}+\frac{u\tan(\varphi)}{r}\boldsymbol{k}+\frac{u}{r}\boldsymbol{j}-\frac{v}{r}\boldsymbol{i}. \tag{B.126}$$

Weiterhin gilt

$$\zeta := \boldsymbol{k} \cdot (\nabla \times \boldsymbol{v}) = \frac{\partial v}{\partial x} - \frac{\partial u}{\partial y} + \frac{u \tan(\varphi)}{r}. \tag{B.127}$$

Zu beachten ist, dass gilt

$$\nabla_h \times \boldsymbol{v}_h = \left(\frac{\partial v}{\partial x} - \frac{\partial u}{\partial y}\right)\boldsymbol{k} + \frac{u \tan(\varphi)}{r}\boldsymbol{k} + \frac{u}{r}\boldsymbol{j} - \frac{v}{r}\boldsymbol{i} \neq \zeta \boldsymbol{k}. \tag{B.128}$$

Für die *materielle Ableitung* folgt mit Glg. (B.118)

$$\begin{aligned}
\frac{D\boldsymbol{v}}{Dt} = \; & \boldsymbol{i}\left(\frac{\partial u}{\partial t} + u\frac{\partial u}{\partial x} + v\frac{\partial u}{\partial y} + w\frac{\partial u}{\partial z} - \frac{uv\tan(\varphi)}{a+z} + \frac{uw}{a+z}\right) \\
& + \boldsymbol{j}\left(\frac{\partial v}{\partial t} + u\frac{\partial v}{\partial x} + v\frac{\partial v}{\partial y} + w\frac{\partial v}{\partial z} + \frac{u^2\tan(\varphi)}{a+z} + \frac{vw}{a+z}\right) \\
& + \boldsymbol{k}\left(\frac{\partial w}{\partial t} + u\frac{\partial w}{\partial x} + v\frac{\partial w}{\partial y} + w\frac{\partial w}{\partial z} - \frac{u^2+v^2}{a+z}\right).
\end{aligned} \tag{B.129}$$

Eine weitere Form des advektiven Anteils hiervon ist

$$\begin{aligned}
(\boldsymbol{v} \cdot \nabla)\boldsymbol{v} &= [(\boldsymbol{v}_h + w\boldsymbol{k}) \cdot \nabla](\boldsymbol{v}_h + w\boldsymbol{k}) = (\boldsymbol{v}_h \cdot \nabla)\boldsymbol{v}_h + w\frac{\partial \boldsymbol{v}_h}{\partial z} + (\boldsymbol{v} \cdot \nabla)(w\boldsymbol{k}) \\
&\overset{\text{Glg. (B.61)}}{=} (\nabla \times \boldsymbol{v}_h) \times \boldsymbol{v}_h + \nabla\frac{\boldsymbol{v}_h^2}{2} + w\frac{\partial \boldsymbol{v}_h}{\partial z} + (\boldsymbol{v} \cdot \nabla)(w\boldsymbol{k})
\end{aligned}$$

$$\boxed{\Leftrightarrow (\boldsymbol{v} \cdot \nabla)\boldsymbol{v} = (\nabla_h \times \boldsymbol{v}_h) \times \boldsymbol{v}_h + \nabla_h\frac{\boldsymbol{v}_h^2}{2} + w\frac{\partial \boldsymbol{v}_h}{\partial z} + (\boldsymbol{v} \cdot \nabla)(w\boldsymbol{k}). \qquad \text{(B.130)}}$$

Im letzten Schritt wurde

$$\left(\boldsymbol{k}\frac{\partial}{\partial z} \times \boldsymbol{v}_h\right) \times \boldsymbol{v}_h = \begin{pmatrix} -\frac{\partial v}{\partial z} \\ \frac{\partial u}{\partial z} \\ 0 \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} u \\ v \\ 0 \end{pmatrix} = -\left(u\frac{\partial u}{\partial z} + v\frac{\partial v}{\partial z}\right)\boldsymbol{k} = -\frac{1}{2}\boldsymbol{k}\frac{\partial \boldsymbol{v}_h^2}{\partial z} \tag{B.131}$$

verwendet. Glg. (B.130) bezeichnet man als *2D-vektorinvariante Form der Geschwindigkeitsadvektion*. Eine weitere nützliche Form hiervon ist

$$\begin{aligned}
(\boldsymbol{v} \cdot \nabla)\boldsymbol{v} &= (\nabla \times \boldsymbol{v}_h) \times \boldsymbol{v}_h + \nabla\frac{\boldsymbol{v}_h^2}{2} + w\frac{\partial \boldsymbol{v}_h}{\partial z} + (\boldsymbol{v} \cdot \nabla)(w\boldsymbol{k}) \\
&= (\nabla \times \boldsymbol{v}_h) \times \boldsymbol{v}_h + \nabla\frac{\boldsymbol{v}_h^2}{2} + w\frac{\partial \boldsymbol{v}}{\partial z} + (\boldsymbol{v}_h \cdot \nabla)(w\boldsymbol{k}).
\end{aligned} \tag{B.132}$$

Wegen

$$\begin{aligned}
(\nabla \times \boldsymbol{v}) \times \boldsymbol{v}_h &= [\nabla \times (\boldsymbol{v}_h + w\boldsymbol{k})] \times \boldsymbol{v}_h = (\nabla \times \boldsymbol{v}_h) \times \boldsymbol{v}_h + (\nabla \times w\boldsymbol{k}) \times \boldsymbol{v}_h \\
&\overset{\text{Glg. (B.126)}}{=} (\nabla \times \boldsymbol{v}_h) \times \boldsymbol{v}_h + \left(\frac{\partial w}{\partial y}\boldsymbol{i} - \frac{\partial w}{\partial x}\boldsymbol{j}\right) \times \boldsymbol{v}_h = (\nabla \times \boldsymbol{v}_h) \times \boldsymbol{v}_h + \boldsymbol{k}(\boldsymbol{v}_h \cdot \nabla w)
\end{aligned} \tag{B.133}$$

und

$$\begin{aligned}
(\boldsymbol{v}_h \cdot \nabla)(w\boldsymbol{k}) &= \boldsymbol{k}(\boldsymbol{v}_h \cdot \nabla w) + w\left(u\frac{\partial \boldsymbol{k}}{\partial x} + v\frac{\partial \boldsymbol{k}}{\partial y}\right) = \boldsymbol{k}(\boldsymbol{v}_h \cdot \nabla w) + w\left(\frac{u}{r\cos(\varphi)}\frac{\partial \boldsymbol{k}}{\partial \lambda} + \frac{v}{r}\frac{\partial \boldsymbol{k}}{\partial \varphi}\right) \\
&= \boldsymbol{k}(\boldsymbol{v}_h \cdot \nabla w) + w\left(\frac{u}{r}\boldsymbol{i} + \frac{v}{r}\boldsymbol{j}\right) = \boldsymbol{k}(\boldsymbol{v}_h \cdot \nabla w) + \frac{w}{r}\boldsymbol{v}_h
\end{aligned} \tag{B.134}$$

gilt

$$\boxed{(\boldsymbol{v}\cdot\nabla)\,\boldsymbol{v} \quad = \quad (\nabla\times\boldsymbol{v})\times\boldsymbol{v}_h + \nabla\frac{\boldsymbol{v}_h^2}{2} + w\frac{\partial\boldsymbol{v}}{\partial z} + \frac{w}{r}\boldsymbol{v}_h. \qquad \text{(B.135)}}$$

Durch Vergleich mit Absch. 3.4.5.2 stellt man fest, dass der Term $\frac{w}{r}\boldsymbol{v}_h$ unter der shallow-atmosphere-Approximation nicht auftritt.

B.3 Mehrdimensionale Integralrechnung

Seien $M, N \subseteq \mathbb{R}^3$, $f: M \to \mathbb{R}$ stetig, $T: N \to M$ ein Diffeomorphismus, dann gilt

$$\int_M f d^3r = \int_N f\circ T\,|\det(T')|\,d^3r, \tag{B.136}$$

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

$$T = r\begin{pmatrix} \sin(\vartheta)\cos(\varphi) \\ \sin(\vartheta)\sin(\varphi) \\ \cos(\vartheta) \end{pmatrix}, \tag{B.137}$$

dann gilt

$$T' = \begin{pmatrix} \sin(\vartheta)\cos(\varphi) & r\cos(\vartheta)\cos(\varphi) & -r\sin(\vartheta)\sin(\varphi) \\ \sin(\vartheta)\sin(\varphi) & r\cos(\vartheta)\sin(\varphi) & r\sin(\vartheta)\cos(\varphi) \\ \cos(\vartheta) & -r\sin(\vartheta) & 0 \end{pmatrix}. \tag{B.138}$$

Für die Determinante gilt

$$\begin{aligned} \det(T') &= -r\sin(\vartheta)\cos(\varphi)\left(-r\sin^2\vartheta\cos(\varphi) - r\cos^2\vartheta\cos(\varphi)\right) \\ &\quad -r\sin(\vartheta)\sin(\varphi)\left(-r\sin^2\vartheta\sin(\varphi) - r\cos^2\vartheta\sin(\varphi)\right) \\ &= r^2\sin(\vartheta)\cos^2(\varphi) + r^2\sin(\vartheta)\sin^2\vartheta = r^2\sin(\vartheta), \end{aligned} \tag{B.139}$$

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 $\boldsymbol{v}: A \to \mathbb{R}^3$ stetig-differenzierbar. Dann gilt

$$\int_A \nabla\cdot\boldsymbol{v}\,d^3r = \int_{\partial A}\boldsymbol{v}\cdot d\boldsymbol{A}. \tag{B.140}$$

Dies ist der *Gauß'sche Satz*.

Eine Kugel $K_N(R)$ im $\mathbb{R}^N$ mit Radius $R \geq 0$ kann man definieren durch

$$K_N(R) := \left\{ \boldsymbol{x} = (x_1,\ldots,x_N)^T \in \mathbb{R}^N \,\middle|\, \sum_{i=1}^N x_i^2 \leq R^2 \right\}. \tag{B.141}$$

Ihr Volumen ist

$$V_N(R) = \int_{K_N} dx_1\ldots dx_N. \tag{B.142}$$

Es gilt

$$\int_{\mathbb{R}^N}\exp\left(-\sum_{i=1}^N x_i^2\right)dx_1\ldots dx_N \quad = \quad \int_0^\infty e^{-R^2}\frac{dV_N}{dR}dR, \tag{B.143}$$

dies entspricht einer Transformation auf Kugelkoordinaten. Man kann auch das Integral $V_N(R)$ auf Kugelkoordi-

naten transformieren, indem man schreibt

$$V_N(R) = \int_{K_N} dV_N = \int_0^R f_N(R)\, dR, \tag{B.144}$$

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

$$f_N(R) = NC_N R^{N-1}. \tag{B.145}$$

Durch Differenzieren von Glg. (B.144) nach R und mit Glg. (B.143) folgt

$$\begin{aligned} \frac{dV_N}{dR} &= NC_N R^{N-1} \\ \Rightarrow NC_N \int_0^\infty e^{-R^2} R^{N-1} dR &= \left(\int_{-\infty}^\infty e^{-x^2} dx \right)^N = \pi^{N/2}. \end{aligned} \tag{B.146}$$

Der letzte Schritt folgt mit Glg. (A.111). Es gilt mit der Substitutionsregel

$$\begin{aligned} \int_0^\infty e^{-R^2} R^{N-1} dR &= \int_0^\infty e^{-R} R^{\frac{N-1}{2}} \frac{1}{2} R^{-\frac{1}{2}} dR = \frac{1}{2} \int_0^\infty e^{-R} R^{N/2-1} dR \\ &= \frac{1}{2} \Gamma\left(\frac{N}{2}\right). \end{aligned} \tag{B.147}$$

Es folgt mit Glg. (A.117)

$$V_N = C_N R^N = \frac{\pi^{N/2}}{\frac{N}{2}\Gamma\left(\frac{N}{2}\right)} R^N = \frac{\pi^{N/2}}{\Gamma\left(\frac{N}{2}+1\right)} R^N. \tag{B.148}$$

C 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

$$\int_a^b w(x) f_n(x) f_m(x)\, dx = 0. \tag{C.1}$$

Alle orthogonalen Polynomensysteme erfüllen eine *Rodrigues-Formel*

$$f_n(x) = \frac{1}{e_n w(x)} \frac{d^n}{dx^n} \left[w(x) g(x)^n \right] \tag{C.2}$$

mit einem Polynom $g(x)$, welches nicht von n abhängt.

C.1 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* $\widetilde{F}_1\{f\} = \widetilde{f}(k)$ oder auch das *Spektrum* von f durch

$$\widetilde{F}_1\{f\} = \widetilde{f}(k) := C \int_{-\infty}^{\infty} \exp(-ikx) f(x)\, dx \tag{C.3}$$

mit einer reellen Konstante $C > 0$. $\widetilde{F}_1$ bezeichnet den Operator der eindimensionalen Fourier-Transformation. Glg. (C.3) ist bis auf einen eventuellen Faktor die Kovarianz der Funktion f mit der *Fourier-Komponente* e^{ikx}. Die *inverse Fourier-Transformation* wird definiert durch

$$\widetilde{F}_1^{-1}\{f\} := \widetilde{C} \int_{-\infty}^{\infty} \widetilde{f}(k) \exp(ikx)\, dk \tag{C.4}$$

mit einer zweiten Konstanten $\widetilde{C} > 0$. Es handelt sich um eine Linearkombination der $\widetilde{f}(k)$ mit den entsprechenden Wellen. Dass dies tatsächlich das Inverse von Glg. (C.3) ist, soll nun eingesehen werden:

$$\begin{aligned}
\widetilde{C} \int_{-\infty}^{\infty} \widetilde{f}(k) \exp(ikx)\, dk &= \widetilde{C}C \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \exp(-ikx') f(x')\, dx' \exp(ikx)\, dk \\
&= \widetilde{C}C \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \exp(ik(x - x'))\, dk f(x')\, dx' \\
&\overset{\text{Glg. (A.98)}}{=} \widetilde{C}C \int_{-\infty}^{\infty} 2\pi\delta(x - x')' f(x')\, dx' = \widetilde{C}C 2\pi f(x) && \text{(C.5)} \\
&\overset{\Leftrightarrow \widetilde{C}C = 1/2\pi}{=} f(x) && \text{(C.6)}
\end{aligned}$$

Man muss also auf die Bedingung

$$\widetilde{C} = \frac{1}{2\pi C} \tag{C.7}$$

achten. Hieraus kann man unmittelbar

$$\begin{aligned}
\left[\widetilde{F}_1\{\delta(x - x_0)\}\right](k) &= Ce^{-ikx_0}, && \text{(C.8)} \\
\left[\widetilde{F}_1\{e^{ik'x}\}\right](k) &= 2\pi C\delta(k' - k), && \text{(C.9)} \\
\left[\widetilde{F}_1^{-1}\{\delta(k - k_0)\}\right](x) &= \widetilde{C}e^{ik_0x}, && \text{(C.10)} \\
\left[\widetilde{F}_1^{-1}\{e^{ikx'}\}\right](x) &= 2\pi\widetilde{C}\delta(x' + x) && \text{(C.11)}
\end{aligned}$$

ableiten. Die Funktion

$$\arg\left(\widetilde{f}(k)\right) \tag{C.12}$$

bezeichnet man als das *Phasenspektrum* von f, während man

$$\left|\widetilde{f}(k)\right| \tag{C.13}$$

als *Amplitudenspektrum* bezeichnet. Das Quadrat von $\left|\widetilde{f}(k)\right|$ 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

$$\widetilde{F}\{af + bg\} = a\widetilde{F}\{f\} + b\widetilde{F}\{g\}. \tag{C.14}$$

Sei $N(\mu, \sigma)$ die Normalverteilung mit Erwartungswert μ und Standardabweichung σ. Dann gilt

$$\begin{aligned}
\widetilde{F}\{N(\mu,\sigma)\} &= \frac{C}{\sqrt{2\pi}\sigma}\int_{-\infty}^{\infty}\exp\left[-ikx - \frac{(x-\mu)^2}{2\sigma^2}\right]dx = \frac{C}{\sqrt{2\pi}\sigma}\int_{-\infty}^{\infty}\exp\left[-\frac{1}{2\sigma^2}\left(x^2+\mu^2-2x\left(\mu-ik\sigma^2\right)\right)\right]dx \\
&= \frac{C}{\sqrt{2\pi}\sigma}\int_{-\infty}^{\infty}\exp\left[-\frac{1}{2\sigma^2}\left(x-\left(\mu-ik\sigma^2\right)\right)^2 - \frac{1}{2\sigma^2}\left(k^2\sigma^4+2\mu i\sigma^2 k\right)\right]dx \\
&= \exp\left[-\frac{1}{2\sigma^2}\left(k^2\sigma^4+2\mu i\sigma^2 k\right)\right]\frac{C}{\sqrt{2\pi}\sigma}\int_{-\infty}^{\infty}\exp\left[-\frac{1}{2\sigma^2}x^2\right]dx \\
&= C\exp\left(-\frac{k^2}{2/\sigma^2}\right)\exp\left(-\mu ik\right).
\end{aligned} \tag{C.15}$$

Die FT einer Normalverteilung ist also eine unnormierte (man betrachte den Fall $C = 1/\sqrt{2\pi}$) und um einen komplexen Phasenfaktor modifizierte Normalverteilung mit Mittelwert

$$\mu_k = 0 \tag{C.16}$$

und Standardabweichung

$$\sigma_k = \frac{1}{\sigma} \tag{C.17}$$

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

$$f_y(x) := f(x, y). \tag{C.18}$$

Die FT hiervon ist

$$\widetilde{f}_y(k_x) = C\int_{-\infty}^{\infty} e^{-ik_x x} f_y(x)\,dx. \tag{C.19}$$

Wendet man hierauf die inverse FT an, erhält man wieder $f_y(x) = f(x, y)$. Definiere nun die Fourier-Transformierte $\widetilde{f}(k_x, k_y)$ der Funktion $f(x, y)$ durch die in y-Richtung Fourier-Transformierte von $\widetilde{f}_y(k_x)$, also

$$\begin{aligned}
\widetilde{f}(k_x,k_y) &:= C\int_{-\infty}^{\infty} e^{-ik_y y}\widetilde{f}_y(k_x)\,dy = C^2\int_{-\infty}^{\infty} e^{-ik_y y}\int_{-\infty}^{\infty} e^{-ik_x x} f(x,y)\,dxdy \\
&= C^2\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty} e^{-i\left(k_x x + k_y y\right)} f(x,y)\,dxdy.
\end{aligned} \tag{C.20}$$

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

$$\widetilde{F}_2\{f\} = \widetilde{f}(k_x,k_y) := C_2 \int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty} e^{-i(k_x x+k_y y)} f(x,y)\,dxdy, \tag{C.21}$$

$$\widetilde{F}_2^{-1}\{f\} := \widetilde{C}_2 \int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty} \widetilde{f}(k_x,k_y)\, e^{i(k_x x+k_y y)} dk_x dk_y, \tag{C.22}$$

wobei

$$C_2\widetilde{C}_2 = \left(C\widetilde{C}\right)^2 = \frac{1}{(2\pi)^2} \tag{C.23}$$

gelten muss. Führt man dies induktiv fort, erhält man analog die $n-$dimensionale FT, wobei auf

$$C_n\widetilde{C}_n = \left(C\widetilde{C}\right)^n = \frac{1}{(2\pi)^n} \tag{C.24}$$

zu achten ist.

Glg. (C.6) lautet

$$f(x) = \widetilde{C}\int_{-\infty}^{\infty} \widetilde{f}(k)\exp(ikx)\,dk, \tag{C.25}$$

überträgt man dies auf eine analog definierte Funktion g, erhält man

$$g(x) = \widetilde{C}\int_{-\infty}^{\infty} \tilde{g}(k')\exp(ik'x)\,dk'. \tag{C.26}$$

Multipliziert man die beiden letzten Gleichungen miteinander, erhält man

$$f(x)\,g(x) = \widetilde{C}^2\int_{k=-\infty}^{\infty}\int_{k'=-\infty}^{\infty} \tilde{g}(k')\widetilde{f}(k)\exp\left[i(k+k')x\right]dk'dk. \tag{C.27}$$

Integriert man dies über x, erhält man

$$\begin{aligned}\int_{-\infty}^{\infty} f(x)\,g(x)\,dx &= \widetilde{C}^2\int_{k=-\infty}^{\infty}\int_{k'=-\infty}^{\infty} \tilde{g}(k')\widetilde{f}(k)\int_{-\infty}^{\infty}\exp\left[i(k+k')x\right]dxdk'dk \\ &\overset{\text{Glg. (A.98)}}{=} \widetilde{C}^2\int_{k=-\infty}^{\infty}\int_{k'=-\infty}^{\infty} \tilde{g}(k')\widetilde{f}(k)\,2\pi\delta(k+k')\,dk'dk \\ &= 2\pi\widetilde{C}^2\int_{-\infty}^{\infty}\tilde{g}(-k)\widetilde{f}(k)\,dk \end{aligned} \tag{C.28}$$

Für $g=f$ erhält man die sogenannte *Parseval-Identität*

$$\boxed{\int_{-\infty}^{\infty} f^2(x)\,dx = 2\pi\widetilde{C}^2\int_{-\infty}^{\infty}\widetilde{f}(-k)\widetilde{f}(k)\,dk.} \tag{C.29}$$

C.2 Legendre-Polynome

Glg. (D.52) heißt *Legendre'sche Differenzialgleichung*. Diese lautet:

$$\frac{d}{d\mu}\left(1-\mu^2\right)P'(\mu) = -\lambda P \tag{C.30}$$

Man setzt für $P(\mu)$ an

$$P(\mu) = \sum_{i=0}^{\infty} U_i \mu^i, \tag{C.31}$$

damit gilt

$$\begin{aligned} P'(\mu) &= \sum_{i=0}^{\infty} i U_i \mu^{i-1} = \sum_{i=0}^{\infty} (i+1) U_{i+1} \mu^i, && \text{(C.32)} \\ P''(\mu) &= \sum_{i=0}^{\infty} i(i-1) U_i \mu^{i-2} = \sum_{i=0}^{\infty} (i+2)(i+1) U_{i+2} \mu^i. && \text{(C.33)} \end{aligned}$$

Setzt man dies in

$$-2\mu P'(\mu) + \left(1-\mu^2\right) P''(\mu) = -\lambda P(\mu) \tag{C.34}$$

ein, erhält man

$$\begin{aligned} -2\sum_{i=0}^{\infty} i U_i \mu^i + \sum_{i=0}^{\infty} (i+2)(i+1) U_{i+2} \mu^i - \sum_{i=0}^{\infty} i(i-1) U_i \mu^i &= -\lambda \sum_{i=0}^{\infty} U_i \mu^i \\ \Leftrightarrow -2iU_i + (i+2)(i+1) U_{i+2} - i(i-1) &= -\lambda U_i \\ \Leftrightarrow U_{i+2} &= U_i \frac{i(i+1)-\lambda}{(i+2)(i+1)}. \end{aligned} \tag{C.35}$$

Im Allgemeinen geht dies für $i \to \infty$ 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. (C.35) und eine Normierung ist $P_n(\mu)$ festgelegt. Alternativ kann man die Legendre-Polynome schreiben als

$$P_n(x) = \frac{1}{2^n n!} \frac{d^n}{dx^n} \left(x^2-1\right)^n, \tag{C.36}$$

dies ist nun zu zeigen. Definiere

$$\delta_k := \begin{cases} 0, k \text{ ungerade}, \\ 1, k \text{ gerade}. \end{cases} \tag{C.37}$$

Nun kann man den binomischen Lehrsatz Glg. (A.16) verwenden, um

$$\left(x^2-1\right)^n = \sum_{k=0}^{n} \binom{n}{k} x^{2k} (-1)^{n-k} = \sum_{k=0}^{2n} \delta_k \binom{n}{k/2} x^k (-1)^{n-k/2} \tag{C.38}$$

zu notieren, damit folgt für die obige Schreibweise der Legendre-Polynome Glg. (C.36) mit Glg. (A.33)

$$\begin{aligned} P_n(x) &= \frac{1}{2^n n!} \sum_{k=0}^{n} \frac{(k+n)!}{k!} \binom{n}{\frac{k+n}{2}} (-1)^{n-\frac{k+n}{2}} \delta_{k+n} x^k \\ &= \frac{1}{2^n n!} \sum_{k=0}^{n} \frac{(n+k)!}{k!} \frac{n!}{\left(\frac{n+k}{2}\right)! \left(n-\frac{n+k}{2}\right)!} (-1)^{n-\frac{k+n}{2}} \delta_{n+k} x^k \\ &= \frac{1}{2^n} \sum_{k=0}^{n} \frac{(n+k)!}{k!} \frac{1}{\left(\frac{n+k}{2}\right)! \left(\frac{n-k}{2}\right)!} (-1)^{\frac{n-k}{2}} \delta_{n+k} x^k. \end{aligned} \tag{C.39}$$

Für die ersten beiden Ableitungen der Legendre-Polynome folgt

$$
\begin{aligned}
P_n'(x) &= \frac{1}{2^n}\sum_{k=0}^{n-1}(k+1)\frac{(n+k+1)!}{(k+1)!}\frac{1}{\left(\frac{n+k+1}{2}\right)!}\frac{1}{\left(\frac{n-k-1}{2}\right)!}(-1)^{\frac{n-k-1}{2}}\delta_{n+k+1}x^k \\
&= \frac{1}{2^n}\sum_{k=0}^{n-1}\frac{(n+k+1)!}{k!}\frac{1}{\left(\frac{n+k+1}{2}\right)!}\frac{1}{\left(\frac{n-k-1}{2}\right)!}(-1)^{\frac{n-k-1}{2}}\delta_{n+k+1}x^k, \qquad \text{(C.40)} \\
P_n''(x) &= \frac{1}{2^n}\sum_{k=0}^{n-2}(k+1)\frac{(n+k+2)!}{(k+1)!}\frac{1}{\left(\frac{n+k+2}{2}\right)!}\frac{1}{\left(\frac{n-k-2}{2}\right)!}(-1)^{\frac{n-k-2}{2}}\delta_{n+k+2}x^k \\
&= \frac{1}{2^n}\sum_{k=0}^{n-2}\frac{(n+k+2)!}{k!}\frac{1}{\left(\frac{n+k+2}{2}\right)!}\frac{1}{\left(\frac{n-k-2}{2}\right)!}(-1)^{\frac{n-k-2}{2}}\delta_{n+k}x^k \\
&= \frac{1}{2^n}\sum_{k=0}^{n-2}\frac{(n+k+2)!}{k!}\frac{1}{\left(\frac{n+k}{2}\right)!}\frac{1}{\left(\frac{n+k}{2}+1\right)}\frac{\left(\frac{n-k}{2}\right)}{\left(\frac{n-k}{2}\right)!}(-1)^{\frac{n-k-2}{2}}\delta_{n+k}x^k \\
&= \frac{1}{2^n}\sum_{k=0}^{n-2}\frac{1}{\left(\frac{n+k}{2}\right)!}\frac{1}{\left(\frac{n-k}{2}\right)!}\frac{(n+k+1)!}{k!}(n-k)(-1)^{\frac{n-k-2}{2}}\delta_{n+k}x^k. \qquad \text{(C.41)}
\end{aligned}
$$

Nun wird gezeigt, dass die Legendre-Polynome nach Glg. (C.36) in der Tat die Legendredifferenzialgleichung (D.52) lösen:

$$
\begin{aligned}
& -2xP_n'(x) + (1-x^2)P_n''(x) \overset{!}{=} -n(n+1)P_n(x) \\
\Leftrightarrow\ & -2x\frac{1}{2^n}\sum_{k=0}^{n-1}\frac{(n+k+1)!}{k!}\frac{1}{\left(\frac{n+k+1}{2}\right)!}\frac{1}{\left(\frac{n-k-1}{2}\right)!}(-1)^{\frac{n-k-1}{2}}\delta_{n+k+1}x^k \\
& +\frac{1}{2^n}\sum_{k=0}^{n-2}\frac{1}{\left(\frac{n+k}{2}\right)!}\frac{1}{\left(\frac{n-k}{2}\right)!}\frac{(n+k+1)!}{k!}(n-k)(-1)^{\frac{n-k-2}{2}}\delta_{n+k}x^k \\
& -\frac{1}{2^n}\sum_{k=0}^{n-2}\frac{(n+k+2)!}{k!}\frac{1}{\left(\frac{n+k+2}{2}\right)!}\frac{1}{\left(\frac{n-k-2}{2}\right)!}(-1)^{\frac{n-k-2}{2}}\delta_{n+k}x^{k+2} \\
= \ & -n(n+1)\frac{1}{2^n}\sum_{k=0}^{n}\frac{(n+k)!}{k!}\frac{1}{\left(\frac{n+k}{2}\right)!}\frac{1}{\left(\frac{n-k}{2}\right)!}(-1)^{\frac{n-k}{2}}\delta_{n+k}x^k \\
\Leftrightarrow\ & -2\sum_{k=0}^{n}k\frac{(n+k)!}{k!}\frac{1}{\left(\frac{n+k}{2}\right)!}\frac{1}{\left(\frac{n-k}{2}\right)!}(-1)^{\frac{n-k}{2}}\delta_{n+k}x^k \\
& +\sum_{k=0}^{n-2}\frac{1}{\left(\frac{n+k}{2}\right)!}\frac{1}{\left(\frac{n-k}{2}\right)!}\frac{(n+k+1)!}{k!}(n-k)(-1)^{\frac{n-k-2}{2}}\delta_{n+k}x^k \\
& -\sum_{k=0}^{n}k(k-1)\frac{(n+k)!}{k!}\frac{1}{\left(\frac{n+k}{2}\right)!}\frac{1}{\left(\frac{n-k}{2}\right)!}(-1)^{\frac{n-k}{2}}\delta_{n+k}x^k
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
&= -n(n+1)\sum_{k=0}^{n}\frac{(n+k)!}{k!}\frac{1}{\left(\frac{n+k}{2}\right)!}\frac{1}{\left(\frac{n-k}{2}\right)!}(-1)^{\frac{n-k}{2}}\delta_{n+k}x^k \\
\Leftrightarrow\quad & -2\sum_{k=0}^{n}k\frac{(n+k)!}{k!}\frac{1}{\left(\frac{n+k}{2}\right)!}\frac{1}{\left(\frac{n-k}{2}\right)!}(-1)^{\frac{n-k}{2}}\delta_{n+k}x^k \\
& -\sum_{k=0}^{n-2}\frac{1}{\left(\frac{n+k}{2}\right)!\left(\frac{n-k}{2}\right)!}\frac{(n+k)!}{k!}(n+k+1)(n-k)(-1)^{\frac{n-k}{2}}\delta_{n+k}x^k \\
& -\sum_{k=0}^{n}k(k-1)\frac{(n+k)!}{k!}\frac{1}{\left(\frac{n+k}{2}\right)!}\frac{1}{\left(\frac{n-k}{2}\right)!}(-1)^{\frac{n-k}{2}}\delta_{n+k}x^k \\
&= -n(n+1)\sum_{k=0}^{n}\frac{(n+k)!}{k!}\frac{1}{\left(\frac{n+k}{2}\right)!}\frac{1}{\left(\frac{n-k}{2}\right)!}(-1)^{\frac{n-k}{2}}\delta_{n+k}x^k
\end{aligned}
\tag{C.42}
$$

Man zeigt die Gleichheit der Koeffizienten der drei Polynome. Von $k=0$ bis $k=n-2$ bedeutet dies

$$
2k+n^2-nk+kn-k^2+n-k+k^2-k \overset{!}{=} n^2+n, \tag{C.43}
$$

was stimmt. Für $k=n-1$ gilt

$$
\delta_{n+k}=0, \tag{C.44}
$$

und für $k=n$ gilt

$$
-2n-n(n-1)\overset{!}{=}-n(n+1), \tag{C.45}
$$

was ebenfalls stimmt. Nun wird die Normierung der Legendre-Polynome auf der für dieses Problem relevanten Menge $[-1,1]$ bestimmt.

$$
\begin{aligned}
\int_{-1}^{1}P_n^2(x)\,dx &= \frac{1}{2^{2n}n!^2}\int_{-1}^{1}\frac{d^n}{dx^n}(x^2-1)^n\frac{d^n}{dx^n}(x^2-1)^n\,dx \\
&\overset{n-\text{fache p.I.}}{=} \frac{1}{2^{2n}n!^2}(-1)^n\int_{-1}^{1}(x^2-1)^n\frac{d^{2n}}{dx^{2n}}(x^2-1)^n\,dx \\
&= \frac{1}{2^{2n}n!^2}(-1)^n(2n)!\int_{-1}^{1}(x^2-1)^n\,dx
\end{aligned}
\tag{C.46}
$$

Es gilt weiter

$$
\begin{aligned}
\int(x^2-1)^n\,dx &= \int(x+1)^n(x-1)^n\,dx \overset{n\text{ - fache p.I.}}{=} (-1)^n\int\frac{n!\,(x+1)^{2n}}{(2n)!}n!dx \\
&= (-1)^n\frac{n!^2}{(2n)!}\int(x+1)^{2n}\,dx = (-1)^n\frac{n!^2}{(2n)!}\left[\frac{(x+1)^{2n+1}}{2n+1}\right],
\end{aligned}
\tag{C.47}
$$

damit folgt

$$
\int_{-1}^{1}P_n^2(x)\,dx = \frac{1}{2^{2n}n!^2}(-1)^n(2n)!\frac{1}{(2n)!}(-1)^n n!^2\frac{2^{2n+1}}{2n+1} = \frac{2}{2n+1}. \tag{C.48}
$$

Nun wird die Orthogonalität der Legendre-Polynome gezeigt, seien $n,m\in\mathbb{N}$ mit $n\neq m$, dann gilt

$$
\frac{d}{dx}\left[(1-x^2)\frac{d}{dx}\right]P_n(x) = -n(n+1)P_n(x) \tag{C.49}
$$

und analog für m. Man rechnet

$$
\int_{-1}^{1}P_m(x)\frac{d}{dx}\left[(1-x^2)\frac{d}{dx}\right]P_n(x)\,dx = -\int_{-1}^{(1)}P_m'(x)(1-x^2)P_n'(x)\,dx \tag{C.50}
$$

sowie

$$\int_{-1}^{1} P_n(x) \frac{d}{dx}\left[(1-x^2)\frac{d}{dx}\right] P_m(x)\,dx = -\int_{-1}^{1} P_n'(x)(1-x^2)P_m'(x)\,dx, \tag{C.51}$$

außerdem gelten

$$\int_{-1}^{1} P_m(x) \frac{d}{dx}\left[(1-x^2)\frac{d}{dx}\right] P_n(x)\,dx = -n(n+1)\int_{-1}^{1} P_m(x)P_n(x)\,dx, \tag{C.52}$$

$$\int_{-1}^{(1)} P_n(x) \frac{d}{dx}\left[(1-x^2)\frac{d}{dx}\right] P_m(x)(x)\,dx = -m(m+1)\int_{-1}^{1} P_n(x)P_m(x)\,dx. \tag{C.53}$$

Damit ist

$$-n(n+1)\int_{-1}^{1} P_m(x)P_n(x)\,dx = -m(m+1)\int_{-1}^{(1)} P_n(x)P_m(x)\,dx \tag{C.54}$$

und wegen $n \neq m$ ist

$$\int_{-1}^{1} P_n(x)P_m(x)\,dx = 0. \tag{C.55}$$

Damit ist zusammengefasst

$$\int_{-1}^{1} P_n(x)P_m(x)\,dx = \frac{2}{2n+1}\delta_{mn}. \tag{C.56}$$

Nun soll

$$(2l+1)\,xP_l(x) = (l+1)P_{l+1}(x) + lP_{l-1}(x) \tag{C.57}$$

gezeigt werden. Zunächst macht man sich klar, dass auf der linken wie auf der rechten Seite des Gleichheitszeichens Polynome vom Grad $l+1$ stehen mit jeweils nur geraden oder ungeraden Potenzen. Man schreibt

$$P_l(x) = \frac{1}{2^l}\frac{d^l}{dx^l}\sum_{k=0}^{l}\frac{1}{k!\,(l-k)!}x^{2k}(-1)^{l-k} = \frac{1}{2^l}\sum_{k=\left(\frac{l}{2}\right)_+}^{l}\frac{1}{k!\,(l-k)!}\frac{(2k)!}{(2k-l)!}x^{2k-l}(-1)^{l-k}, \tag{C.58}$$

dabei ist $\left(\frac{l}{2}\right)_+$ die kleinste natürliche Zahl $\geq \frac{l}{2}$. Daraus folgen

$$(2l+1)\,xP_l(x) = \frac{2l+1}{2^l}\sum_{k=\left(\frac{l}{2}\right)_+}^{l}\frac{1}{k!\,(l-k)!}\frac{(2k)!}{(2k-l)!}x^{2k-l+1}(-1)^{l-k}, \tag{C.59}$$

$$(l+1)\,P_{l+1}(x) = -\frac{1}{2^l 2}\sum_{k=\left(\frac{l+1}{2}\right)_+}^{l+1}\frac{l+1}{k!\,(l+1-k)!}\frac{(2k)!}{(2k-l-1)!}x^{2k-l-1}(-1)^{l-k} \tag{C.60}$$

$$= \frac{l+1}{2^l}\sum_{k=\left(\frac{l-1}{2}\right)_+}^{l}\frac{(2k+1)}{k!\,(l-k)!}\frac{(2k)!}{(2k-l+1)!}x^{2k-l+1}(-1)^{l-k} \tag{C.61}$$

$$P_{l-1}(x) = -\frac{2l}{2^l}\sum_{k=\left(\frac{l-1}{2}\right)_+}^{l-1}\frac{1}{k!\,(l-1-k)!}\frac{(2k)!}{(2k-l+1)!}x^{2k-l+1}(-1)^{l-k}. \tag{C.62}$$

Zwei Polynome sind genau dann gleich, wenn all ihre Koeffizienten gleich sind.

$$\begin{aligned} 4kl - 2l^2 + l + 2k + 1 &= 4kl + l + 2k + 1 - 2l^2 \\ \Leftrightarrow (2l+1)(2k-l+1) &= (l+1)(2k+1) - (l-k)\,2l \qquad \text{(C.63)} \\ \Leftrightarrow \frac{2l+1}{l-k}\frac{2k-l+1}{2k-l+1} &= \frac{l+1}{l-k}\frac{2k+1}{2k-l+1} - \frac{l-k}{l-k}\frac{2l}{2k-l+1} \\ \Leftrightarrow \frac{2l+1}{l-k} &= \frac{l+1}{l-k}\frac{2k+1}{2k-l+1} - \frac{2l}{2k-l+1} \qquad \text{(C.64)} \end{aligned}$$

Nun müssen noch die unteren und die oberen Grenzen der Summen untersucht werden. Für $k = l$ erhält man

$$2l + 1 = (l+1)\frac{2l+1}{2l-l+1}. \qquad \text{(C.65)}$$

Bei der unteren Grenze muss man eine Fallunterscheidung machen. Ist l gerade, ist alles gezeigt. Für l ungerade rechnet man

$$(l+1)\frac{l}{l-\frac{l-1}{2}} - 2l = 0. \qquad \text{(C.66)}$$

Für $l = 0$ gilt die Aussage ebenfalls. Damit ist Glg. (C.57) gezeigt. Aus dieser Gleichung folgt weiter

$$\cos(\theta)\,P_l(\cos(\theta)) = \frac{l+1}{2l+1}P_{l+1}(\cos(\theta)) + \frac{l}{2l+1}P_{l-1}(\cos(\theta)). \qquad \text{(C.67)}$$

Nun soll noch die Lösung von Glg. (D.50) für $m \neq 0$ besprochen werden. Diese DGL lautete

$$\frac{d}{d\mu}\left(1-\mu^2\right)P'(\mu) = P\left(-\lambda + \frac{m^2}{1-\mu^2}\right). \qquad \text{(C.68)}$$

Mit dem Ansatz

$$P(\mu) = \left(1-\mu^2\right)^{m/2} T(\mu) \qquad \text{(C.69)}$$

erhält man

$$\begin{aligned} P'(\mu) &= -\mu m\left(1-\mu^2\right)^{m/2-1} T(\mu) + \left(1-\mu^2\right)^{m/2} T'(\mu), \qquad \text{(C.70)} \\ \left(1-\mu^2\right)P'(\mu) &= -\mu m\left(1-\mu^2\right)^{m/2} T(\mu) + \left(1-\mu^2\right)^{m/2+1} T'(\mu). \qquad \text{(C.71)} \end{aligned}$$

Setzt man dies in Glg. (C.68) ein, erhält man

$$\begin{aligned} -m\left(1-\mu^2\right)^{m/2} T(\mu) + \mu^2 m^2\left(1-\mu^2\right)^{m/2-1} T(\mu) &- 2\mu(m+1)\left(1-\mu^2\right)^{m/2} T'(\mu) \\ + \left(1-\mu^2\right)^{m/2+1} T''(\mu) = -\lambda\left(1-\mu^2\right)^{m/2} T(\mu) &+ m^2\left(1-\mu^2\right)^{m/2-1} T(\mu) \\ \Leftrightarrow -mT(\mu) + \mu^2 m^2\left(1-\mu^2\right)^{-1} T(\mu) &- 2\mu(m+1)T'(\mu) + \left(1-\mu^2\right)T''(\mu) \\ &= -\lambda T(\mu) + m^2\left(1-\mu^2\right)^{-1} T(\mu) \\ \Leftrightarrow \left(1-\mu^2\right)T''(\mu) - 2\mu(m+1)T'(\mu) &= \left(-\lambda + m + m^2\frac{1-\mu^2}{1-\mu^2}\right)T(\mu) \\ \Leftrightarrow \left(1-\mu^2\right)T''(\mu) - 2\mu(m+1)T'(\mu) &= \left(-\lambda + m(m+1)\right)T(\mu). \qquad \text{(C.72)} \end{aligned}$$

Es wird wieder ein Potenzreihenansatz

$$T(\mu) = \sum_{i=0}^{\infty} a_i \mu^i \qquad \text{(C.73)}$$

gemacht. Man benötigt folgende Schreibweisen für die ersten beiden Ableitungen:

$$T'(\mu) = \sum_{i=1}^{\infty} i a_i \mu^{i-1} \tag{C.74}$$

$$T''(\mu) = \sum_{i=0}^{\infty} (i+2)(i+1) a_{i+2} \mu^{i} \tag{C.75}$$

$$T''(\mu) = \sum_{i=2}^{\infty} i(i-1) a_i \mu^{i-2} \tag{C.76}$$

Setzt man dies in Glg. (C.72) ein, erhält man wieder eine Rekursionsformel:

$$\begin{aligned} (i+2)(i+1) a_{i+2} - i(i-1) a_i - 2(m+1) i a_i &= (-\lambda + m(m+1)) a_i \\ \Leftrightarrow a_{i+2} = a_i \frac{-\lambda + (m+2i)(m+1) + i(i-1)}{(i+2)(i+1)} &= a_i \frac{-\lambda + (i+m+1)(i+m)}{(i+2)(i+1)} \end{aligned} \tag{C.77}$$

Da dies für hohe i nicht gegen Null geht, muss dies irgendwo abbrechen. Es muss also ein $I \in \mathbb{N}$ geben mit

$$\lambda = (I+m+1)(I+m). \tag{C.78}$$

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

$$\lambda = l(l+1). \tag{C.79}$$

Damit ist

$$l = I + m. \tag{C.80}$$

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

$$\lambda = l(l+1), \tag{C.81}$$

$$l = 0, 1, 2, 3, \ldots, \tag{C.82}$$

$$m = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \ldots, \pm l. \tag{C.83}$$

Durch Vergleich mit Glg. (C.69) 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

$$\frac{d}{d\mu}\left(1-\mu^2\right) T'_{l,m}(\mu) = 2\mu m T'_{l,m}(\mu) + (m(m+1) - \lambda) T_{l,m}(\mu). \tag{C.84}$$

Für $m = 0$ sind die Lösungen die bekannten Legendre-Polynome $P_l(\mu)$ Glg. (C.36). Ist die Lösung $T_{l,m}(\mu)$ bekannt und ist $m < l$, so folgt die Lösung $T_{l,m+1}(\mu)$ durch

$$T_{l,m+1}(\mu) = \frac{d}{d\mu} T_{l,m}(\mu). \tag{C.85}$$

Um dies zu zeigen leitet man zunächst Glg. (C.84) ab:

$$\begin{aligned} & -2T'_{l,m}(\mu) - 4\mu T''_{l,m}(\mu) + \left(1-\mu^2\right) T'''_{l,m}(\mu) = 2mT'_{l,m}(\mu) + 2\mu m T''_{l,m}(\mu) + (m(m+1) - \lambda) T'_{l,m}(\mu) \\ \Leftrightarrow\ & -2\mu T''_{l,m}(\mu) + \left(1-\mu^2\right) T'''_{l,m}(\mu) \\ =\ & 2(1+m) T'_{l,m}(\mu) + (m(m+1) - \lambda) T'_{l,m}(\mu) + 2\mu(1+m) T''_{l,m}(\mu) \end{aligned} \tag{C.86}$$

Indem man $T_{l,m+1} = T'_{l,m}$ einsetzt, folgt

$$\begin{aligned}
& \frac{d}{d\mu}\left(1-\mu^2\right) T'_{l,m+1}\left(\mu\right) = \frac{d}{d\mu}\left(1-\mu^2\right)\frac{d}{d\mu}T'_{l,m}\left(\mu\right) \\
= \; & -2\mu T''_{l,m}\left(\mu\right) + \left(1-\mu^2\right) T'''_{l,m}\left(\mu\right) = 2\left(1+m\right) T'_{l,m}\left(\mu\right) + \left(m\left(m+1\right)-\lambda\right) T'_{l,m}\left(\mu\right) + 2\mu\left(1+m\right) T''_{l,m}\left(\mu\right) \\
= \; & 2\mu\left(m+1\right) T'_{l,m+1}\left(\mu\right) + \left(\left(m+1\right)\left(m+2\right)-\lambda\right) T_{l,m+1}\left(\mu\right). \qquad \text{(C.87)}
\end{aligned}$$

Die Lösung $T_{l,m}\left(\mu\right)$ ist also die $m-$te Ableitung des $n-$ten Legendre-Polynoms

$$T_{l,m}\left(\mu\right) = \frac{d^m}{d\mu^m}P_l\left(\mu\right). \qquad \text{(C.88)}$$

Die vollständigen Lösungen $P_{l,m}$ von Glg. (C.68) werden als *assoziierte Legendre-Funktion* bezeichnet:

$$P_{l,m}\left(x\right) = \left(-1\right)^m\left(1-x^2\right)^{m/2}\frac{d^m}{dx^m}P_l\left(x\right) = \frac{\left(-\right)^m}{2^l l!}\left(1-x^2\right)^{m/2}\frac{d^{l+m}}{dx^{l+m}}\left(x^2-1\right)^l. \qquad \text{(C.89)}$$

Diese sind für ungerade m keine Polynome mehr und reduzieren sich für $m = 0$ auf die Legendre-Polynome Glg. (C.36). Es gilt

$$\begin{aligned}
\frac{d}{dx}P_{l,m}\left(x\right) &= -mx\left(-1\right)^m\left(1-x^2\right)^{\frac{m-2}{2}}\frac{d^m}{dx^m}P_l\left(x\right) + \left(-1\right)^m\left(1-x^2\right)^{m/2}\frac{d^{m+1}}{dx^{m+1}}P_l\left(x\right) \\
&= -\frac{mx}{1-x^2}P_{l,m}\left(x\right) - \frac{1}{\sqrt{1-x^2}}P_{l,m+1}\left(x\right). \qquad \text{(C.90)}
\end{aligned}$$

Aus Glg. (C.110) folgt

$$\begin{aligned}
\frac{d^n}{dx^n}\left(xf\left(x\right)\right) &= xf^{(n)} + nf^{(n-1)} \\
\Leftrightarrow xf^{(n)} &= \frac{d^n}{dx^n}\left(xf\left(x\right)\right) - nf^{(n-1)}. \qquad \text{(C.91)}
\end{aligned}$$

Außerdem gilt mit Glg. (C.67)

$$P_l = \frac{2l+3}{l+1}xP_{l+1} - \frac{l+2}{l+1}P_{l+2}. \qquad \text{(C.92)}$$

Somit erhält man

$$\begin{aligned}
P_{l,m}\left(x\right) &= \left(-1\right)^m\left(1-x^2\right)^{m/2}\frac{d^m}{dx^m}P_l\left(x\right) = \frac{\left(-1\right)^m}{l+1}\left(1-x^2\right)^{m/2}\frac{d^m}{dx^m}\left[\left(2l+3\right)xP_{l+1}\left(x\right) - \left(l+2\right)P_{l+2}\left(x\right)\right], \\
&= x\frac{\left(-1\right)^m\left(2l+3\right)}{l+1}\left(1-x^2\right)^{m/2}\frac{d^m}{dx^m}P_{l+1}\left(x\right) + m\frac{\left(-1\right)^m\left(2l+3\right)}{l+1}\left(1-x^2\right)^{m/2}\frac{d^{m-1}}{dx^{m-1}}P_{l+1}\left(x\right) \\
&\quad -\frac{\left(-1\right)^m\left(l+2\right)}{l+1}\left(1-x^2\right)^{m/2}\frac{d^m}{dx^m}P_{l+2}\left(x\right) \\
&= \frac{2l+3}{l+1}xP_{l+1,m} - m\frac{2l+3}{l+1}\sqrt{1-x^2}P_{l+1,m-1} - \frac{l+2}{l+1}P_{l+2,m} \\
\Rightarrow xP_{l+1,m} &= \frac{l+1}{2l+3}P_{l,m} + m\sqrt{1-x^2}P_{l+1,m-1} + \frac{l+2}{2l+3}P_{l+2,m} \\
\Rightarrow xP_{l,m} &= \frac{l}{2l+1}P_{l-1,m} + m\sqrt{1-x^2}P_{l,m-1} + \frac{l+1}{2l+1}P_{l+1,m}. \qquad \text{(C.93)}
\end{aligned}$$

Es gilt

$$P_{l,m-1}\left(x\right) = \left(-\right)^{m-1}\frac{1}{2^l l!}\left(1-x^2\right)^{\frac{m-1}{2}}\frac{d^{l+m-1}}{dx^{l+m-1}}\left(x^2-1\right)^l. \qquad \text{(C.94)}$$

Weiterhin ist

$$\begin{aligned}
\frac{d^{l+m+1}}{dx^{l+m+1}}\left(x^2-1\right)^{l+1} &= \frac{d^{l+m}}{dx^{l+m}}2\left(l+1\right)x\left(x^2-1\right)^l \\
&= \frac{d^{l+m-1}}{dx^{l+m-1}}\left[2\left(l+1\right)\left(x^2-1\right)^l+4x^2l\left(l+1\right)\left(x^2-1\right)^{l-1}\right] \\
&= \frac{d^{l+m-1}}{dx^{l+m-1}}\left[2\left(l+1\right)\left(x^2-1\right)^l+4l\left(l+1\right)\left(x^2-1\right)^l+4l\left(l+1\right)\left(x^2-1\right)^{l-1}\right] \\
&= 2\left(1+2l\right)\left(l+1\right)\frac{d^{l+m-1}}{dx^{l+m-1}}\left[\left(x^2-1\right)^l+4l\left(l+1\right)\left(x^2-1\right)^{l-1}\right]. \qquad \text{(C.95)}
\end{aligned}$$

Es gilt also

$$\frac{d^{l+m-1}}{dx^{l+m-1}}\left(x^2-1\right)^l = \frac{1}{2\left(1+2l\right)\left(l+1\right)}\frac{d^{l+m+1}}{dx^{l+m+1}}\left(x^2-1\right)^{l+1}-\frac{2l}{\left(2l+1\right)}\frac{d^{l+m-1}}{dx^{l+m-1}}\left(x^2-1\right)^{l-1}. \qquad \text{(C.96)}$$

Damit folgt

$$\begin{aligned}
&(-)^{m-1}\frac{1}{2^l l!}\left(1-x^2\right)^{\frac{m-1}{2}}\frac{d^{l+m-1}}{dx^{l+m-1}}\left(x^2-1\right)^l = (-)^{m-1}\frac{1}{2^{l+1}\left(l+1\right)!}\left(1-x^2\right)^{\frac{m-1}{2}}\frac{1}{\left(1+2l\right)}\frac{d^{l+m+1}}{dx^{l+m+1}}\left(x^2-1\right)^{l+1} \\
&-\frac{1}{2l+1}(-)^{m-1}\frac{1}{2^{l-1}\left(l-1\right)!}\left(1-x^2\right)^{\frac{m-1}{2}}\frac{d^{l+m-1}}{dx^{l+m-1}}\left(x^2-1\right)^{l-1}. \qquad \text{(C.97)}
\end{aligned}$$

Somit erhält man

$$\sqrt{1-x^2}P_{l,m-1} = -\frac{1}{2l+1}P_{l+1,m}+\frac{1}{2l+1}P_{l-1,m}. \qquad \text{(C.98)}$$

Es folgt

$$xP_{l,m} = \frac{l+m}{2l+1}P_{l-1,m}+\frac{l+1-m}{2l+1}P_{l+1,m}. \qquad \text{(C.99)}$$

Hiermit und mit Glg. (C.93) folgt

$$\begin{aligned}
\frac{l+m}{2l+1}P_{l-1,m}+\frac{l+1-m}{2l+1}P_{l+1,m} &= \frac{l}{2l+1}P_{l-1,m}+m\sqrt{1-x^2}P_{l,m-1}+\frac{l+1}{2l+1}P_{l+1,m} \\
\Rightarrow \sqrt{1-x^2}P_{l,m-1} &= \frac{1}{2l+1}P_{l-1,m}-\frac{1}{2l+1}P_{l+1,m} \\
\Rightarrow \sqrt{1-x^2}P_{l,m} &= \frac{1}{2l+1}P_{l-1,m+1}-\frac{1}{2l+1}P_{l+1,m+1}. \qquad \text{(C.100)}
\end{aligned}$$

Die Normierung der Legendre-Funktionen ergibt sich zu

$$\begin{aligned}
\int_{-1}^{1}P_{l,m}\left(x\right)^2dx &= \frac{1}{2^{2l}l!^2}\int_{-1}^{(1)}\left(1-x^2\right)^m\frac{d^{l+m}}{dx^{l+m}}\left(1-x^2\right)^l\frac{d^{l+m}}{dx^{l+m}}\left(1-x^2\right)^l dx \\
&\overset{m+l-\text{fache p.I.}}{=} \frac{1}{2^{2l}l!^2}(-1)^{m+l}(-1)^{m+l}\left(m+l\right)!\frac{\left(2l\right)!}{\left(l-m\right)!}\int_{-1}^{1}\left(1-x^2\right)^l dx \\
&= \frac{1}{2^{2l}l!^2}\frac{\left(m+l\right)!}{\left(l-m\right)!}\left(2l\right)!\int_{-1}^{1}\left(1+x\right)^l\left(1-x\right)^l dx \\
&\overset{l-\text{fache p.I.}}{=} \frac{1}{2^{2l}l!^2}\frac{\left(m+l\right)!}{\left(l-m\right)!}\left(2l\right)!\frac{l!}{\left(2l\right)!}l!\int_{-1}^{1}\left(1+x\right)^{2l}dx \\
&= \frac{1}{2^{2l}}\frac{\left(m+l\right)!}{\left(l-m\right)!}\frac{2^{2l+1}}{2l+1} = \frac{2}{2l+1}\frac{\left(l+m\right)!}{\left(l-m\right)!}. \qquad \text{(C.101)}
\end{aligned}$$

Des Weiteren gilt für $l \neq l'$ (o. B. d. A. kann man $l < l'$ annehmen):

$$\int_{-1}^{1}P_{l,m}\left(x\right)P_{l',m}\left(x\right)dx \propto \int_{-1}^{1}\left(1-x^2\right)^m\frac{d^{l+m}}{dx^{l+m}}\left(1-x^2\right)^l\frac{d^{l'+m}}{dx^{l'+m}}\left(1-x^2\right)^{l'}dx. \qquad \text{(C.102)}$$

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

$$\int_{-1}^{1} P_{l,m}(x)\, P_{l',m}(x)\, dx \quad \propto \quad \int_{-1}^{1} \frac{d^{l'-l}}{dx^{l'-l}}(1-x^2)^{l'}\, dx = 0. \tag{C.103}$$

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

$$\int_{-1}^{1} P_{l,m}(x)\, P_{l',m}(x)\, dx = \frac{2}{2l+1}\frac{(l+m)!}{(l-m)!}\delta_{l,l'}. \tag{C.104}$$

C.3 Hermite-Polynome

Die *Hermite-Polynome* werden definiert durch ihre Rodrigues-Formel

$$H_n(x) := (-)^n e^{x^2} \frac{d^n}{dx^n} e^{-x^2}. \tag{C.105}$$

Setzt man in Glg. (2.284) $\widetilde{E} - 1 = 2n$ ein, erhält man die *Hermite'sche Differenzialgleichung*

$$P_n'' - 2xP' + 2nP = 0. \tag{C.106}$$

Nun soll gezeigt werden, dass die Hermite-Polynome nach Glg. (C.105) diese DGL lösen und somit auch die Rekursionsformel Glg. (2.292) erfüllen. Es gelten ja

$$\frac{dH_n}{dx}(x) = (-)^n e^{x^2}\left[2x\frac{d^n}{dx^n}e^{-x^2} + \frac{d^{n+1}}{dx^{n+1}}e^{-x^2}\right], \tag{C.107}$$

$$\frac{d^2H_n}{dx^2}(x) = (-)^n e^{x^2}\left[4x^2\frac{d^n}{dx^n}e^{-x^2} + 4x\frac{d^{n+1}}{dx^{n+1}}e^{-x^2} + \frac{d^{n+2}}{dx^{n+2}}e^{-x^2} + 2\frac{d^n}{dx^n}e^{-x^2}\right]. \tag{C.108}$$

Setzt man all dies in die linke Seite der Hermite'schen DGL ein, erhält man

$$\begin{aligned}\left(\frac{d^n}{dx^n}e^{-x^2}\right)[2+2n] + \left(\frac{d^{n+1}}{dx^{n+1}}e^{-x^2}\right)[-2x+4x] + \left(\frac{d^{n+2}}{dx^{n+2}}e^{-x^2}\right) &= 0 \\ \Leftrightarrow \left[2(1+n)\frac{d^n}{dx^n} + 2x\frac{d^{n+1}}{dx^{n+1}} + \frac{d^{n+2}}{dx^{n+2}}\right]\exp(-x^2) &= 0.\end{aligned} \tag{C.109}$$

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

$$\begin{aligned}\frac{d^n}{dx^n}(f(x)\,g(x)) &= \frac{d^{n-1}}{dx^{n-1}}[f'g+fg'] = \frac{d^{n-2}}{dx^{n-2}}[f''g+2f'g'+fg''] \\ &= \sum_{k=0}^{n}\binom{n}{k} f^{(k)}g^{(n-k)}\end{aligned} \tag{C.110}$$

für $n \in \mathbb{N}$ und $f, g : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$, 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

$$\begin{aligned}\frac{d^{n+1}}{dx^{n+1}}(fg) &= \frac{d}{dx}\left(\frac{d^n}{dx^n}(fg)\right) = \frac{d}{dx}\sum_{k=0}^{n}\binom{n}{k} f^{(k)}g^{(n-k)} \\ &= \sum_{k=0}^{n}\binom{n}{k}\left[f^{(k+1)}g^{(n-k)} + f^{(k)}g^{(n+1-k)}\right],\end{aligned} \tag{C.111}$$

der Rest folgt analog zum Beweis des binomischen Lehrsatzes Glg. (A.16). Dies kann man verwenden, um

$$\begin{aligned} H_n'(x) &= 2x(-)^n e^{x^2}\frac{d^n}{dx^n}e^{-x^2} + (-)^n e^{x^2}\frac{d^{n+1}}{dx^{n+1}}e^{-x^2} \\ &= 2x(-)^n e^{x^2}\frac{d^n}{dx^n}e^{-x^2} + (-)^n e^{x^2}\frac{d^n}{dx^n}\left(-2xe^{-x^2}\right) \end{aligned} \tag{C.112}$$

zu vereinfachen. Im zweiten Summanden setze in Termen von Glg. (C.110) $f = -2x$ und $g = e^{-x^2}$, dann spielen in der Summe nur die Terme mit $k = 0$ und $k = 1$ eine Rolle, also

$$\frac{d^n}{dx^n}\left(-2xe^{-x^2}\right) = -2x\frac{d^n}{dx^n}e^{-x^2} - 2n\frac{d^{n-1}}{dx^{n-1}}e^{-x^2}. \tag{C.113}$$

Es gilt somit

$$H_n'(x) = 2nH_{n-1}(x). \tag{C.114}$$

Damit ist unmittelbar klar, dass gilt

$$H_n' = 2xH_n - H_{n+1} \Leftrightarrow nH_{n-1} + \frac{H_{n+1}}{2} = xH_n. \tag{C.115}$$

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

$$\int_{-\infty}^{\infty} H_n^2(x)\, e^{-x^2} dx = \sqrt{\pi}\, 2^n n!. \tag{C.116}$$

Um dies zu zeigen, mache man sich zunächst klar, dass gilt

$$\int_{-\infty}^{\infty} H_n(x)\, H_m(x)\, e^{-x^2} dx = 0, \tag{C.117}$$

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

$$\int_{-\infty}^{\infty} H_0^2(x)\, e^{-x^2} dx = \sqrt{\pi}. \tag{C.118}$$

Für $n = 1$ ist $H_1(x) = -2x$, also gilt

$$\int_{-\infty}^{\infty} H_1^2 e^{-x^2} dx = 4\int_{-\infty}^{\infty} x^2 e^{-x^2} dx = 2\int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2} dx = 2\sqrt{\pi}. \tag{C.119}$$

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 (C.114) und (C.115) auch

$$\begin{aligned} &\int_{-\infty}^{\infty} H_{n+1}^2 e^{-x^2} dx = 4\int_{-\infty}^{\infty}\left[x^2H_n^2 + n^2H_{n-1}^2 - 2xnH_{n-1}H_n\right] e^{-x^2} dx \\ = \;& 4n^2\sqrt{\pi}\,2^{n-1}(n-1)! + 4\int_{-\infty}^{\infty} x^2H_n^2 e^{-x^2} dx - 4n\int_{-\infty}^{\infty}\left[H_{n-1}'H_n + H_{n-1}H_n'\right] e^{-x^2} dx \\ = \;& 2n\sqrt{\pi}\,2^n n! + 2\int_{-\infty}^{\infty}\left[2xH_n'H_n + H_n^2\right] e^{-x^2} dx - 8n^2\sqrt{\pi}\,2^{n-1}(n-1)! \\ = \;& (2n - 4n)\sqrt{\pi}\,2^n n! + 2\int_{-\infty}^{\infty} H_n'^2 e^{-x^2} dx + 2\sqrt{\pi}\,2^n n! \\ = \;& \sqrt{\pi}\,2^n n!\,(2n) + 2\sqrt{\pi}\,2^n n! = \sqrt{\pi}\,2^{n+1}(n+1)!. \end{aligned} \tag{C.120}$$

Also gilt die Aussage auch für $n + 1$ und somit für alle $n \in \mathbb{N}$.

C.4 Laguerre-Polynome

Die Laguerre'sche Differenzialgleichung lautet

$$xP'' + (k + 1 - x)\,P' + nP = 0 \tag{C.121}$$

für $k \in \mathbb{N}$. Es wird für $P(x)$ ein Potenzreihenansatz gemacht,

$$P(x) = \sum_{i=0}^{\infty} a_i x^i. \tag{C.122}$$

Damit folgen

$$P'(x) = \sum_{i=0}^{\infty} i a_i x^{i-1} = \sum_{i=0}^{\infty} (i+1)\, a_{i+1} x^i, \tag{C.123}$$

$$P''(x) = \sum_{i=0}^{\infty} i\,(i+1)\, a_{i+1} x^{i-1}. \tag{C.124}$$

Setzt man dies ein, erhält man

$$i\,(i+1)\, a_{i+1} + (k+1)\,(i+1)\, a_{i+1} - i a_i + n a_i = 0 \Leftrightarrow a_{i+1} = a_i \frac{i-n}{(i+1)\,(i+k+1)}. \tag{C.125}$$

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

$$L_{n,k}(x) := \sum_{i=0}^{n} \binom{n+k}{n-i} \frac{(-)^{(i)}}{i!} x^{(i)}. \tag{C.126}$$

lösen Glg. (C.121) 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

$$\begin{aligned} a_i &= \frac{(n+k)!}{(n-i)!\,(k+i)!\,i!}\,(-)^{(i)} \\ \Leftrightarrow \frac{a_{i+1}}{a_i} &= -\frac{(n-i)!\,(k+i)!\,i!}{(n-i-1)!\,(k+i+1)!\,(i+1)!} = \frac{i-n}{(k+1+i)\,(i+1)}. \end{aligned} \tag{C.127}$$

Daher kann man Glg. (C.126) als Definition der Laguerre-Polynome ansehen. All dies kann man mit

$$n \rightarrow n_r, \tag{C.128}$$

$$k \rightarrow 2l + 1 \tag{C.129}$$

umschreiben zu

$$L_{n_r,2l+1}(x) := \sum_{i=0}^{n_r} \binom{n_r + 2l + 1}{n_r - i} \frac{(-)^{(i)}}{i!} x^{(i)} \tag{C.130}$$

und

$$xL''_{n_r,2l+1} + (2l + 2 - x)\, L'_{n_r,2l+1} + n_r L_{n_r,2l+1} = 0. \tag{C.131}$$

Dies ist die in Absch. 2.3.8 verwandte Formulierung. Die Rodrigues-Formel der Laguerre-Polynome lautet

$$P_{n,k}(x) = \frac{e^x}{n!x^k} \frac{d^n}{dx^n} \left[e^{-x} x^{n+k} \right]. \tag{C.132}$$

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

$$\frac{d^l}{dx^l} x^{n+k} = \frac{(n+k)!}{(n+k-l)!} x^{n+k-l} \tag{C.133}$$

Daraus folgt

$$\frac{d^n}{dx^n}\left[e^{-x}x^{n+k}\right] = \sum_{i=0}^{n} (-)^i e^{-x} \binom{n}{i} \frac{(n+k)!}{(k+i)!} x^{k+i} = \sum_{i=0}^{n} (-)^i e^{-x} \frac{n!}{i!\,(n-i)!} \frac{(n+k)!}{(k+i)!} x^{k+i}. \tag{C.134}$$

Damit erhält man

$$P_{n,k}(x) = \sum_{i=0}^{n} (-)^i \frac{1}{i!\,(n-i)!} \frac{(n+k)!}{(k+i)!} x^i = \sum_{i=0}^{n} \binom{n+k}{n-i} \frac{(-)^{(i)}}{i!} x^{(i)}. \tag{C.135}$$

Die Rodrigues-Formel entspricht also der expliziten Darstellung Glg. (C.126). Die Laguerre-Polynome erfüllen die Integraleigenschaft

$$\int_0^\infty x^{k+1} e^{-x} L_{n,k}(x)^2\, dx = \frac{(n+k)!}{n!}(2n+k+1). \tag{C.136}$$

Hierzu rechnet man

$$\begin{aligned} \int_0^\infty x^{k+1} e^{-x} L_{n,k}(x)^2\, dx &= \int_0^\infty x^{k+1} e^{-x} L_{n,k}(x) \frac{e^x}{n! x^k} \frac{d^n}{dx^n}\left[e^{-x}x^{n+k}\right] dx \\ &= \frac{1}{n!}\int_0^\infty x L_{n,k}(x) \frac{d^n}{dx^n}\left[e^{-x}x^{n+k}\right] dx = \frac{1}{n!}(-1)^n \int_0^\infty e^{-x}x^{n+k} \frac{d^n}{dx^n} x L_{n,k}(x)\, dx. \end{aligned} \tag{C.137}$$

Nach der expliziten Darstellung Glg. (C.126) gilt

$$\begin{aligned} \frac{d^n}{dx^n} x L_{n,k}(x) &= (-)^n (n+1)\, x + n! \frac{(-)^{n-1}}{(n-1)!} \frac{(n+k)!}{(n+k-1)!} \\ &= (-)^n (n+1)\, x + n (-)^{n-1} (n+k). \end{aligned} \tag{C.138}$$

Mit Glg. (A.104) folgt

$$\begin{aligned} \int_0^\infty \ldots dx &= \frac{(-)^n}{n!}\left[(-)^n (n+1)(n+k+1)! - n(-)^n (n+k)(n+k)!\right] \\ &= \frac{(n+k)!}{n!}\left[(n+1)(n+k+1) - n(n+k)\right] = \frac{(n+k)!}{n!}(2n+k+1). \end{aligned} \tag{C.139}$$

Weiter gilt für $k \geq 2$

$$\int_0^\infty x^{k-2}\left[L_{n,k}(x)\right]^2 \exp(-x)\, dx = \frac{(n+k)!}{n!} \frac{2n+k+1}{(k-1)\,k\,(k+1)}. \tag{C.140}$$

Hierzu rechnet man mit

$$\begin{aligned} \int_0^\infty x^{k-2} e^{-x} L_{n,k}(x)^2\, dx &= \int_0^\infty x^{k-2} e^{-x} L_{n,k}(x) \frac{e^x}{n! x^k} \frac{d^n}{dx^n}\left[e^{-x}x^{n+k}\right] dx \\ &= \frac{1}{n!}\int_0^\infty \frac{1}{x^2} L_{n,k}(x) \frac{d^n}{dx^n}\left[e^{-x}x^{n+k}\right] dx = \frac{1}{n!}(-1)^n \int_0^\infty e^{-x}x^{n+k} \frac{d^n}{dx^n}\left[\frac{1}{x^2} L_{n,k}(x)\right] dx. \end{aligned} \tag{C.141}$$

$L_{n,k}$ ist ein Polynom vom Grad n, also ist $L_{n,k}/x^2$ vom Grad $n-2$. Schreibe

$$L_{n,k} = a + bx + \mathcal{O}(x^2), \tag{C.142}$$

dementsprechend gilt

$$\frac{d}{dx^n}\frac{L_{n,k}}{x^2} = \frac{d}{dx^n}\left(\frac{a}{x^2}+\frac{b}{x}\right) = (-)^n\left(a\,(n+1)!x^{-2-n}+n!bx^{-n-1}\right). \tag{C.143}$$

Nach der expliziten Darstellung Glg. (C.126) gelten

$$a = \frac{(n+k)!}{n!k!}, \tag{C.144}$$

$$b = -\frac{(n+k!)}{(n-1)!\,(k+1)!}. \tag{C.145}$$

Somit folgt

$$\begin{aligned}\frac{d}{dx^n}\frac{L_{n,k}}{x^2} &= (-)^n\left(\frac{(n+k)!}{n!k!}(n+1)!x^{-2-n}-\frac{(n+k)!}{(n-1)!\,(k+1)!}n!x^{-n-1}\right)\\ &= (-)^n(n+k)!\left[\frac{(n+1)}{k!}x^{-2-n}-\frac{n}{(k+1)!}x^{-n-1}\right].\end{aligned} \tag{C.146}$$

Hiermit erhält man

$$e^{-x}x^{n+k}\frac{d}{dx^n}\frac{L_{n,k}}{x^2} = e^{-x}(-)^n(n+k)!\left[\frac{(n+1)}{k!}x^{k-2}-\frac{n}{(k+1)!}x^{k-1}\right]. \tag{C.147}$$

Mit Glg. (A.104) folgt

$$\begin{aligned}\int_0^\infty \ldots dx &= \frac{(n+k)!}{n!}\left[\frac{(n+1)}{k\,(k-1)}-\frac{n}{k\,(k+1)}\right]\\ &= \frac{(n+k)!}{n!}\left[\frac{(n+1)\,(k+1)}{k\,(k-1)\,(k+1)}-\frac{n\,(k-1)}{k\,(k+1)\,(k-1)}\right]\\ &= \frac{(n+k)!}{n!}\frac{2n+k+1}{k\,(k+1)\,(k-1)}.\end{aligned} \tag{C.148}$$

C.5 Kugelflächenfunktionen

Die Abhängigkeiten der Lösung Glg. (D.44) 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

$$Y_{l,m}(\theta,\varphi) = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}\frac{(l-m)!}{(l+m)!}}P_{l,m}(\cos(\theta))\exp(im\varphi). \tag{C.149}$$

mit den assoziierten Legendre-Funktionen $P_{l,m}(x)$, Glg. (C.89). Die Vorfaktoren ergeben sich aus der Normierung

$$\int_{\theta=0}^{\pi}\int_{\varphi=0}^{2\pi}\left|Y_{l,m}(\theta,\varphi)\right|^2\sin(\theta)\,d\varphi d\theta \stackrel{!}{=} 1, \tag{C.150}$$

die nun verifiziert wird:

$$\begin{aligned}&\frac{2l+1}{4\pi}\frac{(l-m)!}{(l+m)!}\int_{\theta=0}^{\pi}\int_{\varphi=0}^{2\pi}\left(P_{l,m}(\cos(\theta))\right)^2\sin(\theta)\,d\varphi d\theta\\ =\ &\frac{2l+1}{2}\frac{(l-m)!}{(l+m)!}\int_{-1}^{1}P_{l,m}(z)^2\,dz = 1\end{aligned} \tag{C.151}$$

Weiterhin sind die Kugelflächenfunktionen orthogonal. Für $m \neq m'$ gilt nämlich

$$\begin{aligned} & \int_{\theta=0}^{\pi} \int_{\varphi=0}^{2\pi} Y_{l,m}\left(\theta,\varphi\right)^{\star} Y_{l',m'}\left(\theta,\varphi\right) \sin\left(\theta\right) d\varphi d\theta \\ \propto & \int_{\theta=0}^{\pi} \int_{\varphi=0}^{2\pi} \exp\left(i\left(m-m'\right)\varphi\right) d\varphi P_{l,m}^{\star}\left(\cos\left(\theta\right)\right) P_{l',m'}\left(\cos\left(\theta\right)\right) \sin\left(\theta\right) d\theta = 0. \end{aligned} \tag{C.152}$$

Für $l \neq l'$ erhält man

$$\int_{\theta=0}^{\pi} \int_{\varphi=0}^{2\pi} Y_{l,m}\left(\theta,\varphi\right)^{\star} Y_{l',m}\left(\theta,\varphi\right) \sin\left(\theta\right) d\varphi d\theta = 2\pi \int_{-1}^{1} P_{l,m}\left(z\right) P_{l',m}\left(z\right) dz \overset{(C.103)}{=} 0. \tag{C.153}$$

Zusammenfassend erhält man

$$\int_{\theta=0}^{\pi} \int_{\varphi=0}^{2\pi} Y_{l,m}\left(\theta,\varphi\right)^{\star} Y_{l',m'}\left(\theta,\varphi\right) \sin\left(\theta\right) d\varphi d\theta = \delta_{l,l'}\delta_{m,m'}. \tag{C.154}$$

Weiterhin gilt

$$\Delta_{\theta,\varphi} Y_{l,m}\left(\theta,\varphi\right) = -l\left(l+1\right) Y_{l,m}\left(\theta,\varphi\right) \tag{C.155}$$

mit

$$\Delta_{\theta,\varphi} = \Delta_{\mu,\varphi} = \frac{\partial}{\partial\mu}\left(1-\mu^2\right)\frac{\partial}{\partial\mu} + \frac{1}{1-\mu^2}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}, \tag{C.156}$$

als Winkelanteil des Laplace-Operators und $\mu = \cos\left(\theta\right)$. Es gilt

$$\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2} Y_{l,m} = -m^2 Y_{l,m}\left(\theta,\varphi\right), \tag{C.157}$$

somit ist hier

$$\Delta_{\mu,\varphi} = \frac{\partial}{\partial\mu}\left(1-\mu^2\right)\frac{\partial}{\partial\mu} - \frac{m^2}{1-\mu^2}. \tag{C.158}$$

Für die assoziierten Legendre-Polynome $P_{l,m}\left(\mu\right)$ gilt die DGL (C.68)

$$\frac{d}{d\mu}\left(1-\mu^2\right) P'_{l,m}\left(\mu\right) - \frac{m^2}{1-\mu^2} P_{l,m}\left(\mu\right) = -l\left(l+1\right) P_{l,m}\left(\mu\right). \tag{C.159}$$

Somit folgt

$$\Delta_{\theta,\varphi} Y_{l,m}\left(\theta,\varphi\right) = -l\left(l+1\right) Y_{l,m}\left(\theta,\varphi\right). \tag{C.160}$$

Aus Glg. (C.90) folgt

$$\frac{\partial}{\partial\theta} Y_{l,m}\left(\theta,\varphi\right) = m\cot\left(\theta\right) Y_{l,m}\left(\cos\left(\theta\right)\right) + \sqrt{l^2-m^2+l-m}\, Y_{l,m+1}\left(\cos\left(\theta\right)\right)\exp\left(-i\varphi\right). \tag{C.161}$$

Weiterhin gilt

$$\frac{\partial}{\partial\varphi} Y_{l,m}\left(\theta,\varphi\right) = im Y_{l,m}\left(\theta,\varphi\right). \tag{C.162}$$

Damit folgt

$$\begin{aligned} & \exp\left(\pm i\varphi\right)\left(i\cot\left(\theta\right)\frac{\partial}{\partial\varphi} \pm \frac{\partial}{\partial\theta}\right) Y_{l,m}\left(\theta,\varphi\right) = -m\cot\left(\theta\right)\exp\left(\pm i\varphi\right) Y_{l,m}\left(\theta,\varphi\right) \\ \pm & \exp\left(\pm i\varphi\right) m\cot\left(\theta\right) Y_{l,m}\left(\cos\left(\theta\right)\right) \pm \sqrt{l^2-m^2+l-m}\exp\left(\pm i\varphi\right) Y_{l,m+1}\left(\theta,\varphi\right)\exp\left(-i\varphi\right) \end{aligned}$$

Es gilt also

$$\hat{L}_+ Y_{l,m}\left(\theta,\varphi\right) = \sqrt{l^2 - m^2 + l - m}\, Y_{l,m+1}\left(\theta,\varphi\right). \tag{C.163}$$

Somit folgt für die Eigenzustände $|n,l,m\rangle$ im Wasserstoffatom

$$\hat{L}_+|n,l,m\rangle = \sqrt{l^2 - m^2 + l - m}\,|n,l,m\rangle. \tag{C.164}$$

Aus Glg. (C.99) folgt

$$\begin{aligned}
\cos\left(\theta\right) Y_{l,m} &= \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}\frac{(l-m)!}{(l+m)!}}\cos\left(\theta\right) P_{l,m}\left(\cos\left(\theta\right)\right)\exp\left(im\varphi\right) \\
&= \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}\frac{(l-m)!}{(l+m)!}}\left[\frac{l+m}{2l+1}P_{l-1,m} + \frac{l-m+1}{2l+1}P_{l+1,m}\right]\exp\left(im\varphi\right) \\
&= \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}\frac{(l-m)!}{(l+m)!}}\frac{l+m}{2l+1}P_{l-1,m}\exp\left(im\varphi\right) + \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}\frac{(l-m)!}{(l+m)!}}\frac{l-m+1}{2l+1}P_{l+1,m}\exp\left(im\varphi\right) \\
&= \frac{l+m}{2l+1}\sqrt{\frac{2l+1}{2l-1}\frac{l-m}{l+m}}\sqrt{\frac{2l-1}{4\pi}\frac{(l-1-m)!}{(l-1+m)!}}P_{l-1,m}\exp\left(im\varphi\right) \\
&\quad + \frac{l-m+1}{2l+1}\sqrt{\frac{2l+1}{2l+3}\frac{l+1+m}{l+1-m}}\sqrt{\frac{2l+3}{4\pi}\frac{(l+1-m)!}{(l+1+m)!}}P_{l+1,m}\exp\left(im\varphi\right) \\
&= \frac{l+m}{2l+1}\sqrt{\frac{2l+1}{2l-1}\frac{l-m}{l+m}}Y_{l-1,m} + \frac{l-m+1}{2l+1}\sqrt{\frac{2l+1}{2l+3}\frac{l+1+m}{l+1-m}}Y_{l+1,m} \\
&= \sqrt{\frac{l^2-m^2}{4l^2-1}}Y_{l-1,m} + \sqrt{\frac{(l+1)^2-m^2}{4(l+1)^2-1}}Y_{l+1,m}.
\end{aligned} \tag{C.165}$$

Aus Glg. (C.100) folgt

$$\begin{aligned}
\sin\left(\theta\right) Y_{l,m} &= \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}\frac{(l-m)!}{(l+m)!}}\sin\left(\theta\right) P_{l,m}\left(\cos\left(\theta\right)\right)\exp\left(im\varphi\right) \\
&= \frac{1}{2l+1}\sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}\frac{(l-m)!}{(l+m)!}}\left[P_{l-1,m+1}\left(\cos\left(\theta\right)\right) - P_{l+1,m+1}\left(\cos\left(\theta\right)\right)\right]\exp\left(im\varphi\right) \\
&= \frac{1}{2l+1}\sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}\frac{(l-m)!}{(l+m)!}}P_{l-1,m+1}\left(\cos\left(\theta\right)\right)\exp\left(im\varphi\right) \\
&\quad - \frac{1}{2l+1}\sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}\frac{(l-m)!}{(l+m)!}}P_{l+1,m+1}\left(\cos\left(\theta\right)\right)\exp\left(im\varphi\right) \\
&= \frac{1}{2l+1}\sqrt{\frac{2l+1}{2l-1}\left(l-m-1\right)\left(l-m\right)}\sqrt{\frac{2l-1}{4\pi}\frac{(l-m-2)!}{(l+m)!}}P_{l-1,m+1}\left(\cos\left(\theta\right)\right)\exp\left(im\varphi\right) \\
&\quad - \frac{1}{2l+1}\sqrt{\frac{2l+1}{2l+3}\left(l+m+1\right)\left(l+m+2\right)}\sqrt{\frac{2l+3}{4\pi}\frac{(l-m)!}{(l+m+2)!}}P_{l+1,m+1}\left(\cos\left(\theta\right)\right)\exp\left(im\varphi\right) \\
&= \sqrt{\frac{1}{4l^2-1}\left(l-m-1\right)\left(l-m\right)}e^{-i\varphi}Y_{l-1,m+1} \\
&\quad - \sqrt{\frac{1}{4l^2+8l+3}\left(l+m+1\right)\left(l+m+2\right)}e^{-i\varphi}Y_{l+1,m+1}.
\end{aligned} \tag{C.166}$$

C.5.1 Produkte

D Geodäsie

D.1 Konvention über Koordinatensysteme

D.1.1 Ruhende Koordinaten

Hier wählt man eine Basis $\boldsymbol{e}_1, \boldsymbol{e}_2, \boldsymbol{e}_3$, die am Erdmittelpunkt steht und nicht mit der Erde mitrotiert. $\boldsymbol{e}_1$ und $\boldsymbol{e}_2$ liegen dabei in der Äquatorebene, $\boldsymbol{e}_3$ zeigt in Richtung Nordpol. Das Windfeld $\boldsymbol{v}$ wird als

$$\boldsymbol{v} = u_1 \boldsymbol{e}_1 + u_2 \boldsymbol{e}_2 + u_3 \boldsymbol{e}_3 \tag{D.1}$$

geschrieben. Das Windfeld ist dabei nicht gleich der in diesem System gemessenen Teilchenbewegung, da noch die Rotation der Erde überlagert ist.

$$\text{Teilchenbewegung in ruhenden Koordinaten} = \text{Windfeld} + \text{Erdrotation}$$

D.1.2 Globale Koordinaten

Hier wählt man eine Basis $\boldsymbol{e}_x, \boldsymbol{e}_y, \boldsymbol{e}_z$, die genau wie die Basis der ruhenden Koordinaten am Erdmittelpunkt steht, jedoch mitrotiert. $\boldsymbol{e}_x$ zeigt in Richtung des Schnittpunkts zwischen Nullmeridian und Äquator, $\boldsymbol{e}_y$ zeigt in Richtung des Schnittpunkts zwischen neunzigstem Längengrad und Äquator und $\boldsymbol{e}_z$ zeigt in Richtung Nordpol. Das Windfeld schreibt man als

$$\boldsymbol{v} = u_x \boldsymbol{e}_x + u_y \boldsymbol{e}_y + u_z \boldsymbol{e}_z. \tag{D.2}$$

D.1.3 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 $\theta + \varphi = \pi/2$

$$\sin(\varphi) = \sin(\pi/2 - \theta) = \cos(\theta), \tag{D.3}$$

$$\cos(\varphi) = \cos(\pi/2 - \theta) = \sin(\theta), \tag{D.4}$$

$$\tan(\theta) = \frac{\sin(\theta)}{\cos(\theta)} = \frac{\cos(\varphi)}{\sin(\varphi)} = \frac{1}{\tan(\varphi)}, \tag{D.5}$$

$$v_\theta = -v_y, \tag{D.6}$$

$$\frac{\partial}{\partial \theta} = -\frac{\partial}{\partial \varphi}. \tag{D.7}$$

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 $\boldsymbol{i}, \boldsymbol{j}, \boldsymbol{k}$. Das Windfeld $\boldsymbol{v}$ schreibt man als

$$\boldsymbol{v} = u\boldsymbol{i} + v\boldsymbol{j} + w\boldsymbol{k}. \tag{D.8}$$

D.2 Sphärische Geometrie

D.2.1 Geodäten

Hier soll die kürzeste Verbindungslinie zwischen zwei Punkten (φ_i, λ_i) auf einer Kugel mit $i = 1, 2$ entlang der Kugeloberfläche bestimmt werden. Die Länge L einer beliebigen Verbindungslinie berechnet sich zu

$$L = \int ds = \int_0^1 \left| \frac{d\boldsymbol{r}}{d\tau} \right| d\tau, \tag{D.9}$$

wobei $\tau \in [0, 1]$ ein Parameter ist, mit dem man sich entlang der Verbindungslinie bewegen kann und $\boldsymbol{r}(\tau)$ die Trajektorie festlegt. Dabei gelten insbesondere $\boldsymbol{r}(0) = \boldsymbol{r}(\varphi_1, \lambda_1)$ sowie $\boldsymbol{r}(1) = \boldsymbol{r}(\varphi_2, \lambda_2)$.

Gehe zunächst von der Kugel aus, hier kann man für die Bestimmung der Funktionen $\varphi(\tau), \lambda(\tau)$ zunächst von der Einheitskugel ausgehen und den Radius ignorieren. Dann gelten

$$\boldsymbol{r}(0) = \begin{pmatrix} \cos(\varphi_1)\cos(\lambda_1) \\ \cos(\varphi_1)\sin(\lambda_1) \\ \sin(\varphi_1) \end{pmatrix}, \tag{D.10}$$

$$\boldsymbol{r}(1) = \begin{pmatrix} \cos(\varphi_2)\cos(\lambda_2) \\ \cos(\varphi_2)\sin(\lambda_2) \\ \sin(\varphi_2) \end{pmatrix}. \tag{D.11}$$

Definiere eine Funktion

$$\boldsymbol{r}'(\tau') := \tau'\boldsymbol{r}(1) + (1-\tau')\boldsymbol{r}(0). \tag{D.12}$$

Dann gilt

$$\varphi(\tau') = \arcsin(\tau'\sin(\varphi_2) + (1-\tau')\sin(\varphi_1)). \tag{D.13}$$

Ferner gilt

$$\begin{aligned} \lambda(\tau') = {} & \operatorname{arctan2}\big[\tau'\cos(\varphi_2)\sin(\lambda_2) + (1-\tau')\cos(\varphi_1)\sin(\lambda_1), \\ & \tau'\cos(\varphi_2)\cos(\lambda_2) + (1-\tau')\cos(\varphi_1)\cos(\lambda_1)\big] \ (+2\pi \text{ im Fall } \operatorname{arctan2} < 0). \end{aligned} \tag{D.14}$$

Für den Abstand d zwischen zwei Punkten $(r_a, \varphi_a, \lambda_a)$ und $(r_b, \varphi_b, \lambda_b)$ gilt

$$\begin{aligned} d &= \sqrt{(x_b - x_a)^2 + (y_b - y_a)^2 + (z_b - z_a)^2} \\ &= \sqrt{(r_b\cos(\varphi_b)\cos(\lambda_b) - r_a\cos(\varphi_a)\cos(\lambda_a))^2 + (r_b\cos(\varphi_b)\sin(\lambda_b) - r_a\cos(\varphi_a)\sin(\lambda_a))^2} \\ &\quad \overline{+ (r_b\sin(\varphi_b) - r_a\sin(\varphi_a))^2} \\ &= \sqrt{r_b^2\cos^2(\varphi_b) + r_a^2\cos^2(\varphi_a) + r_b^2\sin^2(\varphi_b) + r_a^2\sin^2(\varphi_a) - 2r_ar_b\cos(\varphi_b)\cos(\lambda_b)\cos(\varphi_a)\cos(\lambda_a)} \\ &\quad \overline{-2r_ar_b\cos(\varphi_b)\sin(\lambda_b)\cos(\varphi_a)\sin(\lambda_a) - 2r_br_a\sin(\varphi_b)\sin(\varphi_a)} \\ &= \sqrt{r_a^2 + r_b^2 - 2r_ar_b\cos(\varphi_b)\cos(\varphi_a)(\cos(\lambda_b)\cos(\lambda_a) + \sin(\lambda_b)\sin(\lambda_a)) - 2r_br_a\sin(\varphi_b)\sin(\varphi_a)} \\ &= \sqrt{r_a^2 + r_b^2 - 2r_ar_b(\cos(\varphi_a)\cos(\varphi_b)\cos(\lambda_a - \lambda_b) + \sin(\varphi_a)\sin(\varphi_b))} \end{aligned} \tag{D.15}$$

Im Fall $r_a = r_b = r$ gilt

$$d = r\sqrt{2 - 2(\cos(\varphi_a)\cos(\varphi_b)\cos(\lambda_a - \lambda_b) + \sin(\varphi_a)\sin(\varphi_b))}. \tag{D.16}$$

Der Abstand zwischen zwei Punkten auf einer Kugel lässt sich hieraus leicht errechnen. Sei eine Kugel mit Radius r gegeben. Dann ist der Abstand Δ zwischen zwei Punkten auf der Oberfläche, gemessen entlang der Oberfläche, gegeben durch

$$\Delta = r\theta, \tag{D.17}$$

wobei θ der Winkel zwischen den beiden Punkten ist, für diesen Winkel gilt

$$\sin\left(\frac{\theta}{2}\right) = \frac{d}{2r}. \tag{D.18}$$

Es gilt also wegen $\frac{\theta}{2} \in \left[0, \frac{\pi}{2}\right]$ für den Abstand Δ die Gleichung

$$\Delta = 2r\arcsin\left(\sqrt{\frac{1}{2} - \frac{1}{2}(\cos(\varphi_a)\cos(\varphi_b)\cos(\lambda_a - \lambda_b) + \sin(\varphi_a)\sin(\varphi_b))}\right). \tag{D.19}$$

Nun muss noch τ in τ' umgerechnet werden. Es gilt

$$\tau = \frac{1}{2} + \frac{1}{\theta}\arctan\left(\frac{\tau' - \frac{1}{2}}{\sqrt{r^2 - \frac{d^2}{4}}}d\right) = \frac{1}{2} + \frac{1}{\theta}\arctan\left(\frac{\tau' - \frac{1}{2}}{\sqrt{\frac{r^2}{d^2} - \frac{1}{4}}}\right). \tag{D.20}$$

Hieraus folgt

$$\tau' = \frac{1}{2} + \sqrt{\frac{r^2}{d^2} - \frac{1}{4}}\tan\left[\theta\left(\tau - \frac{1}{2}\right)\right]. \tag{D.21}$$

$$\tag{D.22}$$

D.2.2 Vertikale Flächen

Für vertikale Flächen A_v mit der Grundlänge L und derselben Bezeichung für die Radien gilt

$$A_v = \int_{r_0}^{r_1} L\frac{r}{r_0}dr = \frac{L}{2r_0}\left(r_1^2 - r_0^2\right). \tag{D.23}$$

D.2.3 Volumina

Volumina V mit der Grundfläche A, dem inneren Radius r_0 und dem äußeren Radius r_1 berechnen sich über

$$V = \int_{r_0}^{r_1} A\frac{r^2}{r_0^2}dr = \frac{A}{r_0^2}\frac{1}{3}\left(r_1^3 - r_0^3\right). \tag{D.24}$$

D.2.4 Sphärische Dreiecke

D.2.5 Sphärische Voronoi-Gitter

D.3 Schwerefeld der Erde

D.3.1 Eigenschaften von Ellipsen und Ellipsoiden

Eine *Ellipse* in der xz-Ebene wird beschrieben durch

$$\frac{x^2}{a^2} + \frac{z^2}{c^2} = 1. \tag{D.25}$$

Dabei ist $a > 0$ die *große Halbachse* (maximale Ausdehung der Ellipse in x-Richtung) und $0 < c < a$ die *kleine Halbachse* (maximale Ausdehung der Ellipse in z-Richtung). Die *Exzentrizität* wird zu

$$\varepsilon := \frac{a - c}{a} \tag{D.26}$$

definiert. Damit erhält man

$$c = a\left(1 - \varepsilon\right). \tag{D.27}$$

In Polarkoordinaten folgen mit

$$x = r\cos\left(\varphi\right), \tag{D.28}$$
$$z = r\sin\left(\varphi\right) \tag{D.29}$$

die Gleichungen

$$\begin{aligned}
\frac{r^2}{a^2}\cos^2\left(\varphi\right) + \frac{r^2}{c^2}\sin^2\left(\varphi\right) &= 1 \\
\Rightarrow r\left(\varphi\right) &= \left[\frac{\cos^2\left(\varphi\right)}{a^2} + \frac{\sin^2\left(\varphi\right)}{c^2}\right]^{-1/2} = a\left[\cos^2\left(\varphi\right) + \frac{a^2}{c^2}\sin^2\left(\varphi\right)\right]^{-1/2} \\
\Rightarrow r\left(\varphi\right) &= a\left[1 + \left(\frac{a^2}{c^2} - 1\right)\sin^2\left(\varphi\right)\right]^{-1/2}.
\end{aligned} \tag{D.30}$$

Mit

$$\frac{a^2}{c^2} - 1 = \frac{1}{(1-\varepsilon)^2} - 1 = \frac{1-(1-\varepsilon)^2}{(1-\varepsilon)^2} = \frac{2\varepsilon - \varepsilon^2}{(1-\varepsilon)^2} \tag{D.31}$$

kann man dies zu

$$r(\varphi) = a\left[1 + \frac{2\varepsilon - \varepsilon^2}{(1-\varepsilon)^2}\sin^2(\varphi)\right]^{-1/2}. \tag{D.32}$$

umschreiben. Aus Glg (D.31) folgt weiter

$$a^2 - c^2 = c^2\frac{2\varepsilon - \varepsilon^2}{(1-\varepsilon)^2} = a^2\varepsilon(2-\varepsilon). \tag{D.33}$$

Ein *Rotationsellipsoid* oder auch einfach *Ellipsoid* entsteht, indem man die eben untersuchte Ellipse um die z-Ache rotieren lässt. Sein Volumen V berechnet sich zu

$$\begin{aligned} V &= \int_{-c}^{c}\int_{0}^{a\sqrt{1-\frac{z^2}{c^2}}} 2\pi x dx dz = 2\pi\int_{-c}^{c}\left[\frac{1}{2}x^2\right]_0^{a\sqrt{1-\frac{z^2}{c^2}}} dz \\ &= 2\pi\int_{-c}^{c}\frac{1}{2}a^2\left(1-\frac{z^2}{c^2}\right)dz = \pi\int_{-c}^{c} a^2 - \frac{a^2}{c^2}z^2 dz = \pi 2a^2c - \pi\frac{a^2}{c^2}\frac{2}{3}c^3 \\ &= \pi 2a^2c - \frac{2}{3}\pi a^2 c = \frac{4}{3}\pi a^2 c \end{aligned} \tag{D.34}$$

D.3.2 Ellipsoidische Approximation des Schwerefeldes

Die ellipsoidischen Koordinaten werden sich am Geopotential φ_g der Erde orientieren, für welches gilt

$$\varphi_g = \varphi_z + \varphi_0, \tag{D.35}$$

hierbei sind φ_z das Fliehpotential und φ_0 das Gravitationspotential der Erde. Für das Fliehpotential gilt

$$\varphi_z = -\frac{1}{2}\left(\omega^2\left(x^2+y^2\right)\right), \tag{D.36}$$

denn durch Gradientenbildung ergibt sich

$$-\nabla\varphi_z = \omega^2\begin{pmatrix} x \\ y \\ 0 \end{pmatrix} = -\begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \omega \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} -\omega y \\ \omega x \\ 0 \end{pmatrix} = -\boldsymbol{\omega} \times (\boldsymbol{\omega} \times \boldsymbol{r}). \tag{D.37}$$

Es gilt der Zusammenhang

$$\boldsymbol{a} = -\nabla\varphi_g \tag{D.38}$$

zwischen dem Gravitationspotential φ_g und der Gravitationsbeschleunigung $\boldsymbol{a}$. Das Newton'sche Gravitationsgesetz kann man dann schreiben als

$$\nabla\cdot\boldsymbol{a} = -4\pi G\varrho \tag{D.39}$$

mit ϱ als Massenverteilung, denn hieraus ergibt sich im Falle einer Punktmasse M am Ursprung mit dem Gauß'schen Satz

$$-4\pi GM = a4\pi r^2 \Leftrightarrow a = -G\frac{M}{r^2}. \tag{D.40}$$

In Termen des Gravitationspotentials wird dies zu

$$\Delta\varphi_g = 4\pi G\varrho \tag{D.41}$$

bzw.

$$\Delta\varphi_g = 0 \tag{D.42}$$

außerhalb der Erde. Dies nennt man eine Laplace'sche Differenzialgleichung. Diese ist zu lösen, um das Gravitationspotential der Erde zu bestimmen. Allgemein kann man ein Integral

$$\varphi_0(\boldsymbol{r}) = -G\varrho \int_E \frac{1}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|} d^3r' \tag{D.43}$$

hierfür aufstellen, hierbei ist E die Erde, dieses ist jedoch im Falle einer ellipsoidischen Menge E nicht analytisch zu lösen. Daher wird φ_g nach bestimmten Funktionen entwickelt. Als Ansatz wird mit $\mu := \cos(\theta)$ ein Separationsansatz

$$\varphi_g(r,\mu,\varphi) = \frac{U(r)}{r} P(\mu)\, Q(\varphi)\,. \tag{D.44}$$

gemacht. Setzt man dies in $\Delta\varphi_g = 0$ ein, erhält man mit Glg. (B.102) und der Feststellung

$$\frac{1}{r}\frac{\partial^2}{\partial r^2}(rf) = \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}(f + rf') = \frac{2}{r}f' + f'' = \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial f}{\partial r}\right), \tag{D.45}$$

hierbei ist $f = f(r)$ und $f' := \frac{\partial f}{\partial r}$

$$\begin{aligned} PQ\frac{U''}{r} + UQ\frac{1}{r^3}\frac{\partial}{\partial\mu}\left(1-\mu^2\right)P' + \frac{UP}{r^3\left(1-\mu^2\right)}Q'' &= 0 \\ \Leftrightarrow r^2\left(1-\mu^2\right)\frac{1}{v}U'' + \frac{1}{P}\left(1-\mu^2\right)\frac{\partial}{\partial\mu}\left(1-\mu^2\right)P' &= -\frac{Q''}{Q}. \end{aligned} \tag{D.46}$$

Die linke Seite von Glg. (D.46) hängt nicht von φ ab, während die rechte Seite nicht von μ und r abhängt, daher sind beide gleich einer Separationskonstanten m^2. Für Q gilt somit

$$Q'' = -m^2 Q, \tag{D.47}$$

was gelöst wird durch

$$Q(\varphi) = \exp(im\varphi)\,. \tag{D.48}$$

Da $Q(\varphi) = Q(\varphi + 2\pi)$ gilt, ist $m \in \mathbb{Z}$. Nun teilt man Glg. (D.46) durch $1-\mu^2$ und setzt die rechte Seite gleich m^2, man erhält dann

$$r^2\frac{U''}{v} = -\frac{1}{P}\frac{\partial}{\partial\mu}\left(1-\mu^2\right)P'(\mu) + \frac{m^2}{1-\mu^2}. \tag{D.49}$$

Beide Seiten sind gleich einer neuen Separationskonstanten λ. Man erhält zwei Differenzialgleichungen, eine für P und eine für U, die für P lautet

$$\frac{d}{d\mu}\left(1-\mu^2\right)P'(\mu) = P\left(-\lambda + \frac{m^2}{1-\mu^2}\right) \tag{D.50}$$

und die für U lautet

$$r^2U'' - \lambda U = 0. \tag{D.51}$$

Für das Geopotential genügt Zylindersymmetrie, also $m = 0$. Dann erhält man

$$\frac{d}{d\mu}\left(1-\mu^2\right)P'(\mu) = -\lambda P. \tag{D.52}$$

Setzt man in Glg. (D.51) $\lambda = n(n+1)$ ein, erhält man

$$r^2U'' - n(n+1)U = 0. \tag{D.53}$$

U hängt von n ab, schreibe U_n. Man stellt fest, dass

$$U_n(r) = r^{n+1} \tag{D.54}$$

und

$$U_n(r) = r^{-n} \tag{D.55}$$

Lösungen sind und somit die allgemeine Lösung der gewöhnlichen DGL zweiter Ordnung Glg. (D.54) gegeben ist durch

$$U_n(r) = a_n r^{n+1} + \frac{b_n}{r^n}. \tag{D.56}$$

Nun sind Lösungen der Form

$$\varphi_g^{(n)}(r,\mu) = \frac{U_n(r)}{r} P_n(\mu) \tag{D.57}$$

gefunden, da die Laplace-Gleichung (D.42) linear in φ_g ist, sind beliebige Linearkombinationen hiervon wieder Lösungen und man erhält als allgemeine Lösung

$$\varphi_g(r,\mu) = \sum_{n=0}^{\infty} \left(a_n r^n + \frac{b_n}{r^{n+1}} \right) P_n(\mu). \tag{D.58}$$

Die spezielle Lösung für den Fall des rotierenden Ellipsoids ist durch die Randbedingungen festgelegt. Diese lautet

$$\varphi_g(x,z) = 0 \tag{D.59}$$

für

$$\frac{x^2}{a^2} + \frac{z^2}{c^2} = 1, \tag{D.60}$$

hierbei sind a die große und c die kleine Halbachse der Erde. An dieser Stelle wird die Summe in Glg. (D.58) bei $n = 2$ abgebrochen und es wird nur der Gravitationsanteil betrachtet:

$$\varphi_0 = \left(a_0 + \frac{b_0}{r}\right) P_0(\sin(\chi)) + \left(a_1 r + \frac{b_1}{r^2}\right) P_1(\sin(\chi)) + \left(a_2 r^2 + \frac{b_2}{r^3}\right) P_2(\sin(\chi)) \tag{D.61}$$

χ ist die geozentrische Breite (im Gegensatz zur geodätischen Breite). Es gilt $\chi + \theta = \pi/2$. Die ersten drei Legendre-Polynome lauten

$$P_0(\sin(\chi)) = 1, \tag{D.62}$$

$$P_1(\sin(\chi)) = \frac{1}{2} 2\sin(\chi) = \sin(\chi), \tag{D.63}$$

$$P_2(\sin(\chi)) = \frac{1}{8}\left(12\sin^2(\chi) - 4\right) = \frac{3}{2}\sin^2(\chi) - \frac{1}{2}. \tag{D.64}$$

Damit lautet der Ausdruck für φ_g

$$\varphi_0 = a_0 + \frac{b_0}{r} + \left(a_1 r + \frac{b_1}{r^2}\right)\sin(\chi) + \left(\frac{a_2}{2} r^2 + \frac{b_2^2}{2r^3}\right)\left(3\sin^2(\chi) - 1\right). \tag{D.65}$$

Ziel ist nun die Berechnung der Koeffizienten $a_0, a_1, a_2, b_0, b_1, b_2$. Wegen der üblichen Randbedingung $\lim_{r\to\infty} \varphi_0(r) = 0$ gilt jedoch

$$a_0 = a_1 = a_2 = 0, \tag{D.66}$$

außerdem sollte die Lösung in unendlichem Abstand zu $-G\frac{M}{r}$ werden, da die ellipsoidische Massenverteilung von weitem aussieht wie eine Punktmasse, also erwartet man

$$b_0 = -GM. \tag{D.67}$$

Frei sind noch die Koeffizienten b_1 und b_2:

$$\varphi_0 = -\frac{GM}{r} + \frac{b_1}{r^2}\sin(\chi) + \frac{b_2}{2r^3}\left(3\sin^2(\chi) - 1\right). \tag{D.68}$$

Um diese zu bestimmen, berechnet man das Gravitationspotential auf der z-Achse ($z = r > c$). Dort gilt mit $\chi = \pi/2$

$$\varphi_0(r) = -\frac{GM}{r} + \frac{b_1(\varepsilon)}{r^2} + \frac{b_2(\varepsilon)}{r^3}. \tag{D.69}$$

Hierbei wurde angenommen, dass die b_i von der Exzentrizität ε abhängen. Man nimmt also eine homogene Erde der Dichte ϱ an und integriert

$$\begin{aligned}
\varphi_0(r) &= -G\varrho\int_{z=-c}^{c}\int_0^{a\sqrt{1-\frac{z^2}{c^2}}}\frac{1}{\sqrt{(r-z)^2+x^2}}2\pi x dx dz = -2\pi G\varrho\int_{z=-c}^{c}\left[\sqrt{(r-z)^2+x^2}\right]_0^{a\sqrt{1-\frac{z^2}{c^2}}}dz \\
&= -2\pi G\varrho\int_{-c}^{c}\sqrt{(z-r)^2+a^2\left(1-\frac{z^2}{c^2}\right)} - r + z dz = -2\pi G\varrho\int_{-c}^{c}\sqrt{r^2+z^2\left(1-\frac{a^2}{c^2}\right)-2zr+a^2} - r + z dz \\
&= 2\pi G\varrho r 2c - 2\pi G\varrho\int_{-c}^{c}\sqrt{\left(1-\frac{a^2}{c^2}\right)z^2-2zr+a^2+r^2}dz \\
&= 4\pi G\varrho c r - 2\pi G\varrho\int_{-c}^{c}\sqrt{Az^2+Bz+C}dz = 2\pi G\varrho\left(2cr - \int_{-c}^{c}\sqrt{Az^2+Bz+C}dz\right)
\end{aligned} \tag{D.70}$$

mit

$$A = 1 - \frac{a^2}{c^2}, \tag{D.71}$$

$$B = -2r, \tag{D.72}$$

$$C = a^2 + r^2. \tag{D.73}$$

Diese Formel kann man zunächst auf einen einfachen Grenzfall überprüfen, nämlich den Fall einer Kugel $a = c$. In diesem Fall erhält man

$$\begin{aligned}
\varphi_0(r) &= 2\pi G\varrho\left(2ar - \int_{-c}^{c}\sqrt{r^2-2zr+a^2}dz\right) = 2\pi G\varrho\left(2ar - \left[-\frac{1}{3r}\left(r^2-2zr+a^2\right)^{3/2}\right]_{-c}^{c}\right) \\
&= 2\pi G\varrho\left(2ar + \left[\frac{1}{3r}\left(r^2-2ar+a^2\right)^{3/2} - \frac{1}{3r}\left(r^2+2ar+a^2\right)\right]\right) \\
&= 2\pi G\varrho\left(2ar + \frac{1}{3r}\left[(r-a)^3 - (r+a)^3\right]\right) \\
&= 2\pi G\varrho\left(2ar + \frac{1}{3r}\left[\left(r^2-a^2-2ar\right)(r-a) - \left(r^2+a^2+2ar\right)(r+a)\right]\right) \\
&= 2\pi G\varrho(2ar + \frac{1}{3r}[r^3+r^2a+a^2r-a^3-2ar^2+2a^2r-r^3-r^2a-a^2r-a^3-2ar^2-2a^2r]) \\
&= 2\pi G\varrho\left(2ar + \frac{1}{3r}\left[-6r^2a-2a^3\right]\right) = 2\pi G\varrho\left(2ar - 2ra - \frac{2}{3}\frac{a^3}{r}\right) = -\frac{4\pi G\varrho a^3}{3r} \\
&= -GM\frac{1}{r}.
\end{aligned} \tag{D.74}$$

Das Gravitationspotential einer homogenen Vollkugel ist also außerhalb der Kugel gleich dem einer Punktmasse am Ort des Schwerpunktes der Kugel. Es gilt nach [1] Glg. (3.3.37)

$$\int\sqrt{Ax^2+Bx+C}dx = \frac{2Ax+B}{4A}\sqrt{Ax^2+Bx+C} + \frac{4AC-B^2}{8A}\int\frac{dx}{\sqrt{Ax^2+Bx+C}}. \tag{D.75}$$

Hierbei ist

$$\int \frac{dx}{\sqrt{Ax^2+Bx+C}} = -\frac{1}{\sqrt{-A}}\arcsin\frac{2Ax+B}{\sqrt{B^2-4AC}}. \tag{D.76}$$

Die Voraussetzungen hierfür sind

$$\begin{aligned} A &< 0, \\ B^2 > 4AC \Leftrightarrow 4r^2 &> 4\left(1-\frac{a^2}{c^2}\right)(a^2+r^2) \\ \Leftrightarrow r^2 &> a^2+r^2-\frac{a^4}{c^2}-a^2\frac{r^2}{c^2}, \\ |2Ax+B| < \sqrt{B^2-4AC} \Leftrightarrow \left|2\left(1-\frac{a^2}{c^2}\right)x-2r\right| &< \sqrt{4r^2+4\left(a^2+r^2\right)\left(\frac{a^2}{c^2}-1\right)} \\ \Leftrightarrow \left|x\left(1-\frac{a^2}{c^2}\right)-r\right| &< \sqrt{r^2-a^2-r^2+\frac{a^4}{c^2}+r^2\frac{a^2}{c^2}} \\ \Leftarrow c\left(\frac{a^2}{c^2}-1\right)+r &< a\sqrt{\frac{a^2}{c^2}-1+\frac{r^2}{c^2}}. \end{aligned} \tag{D.77, D.78}$$

Für $r = c$ werden die letzten beiden Ausdrücke gleich. Die Ableitung des linken Ausdrucks nach r ist

$$\frac{d}{dr}\left(c\left(\frac{a^2}{c^2}-1\right)+r\right) = 1, \tag{D.79}$$

die Ableitung des rechten Ausdrucks nach r ist

$$\frac{d}{dr}a\sqrt{\frac{a^2}{c^2}-1+\frac{r^2}{c^2}} = a\frac{2r}{c^2}\frac{1}{2}\frac{1}{\sqrt{\frac{a^2}{c^2}-1+\frac{r^2}{c^2}}} = \frac{ra}{c\sqrt{a^2-c^2+r^2}}. \tag{D.80}$$

Dieser Ausdruck ist für $r = c$ gleich Eins und für $r \to \infty$ gleich $a/c > 1$, die Ableitung

$$\begin{aligned} \frac{d}{dr}\frac{ra}{c\sqrt{a^2-c^2+r^2}} &\propto ac\sqrt{a^2-c^2+r^2} - racr\frac{1}{\sqrt{a^2-c^2+r^2}} \\ &\propto ac\left(a^2-c^2+r^2\right) - r^2ac > 0 \end{aligned} \tag{D.81}$$

ist überall positiv und somit ist

$$\frac{d}{dr}a\sqrt{\frac{a^2}{c^2}-1+\frac{r^2}{c^2}} > 1 \tag{D.82}$$

für $r > c$. Somit ist die Ungleichung (D.78) für $r > c$ erfüllt und die Integralformel

$$\int \sqrt{Ax^2+Bx+C}dx = \frac{2Ax+B}{4A}\sqrt{Ax^2+Bx+C} - \frac{4AC-B^2}{8A}\frac{1}{\sqrt{-A}}\arcsin\frac{2Ax+B}{\sqrt{B^2-4AC}} \tag{D.83}$$

kann angewandt werden. Es gilt also

$$\begin{aligned} &\int_{-c}^{c}\sqrt{Ax^2+Bx+C}dx \\ = \; & \frac{2Ac+B}{4A}\cdot\sqrt{Ac^2+Bc+C} - \frac{4AC-B^2}{8A}\frac{1}{\sqrt{-A}}\arcsin\left(\frac{2Ac+B}{\sqrt{B^2-4AC}}\right) - \frac{B-2Ac}{4A}\cdot\sqrt{Ac^2-Bc+C} \\ & + \frac{4AC-B^2}{8A}\frac{1}{\sqrt{-A}}\arcsin\left(\frac{-2Ac+B}{\sqrt{B^2-4AC}}\right) = \frac{2Ac+B}{4A}\sqrt{Ac^2+Bc+C} + \frac{4AC-B^2}{8A\sqrt{-A}}\cdot \\ & \cdot\left[\arcsin\left(\frac{B-2Ac}{\sqrt{B^2-4AC}}\right) - \arcsin\left(\frac{2Ac+B}{\sqrt{B^2-4AC}}\right)\right] - \frac{B-2Ac}{4A}\sqrt{Ac^2-Bc+C}. \end{aligned} \tag{D.84}$$

Hier setzt man nun A, B und C ein und erhält mit

$$\begin{aligned}
\sqrt{Ac^2+Bc+C} &= \sqrt{c^2-a^2-2rc+a^2+r^2}=\sqrt{c^2+r^2-2rc}=r-c, && \text{(D.85)}\\
\sqrt{Ac^2-Bc+C} &= \sqrt{c^2-a^2+2rc+a^2+r^2}=r+c, && \text{(D.86)}\\
B-2Ac &= -2r-2c+2\frac{a^2}{c}=2\left(\frac{a^2}{c}-r-c\right), && \text{(D.87)}\\
B+2Ac &= -2r+2c-2\frac{a^2}{c}=2\left(c-r-\frac{a^2}{c}\right), && \text{(D.88)}\\
B^2-4AC &= 4r^2-4\left(1-\frac{a^2}{c^2}\right)(a^2+r^2)=-4a^2+4\frac{a^4}{c^2}+4\frac{a^2r^2}{c^2}=4\frac{a^2}{c^2}\left(a^2+r^2-c^2\right), && \text{(D.89)}\\
& \frac{2Ac+B}{4A}\sqrt{Ac^2+Bc+C}-\frac{B-2Ac}{4A}\sqrt{Ac^2-Bc+C}\\
&= \frac{2\left(c-r-\frac{a^2}{c}\right)}{4-4\frac{a^2}{c^2}}(r-c)-\frac{2\left(\frac{a^2}{c}-r-c\right)}{4-4\frac{a^2}{c^2}}(r+c)\\
&= \frac{4cr-2a^2r/c}{2-2a^2/c^2}=\frac{2c^3r-a^2rc}{c^2-a^2}=rc\frac{a^2-2c^2}{a^2-c^2}, && \text{(D.90)}\\
\frac{4AC-B^2}{8A\sqrt{-A}} &= -\frac{4\frac{a^2}{c^2}\left(a^2+r^2-c^2\right)}{8\left(1-\frac{a^2}{c^2}\right)\sqrt{\frac{a^2}{c^2}-1}}=-\frac{a^2\left(a^2+r^2-c^2\right)}{2\left(c^2-a^2\right)\sqrt{\frac{a^2}{c^2}-1}}\\
&= -\frac{a^2+r^2-c^2}{2\left(\frac{c^2}{a^2}-1\right)\sqrt{\frac{a^2}{c^2}-1}}=a^2c\frac{a^2+r^2-c^2}{2\left(a^2-c^2\right)\sqrt{a^2-c^2}}, && \text{(D.91)}\\
\frac{B-2Ac}{\sqrt{B^2-4AC}} &= \frac{2\left(\frac{a^2}{c}-r-c\right)}{2\frac{a}{c}\sqrt{a^2+r^2-c^2}}=\frac{a^2-rc-c^2}{a\sqrt{a^2+r^2-c^2}}, && \text{(D.92)}\\
\frac{2Ac+B}{\sqrt{B^2-4AC}} &= \frac{2\left(c-r-\frac{a^2}{c}\right)}{2\frac{a}{c}\sqrt{a^2+r^2-c^2}}=\frac{c^2-rc-a^2}{a\sqrt{a^2+r^2-c^2}} && \text{(D.93)}
\end{aligned}$$

die Gleichung

$$\begin{aligned}
\int_{-c}^{c}\ldots dx &= a^2c\frac{a^2+r^2-c^2}{2\left(a^2-c^2\right)^{3/2}}\cdot\left[\arcsin\left(\frac{a^2-rc-c^2}{a\sqrt{a^2+r^2-c^2}}\right)-\arcsin\left(\frac{c^2-rc-a^2}{a\sqrt{a^2+r^2-c^2}}\right)\right]\\
&\quad +rc\frac{a^2-2c^2}{a^2-c^2}. && \text{(D.94)}
\end{aligned}$$

Für das Gravitationspotential auf der z-Achse folgt also mit

$$4cr-2cr\frac{a^2-2c^2}{a^2-c^2}=rc\frac{4a^2-4c^2-2a^2+4c^2}{a^2-c^2}=2rc\frac{a^2}{a^2-c^2} \tag{D.95}$$

die Rechnung

$$\begin{aligned}
\varphi_{\text{o}}(r) &= \pi G\varrho\left(4cr-2rc\frac{a^2-2c^2}{a^2-c^2}-a^2c\frac{a^2+r^2-c^2}{\left(a^2-c^2\right)^{3/2}}\cdot\left[\arcsin\left(\frac{a^2-rc-c^2}{a\sqrt{a^2+r^2-c^2}}\right)-\arcsin\left(\frac{c^2-rc-a^2}{a\sqrt{a^2+r^2-c^2}}\right)\right]\right)\\
&= \pi G\varrho\left(rc\frac{2a^2}{a^2-c^2}-a^2c\frac{a^2+r^2-c^2}{\left(a^2-c^2\right)^{3/2}}\cdot\left[\arcsin\left(\frac{a^2-rc-c^2}{a\sqrt{a^2+r^2-c^2}}\right)-\arcsin\left(\frac{c^2-rc-a^2}{a\sqrt{a^2+r^2-c^2}}\right)\right]\right)\\
&= \pi G\varrho\frac{a^2c}{a^2-c^2}\left(2r-\frac{a^2+r^2-c^2}{\sqrt{a^2-c^2}}\cdot\left[\arcsin\left(\frac{a^2-rc-c^2}{a\sqrt{a^2+r^2-c^2}}\right)-\arcsin\left(\frac{c^2-rc-a^2}{a\sqrt{a^2+r^2-c^2}}\right)\right]\right). && \text{(D.96)}
\end{aligned}$$

Hier kann man die Masse der Erde

$$M=\frac{4}{3}\pi\varrho a^2c\Rightarrow\pi\varrho a^2c=\frac{3M}{4} \tag{D.97}$$

einbauen:

$$\begin{aligned}\varphi_0(r) &= G\frac{M}{a^2-c^2}\left(\frac{3}{2}r-\frac{3}{4}\frac{a^2+r^2-c^2}{\sqrt{a^2-c^2}}\cdot\right.\\ &\quad\left.\cdot\left[\arcsin\left(\frac{a^2-rc-c^2}{a\sqrt{a^2+r^2-c^2}}\right)-\arcsin\left(\frac{c^2-rc-a^2}{a\sqrt{a^2+r^2-c^2}}\right)\right]\right)\end{aligned} \tag{D.98}$$

Mit Glg. (D.33) folgt für das Gravitationspotential

$$\begin{aligned}\varphi_0(r) &= G\frac{M}{a^2\varepsilon(2-\varepsilon)}\left(\frac{3}{2}r-\frac{3}{4}\frac{a^2\varepsilon(2-\varepsilon)+r^2}{a\sqrt{\varepsilon(2-\varepsilon)}}\cdot\right.\\ &\quad\left.\cdot\left[\arcsin\left(\frac{a^2\varepsilon(2-\varepsilon)-ra(1-\varepsilon)}{a\sqrt{a^2\varepsilon(2-\varepsilon)+r^2}}\right)-\arcsin\left(-\frac{a^2\varepsilon(2-\varepsilon)+ra(1-\varepsilon)}{a\sqrt{a^2\varepsilon(2-\varepsilon)+r^2}}\right)\right]\right)\\ &= G\frac{M}{a\varepsilon(2-\varepsilon)}\left(\frac{3}{2}\frac{r}{a}-\frac{3}{4}\frac{\varepsilon(2-\varepsilon)+r^2/a^2}{\sqrt{\varepsilon(2-\varepsilon)}}\cdot\right.\\ &\quad\left.\cdot\left[\arcsin\left(\frac{\varepsilon(2-\varepsilon)-\frac{r}{a}(1-\varepsilon)}{\sqrt{\varepsilon(2-\varepsilon)+\frac{r^2}{a^2}}}\right)-\arcsin\left(-\frac{\varepsilon(2-\varepsilon)+\frac{r}{a}(1-\varepsilon)}{\sqrt{\varepsilon(2-\varepsilon)+\frac{r^2}{a^2}}}\right)\right]\right)\\ &= \frac{3GM}{2a\varepsilon(2-\varepsilon)}\left(\frac{r}{a}-\frac{\varepsilon(2-\varepsilon)+r^2/a^2}{2\sqrt{\varepsilon(2-\varepsilon)}}\cdot\left[\arcsin\left(\frac{\varepsilon(2-\varepsilon)-\frac{r}{a}(1-\varepsilon)}{\sqrt{\varepsilon(2-\varepsilon)+\frac{r^2}{a^2}}}\right)\right.\right.\\ &\quad\left.\left.+\arcsin\left(\frac{\varepsilon(2-\varepsilon)+\frac{r}{a}(1-\varepsilon)}{\sqrt{\varepsilon(2-\varepsilon)+\frac{r^2}{a^2}}}\right)\right]\right).\end{aligned} \tag{D.99}$$

Glg. (D.99) ist die Grundlage für die theoretische Untersuchung des Schwerefeldes eines Rotationsellipsoiden. Sie ist exakt für Exzentrizitäten $\varepsilon \neq 0$, ist jedoch für $\varepsilon = 0$ nicht anwendbar. Leider ist der Ausdruck noch nicht von der Form der Glg. (D.69). Um dies zu erreichen, entwickelt man ihn in dem kleinen Parameter $\varepsilon \ll 1$. Dazu definiert man die Abkürzungen

$$f_1(\varepsilon) := \frac{\varepsilon(2-\varepsilon)-\frac{r}{a}(1-\varepsilon)}{\sqrt{\varepsilon(2-\varepsilon)+\frac{r^2}{a^2}}}, \tag{D.100}$$

$$f_2(\varepsilon) := \frac{\varepsilon(2-\varepsilon)+\frac{r}{a}(1-\varepsilon)}{\sqrt{\varepsilon(2-\varepsilon)+\frac{r^2}{a^2}}}. \tag{D.101}$$

Zur Vorbereitung rechnet man bereits jetzt

$$\begin{aligned}f_1'(\varepsilon) &= \frac{\left(2-2\varepsilon+\frac{r}{a}\right)\sqrt{\varepsilon(2-\varepsilon)+\frac{r^2}{a^2}}-\left[\varepsilon(2-\varepsilon)-\frac{r}{a}(1-\varepsilon)\right]\frac{1}{2}(2-2\varepsilon)\frac{1}{\sqrt{\varepsilon(2-\varepsilon)+\frac{r^2}{a^2}}}}{\varepsilon(2-\varepsilon)+\frac{r^2}{a^2}}\\ &= \frac{\left(2-2\varepsilon+\frac{r}{a}\right)\left(\varepsilon(2-\varepsilon)+\frac{r^2}{a^2}\right)-\left[\varepsilon(2-\varepsilon)-\frac{r}{a}(1-\varepsilon)\right](1-\varepsilon)}{\left[\varepsilon(2-\varepsilon)+\frac{r^2}{a^2}\right]^{3/2}}\\ &= \frac{2(1-\varepsilon)\varepsilon(2-\varepsilon)+2(1-\varepsilon)\frac{r^2}{a^2}+\frac{r}{a}\varepsilon(2-\varepsilon)+\frac{r^3}{a^3}-\varepsilon(2-\varepsilon)(1-\varepsilon)+\frac{r}{a}(1-\varepsilon)^2}{\left[\varepsilon(2-\varepsilon)+\frac{r^2}{a^2}\right]^{3/2}}\\ &= \frac{\varepsilon(1-\varepsilon)(2-\varepsilon)+\frac{r^3}{a^3}+\frac{r^2}{a^2}2(1-\varepsilon)+\frac{r}{a}}{\left[\varepsilon(2-\varepsilon)+\frac{r^2}{a^2}\right]^{3/2}}\end{aligned} \tag{D.102}$$

und

$$
\begin{aligned}
f_2'(\varepsilon) &= \frac{\left(2-2\varepsilon-\frac{r}{a}\right)\sqrt{\varepsilon(2-\varepsilon)+\frac{r^2}{a^2}}-\left[\varepsilon(2-\varepsilon)+\frac{r}{a}(1-\varepsilon)\right]\frac{1}{2}(2-2\varepsilon)\frac{1}{\sqrt{\varepsilon(2-\varepsilon)+\frac{r^2}{a^2}}}}{\varepsilon(2-\varepsilon)+\frac{r^2}{a^2}} \\
&= \frac{\left(2-2\varepsilon-\frac{r}{a}\right)\left(\varepsilon(2-\varepsilon)+\frac{r^2}{a^2}\right)-\left[\varepsilon(2-\varepsilon)+\frac{r}{a}(1-\varepsilon)\right](1-\varepsilon)}{\left[\varepsilon(2-\varepsilon)+\frac{r^2}{a^2}\right]^{3/2}} \\
&= \frac{2(1-\varepsilon)\varepsilon(2-\varepsilon)+2(1-\varepsilon)\frac{r^2}{a^2}-\frac{r}{a}\varepsilon(2-\varepsilon)-\frac{r^3}{a^3}-\varepsilon(2-\varepsilon)(1-\varepsilon)-\frac{r}{a}(1-\varepsilon)^2}{\left[\varepsilon(2-\varepsilon)+\frac{r^2}{a^2}\right]^{3/2}} \\
&= \frac{\varepsilon(1-\varepsilon)(2-\varepsilon)-\frac{r^3}{a^3}+\frac{r^2}{a^2}2(1-\varepsilon)-\frac{r}{a}}{\left[\varepsilon(2-\varepsilon)+\frac{r^2}{a^2}\right]^{3/2}}. \qquad \text{(D.103)}
\end{aligned}
$$

Das Gravitationspotential schreibt sich damit als

$$
\varphi_0(r) = \frac{3GM}{2a}\frac{2\frac{r}{a}(\varepsilon(2-\varepsilon))^{1/2}-\left(\varepsilon(2-\varepsilon)+\frac{r^2}{a^2}\right)\left[\arcsin(f_1(\varepsilon))+\arcsin(f_2(\varepsilon))\right]}{2(\varepsilon(2-\varepsilon))^{3/2}}. \qquad \text{(D.104)}
$$

Dies wird mit

$$
\begin{aligned}
g(\varepsilon) &:= 2\frac{r}{a}(\varepsilon(2-\varepsilon))^{1/2}-\left(\varepsilon(2-\varepsilon)+\frac{r^2}{a^2}\right)\left[\arcsin(f_1(\varepsilon))+\arcsin(f_2(\varepsilon))\right], && \text{(D.105)} \\
h(\varepsilon) &:= 2(\varepsilon(2-\varepsilon))^{3/2}, && \text{(D.106)} \\
F(\varepsilon) &:= \frac{g(\varepsilon)}{h(\varepsilon)} && \text{(D.107)}
\end{aligned}
$$

zu

$$
\varphi_0(r) = \frac{3GM}{2a}\frac{g(\varepsilon)}{h(\varepsilon)} = \frac{3}{2}\frac{GM}{a}F(\varepsilon). \qquad \text{(D.108)}
$$

Das Ziel ist nun, $F(\varepsilon)$ bis zur ersten Ordnung in ε zu entwickeln:

$$
\varphi_0(r) = \frac{3}{2}\frac{GM}{a}\left(F(0)+F'(0)\varepsilon+\mathcal{O}(\varepsilon^2)\right) \qquad \text{(D.109)}
$$

Wegen $h(0)=0$ ist dies nicht direkt möglich, sondern man muss die Ersetzungen

$$
\begin{aligned}
F(0) &\to \lim_{x\downarrow 0} F(x), && \text{(D.110)} \\
F'(0) &\to \lim_{x\downarrow 0} F'(x) && \text{(D.111)}
\end{aligned}
$$

vornehmen. Es ist wegen

$$
f_1(0) = -1 = -f_2(0) \qquad \text{(D.112)}
$$

auch

$$
g(0) = 0, \qquad \text{(D.113)}
$$

man kann also die Regel von L'Hospital anwenden, um $\lim\limits_{\varepsilon\to 0}\frac{g(\varepsilon)}{h(\varepsilon)}$ zu ermitteln. Es gilt

$$\begin{aligned}
g'(\varepsilon) &= 2\frac{r}{a}\frac{1}{2}(2-2\varepsilon)\frac{1}{\sqrt{\varepsilon(2-\varepsilon)}} - (2-2\varepsilon)\left[\arcsin(f_1(\varepsilon)) + \arcsin(f_2(\varepsilon))\right], \\
&\quad -\left(\varepsilon(2-\varepsilon)+\frac{r^2}{a^2}\right)\left[f_1'(\varepsilon)\frac{1}{\sqrt{1-f_1^2(\varepsilon)}} + f_2'(\varepsilon)\frac{1}{\sqrt{1-f_2^2(\varepsilon)}}\right] \\
&= \frac{2r(1-\varepsilon)}{a\sqrt{\varepsilon(2-\varepsilon)}} - 2(1-\varepsilon)\left[\arcsin(f_1(\varepsilon)) + \arcsin(f_2(\varepsilon))\right] \\
&\quad -\left(\varepsilon(2-\varepsilon)+\frac{r^2}{a^2}\right)\left[f_1'(\varepsilon)\frac{1}{\sqrt{1-f_1^2(\varepsilon)}} + f_2'(\varepsilon)\frac{1}{\sqrt{1-f_2^2(\varepsilon)}}\right].
\end{aligned} \tag{D.114}$$

Es gelten

$$f_1^2(\varepsilon) = \frac{\varepsilon^2(2-\varepsilon)^2 + \frac{r^2}{a^2}(1-\varepsilon)^2 - 2\varepsilon(2-\varepsilon)\frac{r}{a}(1-\varepsilon)}{\varepsilon(2-\varepsilon)+\frac{r^2}{a^2}} \tag{D.115}$$

und

$$f_2^2(\varepsilon) = \frac{\varepsilon^2(2-\varepsilon)^2 + \frac{r^2}{a^2}(1-\varepsilon)^2 + 2\varepsilon(2-\varepsilon)\frac{r}{a}(1-\varepsilon)}{\varepsilon(2-\varepsilon)+\frac{r^2}{a^2}}. \tag{D.116}$$

Daraus folgen

$$\begin{aligned}
1-f_1^2(\varepsilon) &= \frac{\varepsilon(2-\varepsilon)(1-\varepsilon(2-\varepsilon)) + \frac{r^2}{a^2}\left(1-(1-\varepsilon)^2\right) + 2\varepsilon(2-\varepsilon)\frac{r}{a}(1-\varepsilon)}{\varepsilon(2-\varepsilon)+\frac{r^2}{a^2}} \\
&= \frac{\varepsilon(2-\varepsilon)(1-2\varepsilon+\varepsilon^2) + \frac{r^2}{a^2}(1-1-\varepsilon^2+2\varepsilon) + 2\varepsilon(2-\varepsilon)\frac{r}{a}(1-\varepsilon)}{\varepsilon(2-\varepsilon)+\frac{r^2}{a^2}} \\
&= \frac{\varepsilon(2-\varepsilon)(1-\varepsilon)^2 + \frac{r^2}{a^2}\varepsilon(2-\varepsilon) + 2\varepsilon\frac{r}{a}(2-\varepsilon)(1-\varepsilon)}{\varepsilon(2-\varepsilon)+\frac{r^2}{a^2}} = (2-\varepsilon)\varepsilon\frac{(1-\varepsilon)^2 + \frac{r^2}{a^2} + 2\frac{r}{a}(1-\varepsilon)}{(2-\varepsilon)\varepsilon+\frac{r^2}{a^2}} \\
&= (2-\varepsilon)\varepsilon\frac{\left[(1-\varepsilon)+\frac{r}{a}\right]^2}{(2-\varepsilon)\varepsilon+\frac{r^2}{a^2}}
\end{aligned} \tag{D.117}$$

und

$$\begin{aligned}
1-f_2^2(\varepsilon) &= \frac{\varepsilon(2-\varepsilon)(1-\varepsilon(2-\varepsilon)) + \frac{r^2}{a^2}\left(1-(1-\varepsilon)^2\right) - 2\varepsilon(2-\varepsilon)\frac{r}{a}(1-\varepsilon)}{\varepsilon(2-\varepsilon)+\frac{r^2}{a^2}} \\
&= \frac{\varepsilon(2-\varepsilon)(1-2\varepsilon+\varepsilon^2) + \frac{r^2}{a^2}(1-1-\varepsilon^2+2\varepsilon) - 2\varepsilon(2-\varepsilon)\frac{r}{a}(1-\varepsilon)}{\varepsilon(2-\varepsilon)+\frac{r^2}{a^2}} \\
&= \frac{\varepsilon(2-\varepsilon)(1-\varepsilon)^2 + \frac{r^2}{a^2}\varepsilon(2-\varepsilon) - 2\varepsilon\frac{r}{a}(2-\varepsilon)(1-\varepsilon)}{\varepsilon(2-\varepsilon)+\frac{r^2}{a^2}} = (2-\varepsilon)\varepsilon\frac{(1-\varepsilon)^2 + \frac{r^2}{a^2} - 2\frac{r}{a}(1-\varepsilon)}{(2-\varepsilon)\varepsilon+\frac{r^2}{a^2}} \\
&= (2-\varepsilon)\varepsilon\frac{\left[(1-\varepsilon)-\frac{r}{a}\right]^2}{(2-\varepsilon)\varepsilon+\frac{r^2}{a^2}}.
\end{aligned} \tag{D.118}$$

Daraus folgen

$$\frac{1}{\sqrt{1-f_1^2(\varepsilon)}} = \frac{1}{1-\varepsilon+\frac{r}{a}}\sqrt{\frac{\varepsilon(2-\varepsilon)+\frac{r^2}{a^2}}{\varepsilon(2-\varepsilon)}} \tag{D.119}$$

und

$$\frac{1}{\sqrt{1-f_2^2(\varepsilon)}} = \frac{1}{\varepsilon+\frac{r}{a}-1}\sqrt{\frac{\varepsilon(2-\varepsilon)+\frac{r^2}{a^2}}{\varepsilon(2-\varepsilon)}}. \tag{D.120}$$

Daraus folgt

$$
\begin{aligned}
&\left(\varepsilon\left(2-\varepsilon\right)+\frac{r^2}{a^2}\right)\left(f_1'\left(\varepsilon\right)\frac{1}{\sqrt{1-f_1^2\left(\varepsilon\right)}}+f_2'\left(\varepsilon\right)\frac{1}{\sqrt{1-f_2^2\left(\varepsilon\right)}}\right)\\
=\;&\frac{\left[\varepsilon\left(2-\varepsilon\right)+\frac{r^2}{a^2}\right]^{3/2}}{\sqrt{\varepsilon\left(2-\varepsilon\right)}}\cdot\frac{1}{\left[\varepsilon\left(2-\varepsilon\right)+\frac{r^2}{a^2}\right]^{3/2}}\cdot\left[\frac{\varepsilon\left(1-\varepsilon\right)\left(2-\varepsilon\right)+\frac{r^3}{a^3}+\frac{r^2}{a^2}2\left(1-\varepsilon\right)+\frac{r}{a}}{1-\varepsilon+\frac{r}{a}}\right.\\
&\left.+\frac{\varepsilon\left(1-\varepsilon\right)\left(2-\varepsilon\right)-\frac{r^3}{a^3}+\frac{r^2}{a^2}2\left(1-\varepsilon\right)-\frac{r}{a}}{\varepsilon+\frac{r}{a}-1}\right]\\
=\;&\frac{1}{\sqrt{\varepsilon\left(2-\varepsilon\right)}}\left[\frac{\varepsilon\left(1-\varepsilon\right)\left(2-\varepsilon\right)+\frac{r^3}{a^3}+\frac{r^2}{a^2}2\left(1-\varepsilon\right)+\frac{r}{a}}{1-\varepsilon+\frac{r}{a}}+\frac{\varepsilon\left(1-\varepsilon\right)\left(2-\varepsilon\right)-\frac{r^3}{a^3}+\frac{r^2}{a^2}2\left(1-\varepsilon\right)-\frac{r}{a}}{\varepsilon+\frac{r}{a}-1}\right]\\
=\;&\frac{1}{\sqrt{\varepsilon\left(2-\varepsilon\right)}}\frac{2\frac{r}{a}\varepsilon\left(1-\varepsilon\right)\left(2-\varepsilon\right)+4\left(1-\varepsilon\right)\frac{r^3}{a^3}-2\left(1-\varepsilon\right)\frac{r^3}{a^3}-2\frac{r}{a}\left(1-\varepsilon\right)}{\frac{r^2}{a^2}-1-\varepsilon^2+2\varepsilon}\\
=\;&\frac{2\frac{r}{a}\left(1-\varepsilon\right)}{\sqrt{\varepsilon\left(2-\varepsilon\right)}}\frac{\varepsilon\left(2-\varepsilon\right)+\frac{r^2}{a^2}-1}{\frac{r^2}{a^2}-1-\varepsilon^2+2\varepsilon}=\frac{2\frac{r}{a}\left(1-\varepsilon\right)}{\sqrt{\varepsilon\left(2-\varepsilon\right)}}.
\end{aligned}
\tag{D.121}
$$

Man hat also

$$
g'\left(\varepsilon\right)=\frac{2r\left(1-\varepsilon\right)}{a\sqrt{\varepsilon\left(2-\varepsilon\right)}}-2\left(1-\varepsilon\right)\left[\arcsin\left(f_1\left(\varepsilon\right)\right)+\arcsin\left(f_2\left(\varepsilon\right)\right)\right],
\tag{D.122}
$$

$$
-\frac{2\frac{r}{a}\left(1-\varepsilon\right)}{\sqrt{\varepsilon\left(2-\varepsilon\right)}}=-2\left(1-\varepsilon\right)\left[\arcsin\left(f_1\left(\varepsilon\right)\right)+\arcsin\left(f_2\left(\varepsilon\right)\right)\right].
\tag{D.123}
$$

Weiterhin gilt

$$
h'\left(\varepsilon\right)=2\frac{3}{2}\sqrt{\varepsilon\left(2-\varepsilon\right)}\left(2-2\varepsilon\right)=6\sqrt{\varepsilon\left(2-\varepsilon\right)}\left(1-\varepsilon\right).
\tag{D.124}
$$

Es gilt also

$$
\frac{g'\left(\varepsilon\right)}{h'\left(\varepsilon\right)}=-\frac{1}{3\sqrt{\varepsilon\left(2-\varepsilon\right)}}\left[\arcsin\left(f_1\left(\varepsilon\right)\right)+\arcsin\left(f_2\left(\varepsilon\right)\right)\right].
\tag{D.125}
$$

Hier muss man wieder die Regel von L'Hospital anwenden, es gelten

$$
\frac{d}{d\varepsilon}\left[\arcsin\left(f_1\left(\varepsilon\right)\right)+\arcsin\left(f_2\left(\varepsilon\right)\right)\right]=\frac{1}{\varepsilon\left(2-\varepsilon\right)+\frac{r^2}{a^2}}\frac{2\frac{r}{a}\left(1-\varepsilon\right)}{\sqrt{\varepsilon\left(2-\varepsilon\right)}}
\tag{D.126}
$$

sowie

$$
\frac{d}{d\varepsilon}\sqrt{\varepsilon\left(2-\varepsilon\right)}=\frac{1-\varepsilon}{\sqrt{\varepsilon\left(2-\varepsilon\right)}}.
\tag{D.127}
$$

Damit folgt

$$
\lim_{\varepsilon\to 0}\frac{g'\left(\varepsilon\right)}{h'\left(\varepsilon\right)}=-\frac{1}{3}\frac{2\frac{r}{a}}{\frac{r^2}{a^2}}=-\frac{2a}{3r}.
\tag{D.128}
$$

und somit

$$
\lim_{\varepsilon\to 0}F\left(\varepsilon\right)=-\frac{2a}{3r}.
\tag{D.129}
$$

Es ergibt sich also im Falle einer Kugel der korrekte Grenzfall. Für die Ableitung von F gilt

$$\begin{aligned}
F'(\varepsilon) &= \frac{g'(\varepsilon)\,h(\varepsilon) - g(\varepsilon)\,h'(\varepsilon)}{h(\varepsilon)^2} = \frac{-2(1-\varepsilon)\left[\arcsin(f_1(\varepsilon)) + \arcsin(f_2(\varepsilon))\right] 2\left(\varepsilon(2-\varepsilon)\right)^{3/2}}{4\left(\varepsilon(2-\varepsilon)\right)^3} \\
&\quad - \frac{\left(2\frac{r}{a}\left(\varepsilon(2-\varepsilon)\right)^{1/2} - \left(\varepsilon(2-\varepsilon) + \frac{r^2}{a^2}\right)\left[\arcsin(f_1(\varepsilon)) + \arcsin(f_2(\varepsilon))\right]\right) 6(1-\varepsilon)\sqrt{\varepsilon(2-\varepsilon)}}{4\left(\varepsilon(2-\varepsilon)\right)^3} \\
&= \frac{(1-\varepsilon)\left[\arcsin(f_1(\varepsilon)) + \arcsin(f_2(\varepsilon))\right]}{2\left(\varepsilon(2-\varepsilon)\right)^{3/2}} + \frac{3r^2}{2a^2}\frac{(1-\varepsilon)\left[\arcsin(f_1(\varepsilon)) + \arcsin(f_2(\varepsilon))\right]}{\left(\varepsilon(2-\varepsilon)\right)^{5/2}} \\
&\quad - 3\frac{r}{a}\frac{1-\varepsilon}{\left(\varepsilon(2-\varepsilon)\right)^2}.
\end{aligned} \tag{D.130}$$

Aufgrund der Rechenregeln für Funktionsgrenzwerte ist $\lim\limits_{\varepsilon\to 0} F'(\varepsilon) = \frac{1}{4\sqrt{2}} \lim\limits_{\varepsilon\to 0} G(\varepsilon)$ mit

$$\begin{aligned}
G(\varepsilon) &:= \frac{(2-\varepsilon)\left[\arcsin(f_1(\varepsilon)) + \arcsin(f_2(\varepsilon))\right]}{2\varepsilon^{3/2}} + \frac{3r^2}{2a^2}\frac{\arcsin(f_1(\varepsilon)) + \arcsin(f_2(\varepsilon))}{\varepsilon^{5/2}} - 3\frac{r\sqrt{2-\varepsilon}}{a\varepsilon^2} \\
&= \frac{\left(a^2\varepsilon(2-\varepsilon) + 3r^2\right)\left[\arcsin(f_1(\varepsilon)) + \arcsin(f_2(\varepsilon))\right] - 6ra\sqrt{\varepsilon(2-\varepsilon)}}{2a^2\varepsilon^{5/2}}.
\end{aligned} \tag{D.131}$$

Es gilt mit der Regel von L'Hospital

$$\begin{aligned}
\lim_{\varepsilon\to 0} G(\varepsilon) &= \lim_{\varepsilon\to 0} \frac{2a^2(1-\varepsilon)\left[\arcsin(f_1(\varepsilon)) + \arcsin(f_2(\varepsilon))\right]}{5a^2\varepsilon^{3/2}} \\
&\quad + \frac{\left(a^2\varepsilon(2-\varepsilon) + 3r^2\right)\frac{1}{\varepsilon(2-\varepsilon)+\frac{r^2}{a^2}}\frac{2\frac{r}{a}(1-\varepsilon)}{\sqrt{\varepsilon(2-\varepsilon)}}}{5a^2\varepsilon^{3/2}} - \frac{6ra\frac{1-\varepsilon}{\sqrt{\varepsilon(2-\varepsilon)}}}{5a^2\varepsilon^{3/2}} \\
&= \frac{2}{5a^2}\lim_{\varepsilon\to 0}\frac{a^2\left[\arcsin f_1(\varepsilon) + \arcsin(f_2(\varepsilon))\right]}{\varepsilon^{3/2}} + \frac{\left(a^2\varepsilon(2-\varepsilon) + 3r^2\right)\frac{1}{\varepsilon(2-\varepsilon)+\frac{r^2}{a^2}}\frac{\frac{r}{a}}{\sqrt{\varepsilon(2-\varepsilon)}} - 3\frac{ra}{\sqrt{\varepsilon(2-\varepsilon)}}}{\varepsilon^{3/2}} \\
&= \frac{4}{15a^2}\lim_{\varepsilon\to 0}\frac{2a^2}{\varepsilon(2-\varepsilon)+\frac{r^2}{a^2}}\frac{2\frac{r}{a}(1-\varepsilon)}{\varepsilon\sqrt{2-\varepsilon}} + 3\frac{ra(1-\varepsilon)}{\varepsilon^2(2-\varepsilon)^{3/2}} \\
&\quad - \left(a^2\varepsilon(2-\varepsilon) + 3r^2\right)\frac{2(1-\varepsilon)}{\left[\varepsilon(2-\varepsilon)+\frac{r^2}{a^2}\right]^2}\frac{\frac{r}{a}}{\varepsilon\sqrt{2-\varepsilon}} - \frac{a^2\varepsilon(2-\varepsilon) + 3r^2}{\varepsilon(2-\varepsilon)+\frac{r^2}{a^2}}\frac{\frac{r}{a}(1-\varepsilon)}{\varepsilon^2(2-\varepsilon)^{3/2}}.
\end{aligned} \tag{D.132}$$

Mit

$$\begin{aligned}
&\frac{2a^2}{\varepsilon(2-\varepsilon)+\frac{r^2}{a^2}}\frac{2\frac{r}{a}(1-\varepsilon)}{\varepsilon\sqrt{2-\varepsilon}} - \left(a^2\varepsilon(2-\varepsilon) + 3r^2\right)\frac{2(1-\varepsilon)}{\left[\varepsilon(2-\varepsilon)+\frac{r^2}{a^2}\right]^2}\frac{\frac{r}{a}}{\varepsilon\sqrt{2-\varepsilon}} \\
&= \frac{2\frac{r}{a}(1-\varepsilon)a^2}{\varepsilon\sqrt{(2-\varepsilon)}}\frac{1}{\left[\varepsilon(2-\varepsilon)+\frac{r^2}{a^2}\right]^2}\left[2\varepsilon(2-\varepsilon) + 2\frac{r^2}{a^2} - \varepsilon(2-\varepsilon) - \frac{3r^2}{a^2}\right] \\
&= \frac{2\frac{r}{a}(1-\varepsilon)a^2}{\varepsilon\sqrt{2-\varepsilon}}\frac{1}{\left[\varepsilon(2-\varepsilon)+\frac{r^2}{a^2}\right]^2}\left[-\frac{r^2}{a^2} + \varepsilon(2-\varepsilon)\right] \\
&= -\frac{2r^3(1-\varepsilon)}{a\varepsilon\sqrt{2-\varepsilon}}\frac{1}{\left[\varepsilon(2-\varepsilon)+\frac{r^2}{a^2}\right]^2} + \frac{2\frac{r}{a}(1-\varepsilon)a^2\sqrt{2-\varepsilon}}{\left[\varepsilon(2-\varepsilon)+\frac{r^2}{a^2}\right]^2}
\end{aligned} \tag{D.133}$$

und

$$\begin{aligned}
&3\frac{ra(1-\varepsilon)}{\varepsilon^2(2-\varepsilon)^{3/2}} - \frac{a^2\varepsilon(2-\varepsilon) + 3r^2}{\varepsilon(2-\varepsilon)+\frac{r^2}{a^2}}\frac{\frac{r}{a}(1-\varepsilon)}{\varepsilon^2(2-\varepsilon)^{3/2}} \\
&= ra\frac{1-\varepsilon}{\varepsilon^2(2-\varepsilon)^{3/2}}\left[3 - \frac{\varepsilon(2-\varepsilon) + 3\frac{r^2}{a^2}}{\varepsilon(2-\varepsilon)+\frac{r^2}{a^2}}\right] = \frac{ra}{\varepsilon^2(2-\varepsilon)^{3/2}}\frac{2\varepsilon(2-\varepsilon)}{\varepsilon(2-\varepsilon)+\frac{r^2}{a^2}}
\end{aligned} \tag{D.134}$$

folgt

$$\begin{aligned}
\lim_{\varepsilon\to 0} G(\varepsilon) &= \frac{4}{15a^2\sqrt{2}} \lim_{\varepsilon\to 0} -\frac{1r^3}{a\varepsilon\left[\varepsilon(2-\varepsilon)+\frac{r^2}{a^2}\right]^2} + \frac{ra}{\varepsilon^2(2-\varepsilon)} \frac{2\varepsilon(2-\varepsilon)}{\varepsilon(2-\varepsilon)+r^2} + \frac{2\frac{r}{a}(1-\varepsilon)a^2(2-\varepsilon)}{\left[\varepsilon(2-\varepsilon)+\frac{r^2}{a^2}\right]^2} \\
&= \frac{4r}{15a^2\sqrt{2}} \lim_{\varepsilon\to 0} -\frac{2r^2}{a\varepsilon\left[\varepsilon(2-\varepsilon)+\frac{r^2}{a^2}\right]^2} + \frac{a}{\varepsilon} \frac{2}{\varepsilon(2-\varepsilon)+\frac{r^2}{a^2}} + \frac{2\frac{1}{a}(1-\varepsilon)a^2(2-\varepsilon)}{\left[\varepsilon(2-\varepsilon)+\frac{r^2}{a^2}\right]^2} \\
&= \frac{4}{15r\sqrt{2}} \lim_{\varepsilon\to 0} -\frac{2r^2}{a\varepsilon\left[\varepsilon(2-\varepsilon)+\frac{r^2}{a^2}\right]} + \frac{2a}{\varepsilon} + \frac{2r^2(1-\varepsilon)(2-\varepsilon)}{a\left[\varepsilon(2-\varepsilon)+\frac{r^2}{a^2}\right]^2} \\
&= \frac{4}{15r\sqrt{2}} \lim_{\varepsilon\to 0} \frac{-2\frac{r^2}{a}+2a\varepsilon(2-\varepsilon)+2\frac{r^2}{a}}{\varepsilon\left(\varepsilon(2-\varepsilon)+\frac{r^2}{a^2}\right)} + \frac{2r^2(1-\varepsilon)(2-\varepsilon)}{a\left[\varepsilon(2-\varepsilon)+\frac{r^2}{a^2}\right]^2} \\
&= \frac{4}{15r\sqrt{2}} \left[\frac{4a}{\frac{r^2}{a^2}} + \frac{4r^2}{a\frac{r^4}{a^4}}\right] = \frac{4}{15r\sqrt{2}} \frac{8a^3}{r^2} = \frac{32}{15\sqrt{2}} \frac{a^3}{r^3}.
\end{aligned} \tag{D.135}$$

Somit folgt

$$\lim_{\varepsilon\to 0} F'(\varepsilon) = \frac{4}{15} \frac{a^3}{r^3}. \tag{D.136}$$

Analog können die Koeffizienten höherer Ordnungen in ε ermittelt werden. Man hat also

$$\varphi_0(r) = \frac{3GM}{2a}\left[-\frac{2a}{3r} + \varepsilon\frac{4a^3}{15r^3}\right] = -\frac{GM}{r} + \varepsilon\frac{2GM}{5r^3}a^2, \tag{D.137}$$

die Terme $\mathcal{O}(\varepsilon^2)$ wurden vernachlässigt. Es gilt somit in Termen der Glg. (D.69)

$$b_1 = 0, \tag{D.138}$$

$$b_2(\varepsilon) = \varepsilon\frac{2GMa^2}{5}. \tag{D.139}$$

Für den Gravitationsanteil des Schwerepotentials der Erde gilt somit

$$\varphi_0(r,\chi) = -\frac{GM}{r} + \frac{b_2}{2r^3}\left(3\sin^2(\chi)-1\right) = -\frac{GM}{r} + \varepsilon\frac{GMa^2}{5r^3}\left(3\sin^2(\chi)-1\right). \tag{D.140}$$

Nun wird die Fliehkraft berücksichtigt. Definiere

$$m := \frac{\omega^2 a^3}{GM}. \tag{D.141}$$

Dann schreibt sich der Zentrifugalanteil φ_z mit Glg. (D.36) als

$$\varphi_z = -\frac{1}{2}\omega^2 r^2\cos^2(\chi) = -\frac{1}{2}\frac{GMm}{a^3}r^2\cos^2(\chi) = \frac{GMm}{2a^3}r^2\left(\sin^2(\chi)-1\right). \tag{D.142}$$

Für das Schwerepotential erhält man

$$\begin{aligned}
\varphi_g(r,\chi) &= \varphi_0(r,\chi) + \varphi_z(r,\chi) = -\frac{GM}{r} + \varepsilon\frac{GMa^2}{5r^3}\left(3\sin^2(\chi)-1\right) + \frac{GMm}{2a^3}r^2\left(\sin^2(\chi)-1\right) \\
&= \frac{GM}{r}\left[\left\{\frac{3a^2\varepsilon}{5r^2} + \frac{mr^3}{2a^3}\right\}\sin^2(\chi) - 1\right] - \frac{GM}{a}\left\{\frac{a^3}{5r^3}\varepsilon + \frac{mr^2}{2a^2}\right\}.
\end{aligned} \tag{D.143}$$

Man fordert nun als zusätzliche Bedingung, dass die Oberfläche des Rotationsellipsoiden eine Äquipotentialfläche ist, also

$$\varphi_g(r,\chi) = \text{const.} \tag{D.144}$$

für

$$\frac{x^2+y^2}{a^2}+\frac{z^2}{c^2}=1. \tag{D.145}$$

Eine notwendige Bedingung hierfür ist, dass das Geopotential am Äquator dem am Pol entspricht, also

$$\begin{aligned}
-\frac{GM}{a}-\frac{GM}{a}\left[\frac{\varepsilon}{5}+\frac{m}{2}\right] &= \frac{GM}{c}\left[\frac{3a^2\varepsilon}{5c^2}+\frac{mc^3}{2a^3}-1\right]-\frac{GM}{a}\left[\frac{\varepsilon a^3}{5c^3}+\frac{mc^2}{2a^2}\right]\\
\Leftrightarrow 1+\frac{\varepsilon}{5}+\frac{m}{2} &= -\frac{3a^3}{5c^3}\varepsilon-\frac{mc^2}{2a^2}+\frac{a}{c}+\frac{\varepsilon a^3}{5c^3}+\frac{mc^2}{2a^2}\\
\Leftrightarrow 1+\frac{\varepsilon}{5}+\frac{m}{2} &= -\frac{2a^3}{5c^3}\varepsilon+\frac{1}{1-\varepsilon}\\
\Leftrightarrow -\varepsilon+(1-\varepsilon)\left(\frac{\varepsilon}{5}+\frac{m}{2}\right) &= -(1-\varepsilon)\frac{2a^3}{5c^3}\varepsilon=-\varepsilon(1-\varepsilon)\frac{2}{5}(1-\varepsilon)^3.
\end{aligned} \tag{D.146}$$

Vernachlässigt man hier alle wieder alle Terme $\mathcal{O}(\varepsilon^2)$ und auch $\mathcal{O}(\varepsilon m)$, erhält man

$$-\varepsilon+\frac{\varepsilon}{5}+\frac{m}{2} = -\varepsilon\frac{2}{5}\Leftrightarrow\frac{m}{2}=\varepsilon\frac{2}{5}. \tag{D.147}$$

Es gilt also im Gleichgewichtsfall

$$\varepsilon=\varepsilon(m)=\frac{5m}{4}. \tag{D.148}$$

Bei gegebener großer Halbachse ist die kleine Halbachse c festgelegt:

$$c=a(1-\varepsilon(m))=a\left(1-\frac{5m}{4}\right). \tag{D.149}$$

Man nutzt

$$\frac{3\varepsilon}{5}=\varepsilon-\frac{2}{5}\varepsilon=\varepsilon-\frac{m}{2}=\frac{2\varepsilon-m}{2} \tag{D.150}$$

aus, um den Ausdruck für das Schwerepotential zu vereinfachen:

$$\varphi_g(r,\chi) = \frac{GM}{r}\left[\left\{\left(\frac{2\varepsilon-m}{2}\right)\frac{a^2}{r^2}+\frac{m}{2}\frac{r^3}{a^3}\right\}\sin^2(\chi)-1\right]-\frac{GM}{a}\left\{\left(\frac{2\varepsilon-m}{6}\right)\frac{a^3}{r^3}+\frac{m}{2}\frac{r^2}{a^2}\right\} \tag{D.151}$$

Dies ist die Formel mit der von nun an gearbeitet wird. Da sie erster Ordnung in ε und m ist, werden alle noch folgenden Approximationen ebenfalls nur in erster Ordnung in ε und m gemacht.

Horizontale Druckgradienten sind vier Größenordnungen kleiner als vertikale (s. Kapitel 4), deshalb ist es praktisch, eine Achse des Koordinatensystems an der Schwere auszurichten, sodass diese die horizontalen Bewegungsgleichungen nicht beeinfusst. Zunächst kann man hierfür einfach Kugelkoordinaten verwenden, die Orographie kann man dabei als Höhe der Erdoberfläche über der Kugel interpretieren. Die Erde ist jedoch ein Ellipsoid. Ein erster Ansatz hierfür könnte sein, die ellipsoidische Form der Erde in die Orographie zu absorbieren und weiterhin Kugelkoordinaten zu verwenden. Für den Winkel φ, den das Ellipsoid mit einer Kugeloberfläche einschließt, gilt

$$\tan(\varphi)\approx\frac{\widetilde{f}}{\pi/2}\approx 0{,}2\,\%. \tag{D.152}$$

Nimmt man an, dass die Schwere senkrecht auf dem Ellipsoid steht, hat sie in Kugelkoordinaten eine Horizontalkomponente von der Größenordnung 10^{-2} m/s², dies ist eine Größenordnung größer als der horizontale Druckgradient. Will man also die Exzentrizität des Schwerefeldes berücksichtigen, muss man ellipsoidische Koordinaten wählen.

Für die Entwicklung eines meteorologischen Koordinatensystems ist es notwendig, dass die Flächen gleicher Vertikalkoordinate Äquipotentialflächen im Schwerefeld sind. Weiterhin sollten diese Flächen ellipsoidisch sein, um eine analytische Formulierung der herrschenden Gleichungen sowie numerische Stabilität zu erleichtern.

Für die Entwicklung eines nicht-kugelförmigen Koordinatensystems ist es außerdem wichtig, die zu allen Po-

tentialflächen senkrechten Trajektorien in Termen der Grundfunktionen angeben zu können. Außerdem muss die verwendete Approximation des Geopotentials möglichst konsistent mit der realen Physik sein und gleichzeitig analytisch behandelbar. Damit ist gemeint, dass sich wieder das korrekte Clairautverhältnis ergibt, und dass gilt $c = a(1-\varepsilon)$.

Die drei Forderungen an eine Approximation des Schwerefeldes sind also:

- analytische Angabe der senkrechten Trajektorien möglich
- ellipsoidische Konturflächen
- Konsistenz

Es stellt sich also zunächst die Frage, ob alle Konturflächen von Glg. (D.151) Ellipsoide sind. Für die Oberfläche der Erde (ohne Orographie) wurde dies in erster Ordnung in ε und m durch $\varepsilon = \frac{5}{4}m$ bereits sichergestellt. Mit $r = \sqrt{x^2+y^2+z^2}$ kann man sich einen Ausdruck für den Abstand r vom Mittelpunkt eines Rotationsellipsoiden mit großer Halbachse A und kleiner Halbachse C als Funktion des geozentrischen Winkels χ bei gegebener Exzentrizität herleiten:

$$\begin{aligned} 1 = \frac{r^2\cos^2(\chi)}{A^2} + \frac{r^2\sin^2(\chi)}{C^2} &= \frac{r^2}{A^2}\left(\cos^2(\chi) + A^2\frac{\sin^2(\chi)}{C^2}\right) \\ \Leftrightarrow r(\chi) &= A\left[\cos^2(\chi) + A^2\frac{\sin^2(\chi)}{C^2}\right]^{-1/2} \end{aligned} \tag{D.153}$$

Mit $A = a$, $C = c = a(1-\varepsilon)$ folgt

$$r(\chi) = a(1-\varepsilon)\left[(1-\varepsilon)^2 + (1-(1-\varepsilon)^2)\sin^2(\chi)\right]^{-1/2} \tag{D.154}$$

Glg. (D.151) ist nicht von dieser Form: Hält man die linke Seite der Gleichung konstant und multipliziert mit r^3, so entsteht ein Polynom fünften Grades in r, welches im Allgemeinen nur numerisch gelöst werden kann.

Man muss also eine ellipsoidische Approximation von Glg. (D.151) finden. Die nun folgende Diskussion basiert auf [22]. Zunächst einmal macht man sich klar, wie man eine bestimmte Geopotentialfläche bezeichnen kann. Hierzu bietet sich der äquatoriale Radius R der Fläche an. Für ihn gilt

$$\varphi_R = -\frac{GM}{R}\left[1 + \left(\frac{2\varepsilon - m}{6}\right)\frac{a^2}{R^2} + \frac{m}{2}\frac{R^3}{a^3}\right]. \tag{D.155}$$

Will man diese Fläche nun genauer angeben, also ihren Abstand $r = r(\chi)$ vom Erdmittelpunkt bei einer geozentrischen Breite φ angeben, schreibt man einfach

$$\begin{aligned} \frac{1}{R}\left[1 + \left(\frac{2\varepsilon - m}{6}\right)\frac{a^2}{R^2} + \frac{m}{2}\frac{R^3}{a^3}\right] &= \frac{1}{r}\left[1 - \left\{\left(\frac{2\varepsilon - m}{2}\right)\frac{a^2}{r^2} + \frac{m}{2}\frac{r^3}{a^3}\right\}\sin^2(\chi)\right] \\ &\quad + \frac{1}{a}\left\{\left(\frac{2\varepsilon - m}{6}\right)\frac{a^3}{r^3} + \frac{m}{2}\frac{r^2}{a^2}\right\}. \end{aligned} \tag{D.156}$$

Nun macht man die Annahme, dass gilt

$$\frac{r}{R} = 1 + \frac{r-R}{R} = 1 + \mathcal{O}(\varepsilon), \tag{D.157}$$

Es gilt nämlich

$$\frac{r-R}{R} \lesssim \frac{c-a}{a} = -\varepsilon, \tag{D.158}$$

zumindest innerhalb der wetterrelevanten Atmosphäre. Man kann nun zunächst schreiben

$$\begin{aligned}
\varphi_g(r,\chi) &= -\frac{GM}{r} + \frac{GM}{R}\frac{1}{r/R}\left[\left(\frac{2\varepsilon - m}{2}\right)\frac{a^2}{R^2}\frac{R^2}{r^2} + \frac{m}{2}\frac{R^3}{a^3}\frac{r^3}{R^3}\right]\sin^2(\chi) \\
&\quad -\frac{GM}{a}\left[\left(\frac{2\varepsilon - m}{6}\right)\frac{a^3}{R^3}\frac{R^3}{r^3} + \frac{m}{2}\frac{R^2}{a^2}\frac{r^2}{R^2}\right] \\
&= -\frac{GM}{r} + \frac{GM}{R}\left(1 + \frac{r-R}{R}\right)^{-1}\left[\left(\frac{2\varepsilon - m}{2}\right)\frac{a^2}{R^2}\left(1 + \frac{r-R}{R}\right)^{-2}\right. \\
&\quad \left. + \frac{m}{2}\frac{R^3}{a^3}\left(1 + \frac{r-R}{R}\right)^{3}\right]\sin^2(\chi) - \frac{GM}{a}\left[\left(\frac{2\varepsilon - m}{6}\right)\frac{a^3}{R^3}\left(1 + \frac{r-R}{R}\right)^{-3}\right. \\
&\quad \left. + \frac{m}{2}\frac{R^2}{a^2}\left(1 + \frac{r-R}{R}\right)^{2}\right]. \qquad \text{(D.159)}
\end{aligned}$$

Indem man Terme $\mathcal{O}(\varepsilon^2, m^2, \varepsilon m)$ vernachlässigt wird dies zunächst zu

$$\begin{aligned}
\varphi_g(\chi,R) &= -\frac{GM}{r(\chi,R)} + \frac{GM}{R}\left[1 + \left\{\left(\frac{2\varepsilon - m}{2}\right)\frac{a^2}{R^2} + \frac{m}{2}\frac{R^3}{a^3}\right\}\sin^2(\chi)\right] \\
&\quad -\frac{GM}{R}\left[1 + \left(\frac{2\varepsilon - m}{6}\right)\frac{a^2}{R^2} + \frac{m}{2}\frac{R^3}{a^3}\right] + \mathcal{O}(\varepsilon^2, m^2, \varepsilon m) \qquad \text{(D.160)}
\end{aligned}$$

und dann weiter zu

$$\begin{aligned}
\varphi_g(\chi,R) &\approx -\frac{GM}{r(\chi,R)} + \frac{GM}{R}\left[1 + \left\{(2\varepsilon - m)\frac{a^2}{R^2} + m\frac{R^3}{a^3}\right\}\sin^2(\chi)\right]^{1/2} \\
&\quad -\frac{GM}{R}\left[1 + \left(\frac{2\varepsilon - m}{6}\right)\frac{a^2}{R^2} + \frac{m}{2}\frac{R^3}{a^3}\right]. \qquad \text{(D.161)}
\end{aligned}$$

Die Konturflächen hiervon sind bereits Ellipsoide. Um dies zu zeigen, bestimmt man den geozentrischen Abstand r als Funktion der Breite bei gegebenem äquatorialem Radius R:

$$\begin{aligned}
& -\frac{GM}{R} + \frac{GM}{R} - \frac{GM}{R} - \frac{GM}{R}\left[\left(\frac{2\varepsilon - m}{6}\right)\frac{a^2}{R^2} + \frac{m}{2}\frac{R^3}{a^3}\right] \\
&= -\frac{GM}{r} + \frac{GM}{R}\left[1 + \left\{(2\varepsilon - m)\frac{a^2}{R^2} + m\frac{R^3}{a^3}\right\}\sin^2(\chi)\right]^{1/2} - \frac{GM}{R} - \frac{GM}{R}\left[\left(\frac{2\varepsilon - m}{6}\right)\frac{a^2}{R^2} + \frac{m}{2}\frac{R^3}{a^3}\right] \\
\Leftrightarrow 1 &= \frac{R}{r} - \left[1 + \sin^2(\chi)\left\{(2\varepsilon - m)\frac{a^2}{R^2} + m\frac{R^3}{a^3}\right\}\right]^{1/2} + 1 \\
\Leftrightarrow r &= R\frac{1}{\left[1 + \sin^2(\chi)\left\{(2\varepsilon - m)\frac{a^2}{R^2} + m\frac{R^3}{a^3}\right\}\right]^{1/2}} \\
\Leftrightarrow r(R,\chi) &= R\left[\cos^2(\chi) + \sin^2(\chi)\left\{(2\varepsilon - m)\frac{a^2}{R^2} + m\frac{R^3}{a^3} + 1\right\}\right]^{-1/2} \qquad \text{(D.162)}
\end{aligned}$$

Setzt man $R = A$ und $C = A\left\{(2\varepsilon - m)\frac{a^2}{R^2} + m\frac{R^3}{a^3} + 1\right\}^{-1/2}$ in Glg. (D.153) ein erhält man genau dieses Resultat. Leider sind die zu den Konturmengen dieses Potentials orthogonalen Trajektorien nicht analytisch bestimmbar, sodass man Glg. (D.159) weiter approximieren muss. Hierzu entwickelt man die Terme $\frac{a^2}{R^2}$ und $\frac{R^3}{a^3}$ um $R^2 = a^2$: Wegen $\frac{R-a}{a} \lesssim 10^{-2}$ ist dies gerechtfertigt.

$$\frac{a^2}{R^2} \approx 1 - \frac{1}{a^2}(R^2 - a^2) = 2 - \frac{R^2}{a^2}, \qquad \text{(D.163)}$$

$$\frac{R^3}{a^3} = \frac{(R^2)^{3/2}}{a^3} \approx 1 + \frac{3}{2}\frac{R^2 - a^2}{a^2} = -\frac{1}{2} + \frac{3}{2}\frac{R^2}{a^2} \qquad \text{(D.164)}$$

Setzt man dies in Glg. (D.159) ein, erhält man

$$\begin{aligned}\varphi_g(\chi,R) \approx & -\frac{GM}{r(\chi,R)}+\frac{GM}{R}\left[1+\left\{\left(\frac{8\varepsilon-5m}{2}\right)+\left(\frac{5m-4\varepsilon}{2}\right)\frac{R^2}{a^2}\right\}\sin^2(\chi)\right]^{1/2} \\ & -\frac{GM}{R}\left[1+\left(\frac{8\varepsilon-7m}{12}\right)+\left(\frac{11m-4\varepsilon}{12}\right)\frac{R^2}{a^2}\right]. \end{aligned} \tag{D.165}$$

Dies führt auf

$$r(\chi,R)=R\left[\cos^2(\chi)+\sin^2(\chi)\left\{\left(\frac{8\varepsilon-5m}{2}\right)+\left(\frac{5m-4\varepsilon}{2}\right)\frac{R^2}{a^2}+1\right\}\right]^{-1/2}, \tag{D.166}$$

mit Glg. (D.153) wird dies zu

$$C=R\left\{1+\left(\frac{8\varepsilon-5m}{2}\right)+\left(\frac{5m-4\varepsilon}{2}\right)\frac{R^2}{a^2}\right\}^{-1/2}. \tag{D.167}$$

Hier tritt jedoch ein Problem mit der Konsistenz auf. Setzt man $R=a$ in Glg. (D.166) ein, erhält man

$$r(\chi,a)=a\left[1+2\varepsilon\sin^2(\chi)\right]^{-1/2}. \tag{D.168}$$

Dieser Ausdruck beschreibt die Erdoberfläche ohne Orographie. Man erhält

$$r(0,a) = a, \tag{D.169}$$

$$r(\pi/2,a) = a\frac{1}{\sqrt{1+2\varepsilon}}. \tag{D.170}$$

Mit

$$\frac{d}{d\varepsilon}\frac{1}{\sqrt{1+2\varepsilon}}=-\frac{1}{(1+2\varepsilon)^{3/2}} \tag{D.171}$$

folgt

$$r(\pi/2)=a-a\varepsilon+\mathcal{O}(\varepsilon^2)\approx a(1-\varepsilon), \tag{D.172}$$

also nicht das gewünschte exakte Resultat $r(\pi/2)=a(1-\varepsilon)$. Um dieses Problem zu lösen, definiere

$$\tilde{\varepsilon}:=\frac{a^2-c^2}{2c^2}=\frac{1-(1-\varepsilon)^2}{2(1-\varepsilon)^2}. \tag{D.173}$$

Definiere die Hilfsfunktion $f(\varepsilon)$ durch

$$f(\varepsilon):=\frac{1-(1-\varepsilon)^2}{2(1-\varepsilon)^2}, \tag{D.174}$$

dann gilt

$$f'(\varepsilon)=\frac{4(1-\varepsilon)^3-\left[1-(1-\varepsilon)^2\right]2(1-\varepsilon)^2}{4(1-\varepsilon)^4}\Rightarrow f'(0)=1. \tag{D.175}$$

Also ist

$$\tilde{\varepsilon}=\varepsilon+\mathcal{O}(\varepsilon^2). \tag{D.176}$$

Somit kann man in erster Ordnung überall ε durch $\tilde{\varepsilon}$ ersetzen. Man erhält

$$\begin{aligned}\varphi_g(\chi, R) \approx & -\frac{GM}{r(\chi, R)} + \frac{GM}{R}\left[1 + \left\{\left(\frac{8\tilde{\varepsilon} - 5m}{2}\right) + \left(\frac{5m - 4\tilde{\varepsilon}}{2}\right)\frac{R^2}{a^2}\right\}\sin^2(\chi)\right]^{1/2} \\ & -\frac{GM}{R}\left[1 + \left(\frac{8\tilde{\varepsilon} - 7m}{12}\right) + \left(\frac{11m - 4\tilde{\varepsilon}}{12}\right)\frac{R^2}{a^2}\right]. \end{aligned} \tag{D.177}$$

Mit dieser Formel erhält man ebenfalls ellipsoidische Konturflächen,

$$r(\chi, R) = R\left[1 + \sin^2(\chi)\left\{\left(\frac{8\tilde{\varepsilon} - 5m}{2}\right) + \left(\frac{5m - 4\tilde{\varepsilon}}{2}\right)\frac{R^2}{a^2}\right\}\right]^{-1/2}, \tag{D.178}$$

und außerdem

$$r(\chi, a) = a\left[1 + 2\tilde{\varepsilon}\sin^2(\chi)\right]^{-1/2} = a(1-\varepsilon)\left[(1-\varepsilon)^2 + (1-(1-\varepsilon)^2)\sin^2(\chi)\right]^{-1/2}. \tag{D.179}$$

Dies ist das gewünschte Resultat, s. Glg. (D.154).

Der *Satz von Clairaut* ist eine Aussage über den Zusammenhang von Exzentrizität ε, Winkelgeschwindigkeit ω und Verhältnis der Schweren g_a, g_p am Äquator und Pol. Am Pol gilt für das Geopotential $\varphi_g = \varphi_g^{(p)}$ mit Glg. (D.151)

$$\varphi_g^{(p)} = -\frac{GM}{r} + \frac{GM}{r^3}a^2\left(\frac{2\varepsilon - m}{3}\right), \tag{D.180}$$

am Äquator gilt

$$\varphi_g^{(a)} = -\frac{GM}{r} - \frac{GM}{a}\left\{\left(\frac{2\varepsilon - m}{6}\right)\frac{a^3}{r^3} + \frac{m}{2}\frac{r^2}{a^2}\right\}. \tag{D.181}$$

Somit gelten

$$\frac{d\varphi_g^{(a)}}{dr} = \frac{GM}{r^2} - \frac{GM}{a}\left\{-3\left(\frac{2\varepsilon - m}{6}\right)\frac{a^3}{r^4} + m\frac{r}{a^2}\right\}, \tag{D.182}$$

$$\frac{d\varphi_g^{(p)}}{dr} = \frac{GM}{r^2} - 3\frac{GM}{r^4}a^2\left(\frac{2\varepsilon - m}{3}\right). \tag{D.183}$$

Daraus folgen mit $r = a$ bzw. $r = c = a(1-\varepsilon)$

$$g_a = \frac{GM}{a^2}\left[1 + \varepsilon - 3\frac{m}{2}\right], \tag{D.184}$$

$$g_p = \frac{GM}{a^2(1-\varepsilon)^2}\left[1 - \frac{2\varepsilon}{(1-\varepsilon)^2} + \frac{m}{(1-\varepsilon)^2}\right]. \tag{D.185}$$

Daraus folgt

$$\begin{aligned}\frac{g_p - g_a}{g_a} &= \frac{\frac{1}{(1-\varepsilon)^2}\left[1 - \frac{2}{(1-\varepsilon)^2}\varepsilon + \frac{m}{(1-\varepsilon)^2}\right] - 1 - \varepsilon + 3\frac{m}{2}}{1 + \varepsilon - 3\frac{m}{2}} \\ &\approx \frac{1 - \frac{2}{(1-\varepsilon)^2}\varepsilon + \frac{m}{(1-\varepsilon)^2} - 1 - \varepsilon + 3\frac{m}{2} + 2\varepsilon}{1 - \varepsilon - 3\frac{m}{2}}, \end{aligned} \tag{D.186}$$

wobei wieder Terme $\mathcal{O}(\varepsilon^2, \varepsilon m, m^2)$ vernachlässigt wurden. Mit

$$\frac{d}{d\varepsilon}\frac{1}{(1-\varepsilon)^2} = \frac{2(1-\varepsilon)}{(1-\varepsilon)^4} = \frac{2}{(1-\varepsilon)^3} \tag{D.187}$$

folgt

$$\frac{1}{(1-\varepsilon)^2} \approx 1 + 2\varepsilon \tag{D.188}$$

und somit

$$\frac{g_p - g_a}{g_a} \approx \frac{1 - 2\varepsilon + m - 1 - \varepsilon + 3\frac{m}{2} + 2\varepsilon}{1 - \varepsilon - \frac{3m}{2}} = \frac{\frac{5m}{2} - \varepsilon}{1 - \varepsilon - \frac{3m}{2}}. \tag{D.189}$$

Setzt man hier $\varepsilon \approx \frac{5m}{4}$ ein, erhält man

$$\frac{g_p - g_a}{g_a} \approx m \frac{\frac{5}{4}}{1 - m\left(\frac{5}{4} - \frac{3}{2}\right)} = \frac{m}{4}\frac{5}{1 + \frac{m}{4}} = \frac{5m}{4+m}. \tag{D.190}$$

Definiere $f(m) := \frac{5m}{4+m}$, dann gilt

$$\frac{df}{dm} = 5\frac{4 + m - m}{(4+m)^2}, \tag{D.191}$$

also

$$\frac{df}{dm}(m = 0) = \frac{5}{4}. \tag{D.192}$$

Damit folgt

$$\frac{g_p - g_a}{g_a} \approx 5\frac{m}{4}. \tag{D.193}$$

Also gilt

$$\frac{a-c}{c} + \frac{g_p - g_a}{g_a} \approx \frac{5}{2}m = \frac{5\omega^2 a^3}{2GM}. \tag{D.194}$$

Dies ist der Satz von Clairaut. Dies soll nun für Glg. (D.177) nachgerechnet werden. Alles, was man zeigen muss ist, dass Glg. (D.193) weiterhin gilt. Am Äquator gilt

$$\varphi_g^{(a)} = -\frac{GM}{r} - \frac{GMr}{a^2}\left[\left(\frac{8\tilde{\varepsilon} - 7m}{12}\right) + \left(\frac{11m - 4\tilde{\varepsilon}}{12}\right)\right]. \tag{D.195}$$

Es folgt

$$g_a = \frac{GM}{a^2}\left[1 + \left(\frac{8\tilde{\varepsilon} - 7m}{12}\right) + \left(\frac{11m - 4\tilde{\varepsilon}}{12}\right)\right]. \tag{D.196}$$

Am Pol gilt

$$\begin{aligned}\varphi_g(\pi/2, R) \approx & -\frac{GM}{r(\pi/2, R)} + \frac{GM}{R}\left[1 + \left\{\left(\frac{8\tilde{\varepsilon} - 5m}{2}\right) + \left(\frac{5m - 4\tilde{\varepsilon}}{2}\right)\frac{R^2}{a^2}\right\}\right]^{1/2} \\ & -\frac{GM}{R}\left[1 + \left(\frac{8\tilde{\varepsilon} - 7m}{12}\right) + \left(\frac{11m - 4\tilde{\varepsilon}}{12}\right)\frac{R^2}{a^2}\right].\end{aligned} \tag{D.197}$$

Es folgt

$$g_p = \frac{d\varphi_g}{dr} = \frac{\partial R}{\partial r}\frac{d\varphi_g}{dR} = \frac{1}{\partial r/\partial R}\frac{d\varphi_g}{dR} = \frac{1}{\partial r/\partial R} g_a. \tag{D.198}$$

Für dr/dR folgt mit Glg. (D.178)

$$\begin{aligned}\frac{\partial r}{\partial R} &= \left[1+\left\{\left(\frac{8\tilde{\varepsilon}-5m}{2}\right)+\left(\frac{5m-4\tilde{\varepsilon}}{2}\right)\frac{R^2}{a^2}\right\}\sin^2(\chi)\right]^{-1/2} \\ &\quad -\frac{R^2}{a^2}\left(\frac{5m-4\tilde{\varepsilon}}{2}\right)\left[1+\left\{\left(\frac{8\tilde{\varepsilon}-5m}{2}\right)+\left(\frac{5m-4\tilde{\varepsilon}}{2}\right)\frac{R^2}{a^2}\right\}\sin^2(\chi)\right]^{-3/2}. \end{aligned} \tag{D.199}$$

An der Stelle $\chi=\pi/2$, $R=a$ wird dies zu

$$\begin{aligned}\frac{\partial r}{\partial R}(R=a,\chi=\pi/2) &= [1+2\tilde{\varepsilon}]^{-1/2}-\left(\frac{5m-4\tilde{\varepsilon}}{2}\right)[1+2\tilde{\varepsilon}]^{-3/2} \\ &= (1+2\tilde{\varepsilon})^{-3/2}\left[1+4\tilde{\varepsilon}-5\frac{m}{2}\right]. \end{aligned} \tag{D.200}$$

Also erhält man

$$g_p=\frac{GM}{a^2}\left[1+\left(\frac{8\tilde{\varepsilon}-7m}{12}\right)+\left(\frac{11m-4\tilde{\varepsilon}}{12}\right)\right](1+2\tilde{\varepsilon})^{3/2}\frac{1}{1+4\tilde{\varepsilon}-5\frac{m}{2}}. \tag{D.201}$$

Dies führt auf

$$\frac{g_p-g_a}{g_a} = \frac{\partial R}{\partial r}-1=\frac{(1+2\tilde{\varepsilon})^{3/2}}{1+4\tilde{\varepsilon}-5\frac{m}{2}}-1. \tag{D.202}$$

Definiere

$$f(x,y):=\frac{(1+2x)^{3/2}}{1+4x-5\frac{y}{2}}, \tag{D.203}$$

dann sind $f(0)=1$ und

$$\frac{\partial f}{\partial x}=\frac{3\sqrt{1+2x}\left(1+4x-5\frac{y}{2}\right)-(1+2x)^{3/2}\,4}{\left(1+4x-5\frac{y}{2}\right)^2}, \tag{D.204}$$

also

$$\frac{\partial f}{\partial x}(0)=-1, \tag{D.205}$$

sowie

$$\frac{\partial f}{\partial y}=\frac{5}{2}(1+2x)^{3/2}\frac{1}{\left(1+4x-5\frac{y}{2}\right)^2}, \tag{D.206}$$

also

$$\frac{\partial f}{\partial y}(0)=\frac{5}{2}. \tag{D.207}$$

Damit folgt

$$\frac{g_p-g_a}{g_a}\approx\frac{5m}{2}-\tilde{\varepsilon}\approx\frac{5m}{2}-\varepsilon, \tag{D.208}$$

also ist mit Glg. (D.177) auch der Satz von Clairaut erfüllt. Als Anmerkung sei gesagt: Glg. (D.177) ist erster Ordnung genau in ε und m und daher nicht besser oder schlechter als Glg. (D.151).

D.3.3 Senkrechte Trajektorien

Da sich horizontale Ableitungen in einem geeigneten geophysikalischen Koordinatensystem auf Äquipotentialflächen im Schwerefeld beziehen, sind vertikale Ableitungen (bei Orthogonalität des KS) senkrecht hierzu und daher

in Richtung des Schwerefeldes ausgerichtet. Es ist also wichtig, diese Richtung zu kennen. Hierzu werden in diesem Abschnitt die zu den Äquipotentialflächen senkrechten Trajektorien ermittelt.

Glg. (D.178) beschreibt die Äquipotentialflächen im Schwerefeld, genauer ihren Abstand r vom Erdmittelpunkt bei gegebenem Äquatorradius R und geozentrischer Breite $\mathcal{X}$. Diese Gleichung lautet:

$$r\left(\mathcal{X}, R\right) = R\left[1 + \sin^2\left(\mathcal{X}\right)\left\{\mu + r\frac{R^2}{a^2}\right\}\right]^{-1/2} \tag{D.209}$$

Hierbei wurde

$$\mu := \frac{8\tilde{\varepsilon} - 5m}{2}, \tag{D.210}$$

$$r := \frac{5m - 4\tilde{\varepsilon}}{2} \tag{D.211}$$

definiert. Dies kann man umformen zu

$$r\left(\mathcal{X}, R\right) = \frac{RC\left(R\right)}{\sqrt{R^2\sin^2\left(\mathcal{X}\right) + C^2\left(R\right)\cos^2\left(\mathcal{X}\right)}} \tag{D.212}$$

mit

$$C\left(R\right) := R\frac{1}{\sqrt{1 + \mu + r\frac{R^2}{a^2}}}. \tag{D.213}$$

Ellipsoide erfüllen

$$\frac{r^2\cos^2\left(\mathcal{X}\right)}{R^2} + \frac{r^2\sin^2\left(\mathcal{X}\right)}{c^2} = 1 \tag{D.214}$$

mit großer Halbachse R und kleiner Halbachse c. Setzt man hier Glg. (D.212) ein, erhält man

$$\frac{1}{R^2}\frac{R^2C^2\cos^2\left(\mathcal{X}\right)}{R^2\sin^2\left(\mathcal{X}\right) + C^2\cos^2\left(\mathcal{X}\right)} + \frac{1}{c^2}\frac{R^2C^2\sin^2\left(\mathcal{X}\right)}{R^2\sin^2\left(\mathcal{X}\right) + C^2\cos^2\left(\mathcal{X}\right)} \stackrel{!}{=} 1. \tag{D.215}$$

Man sieht, dass dies für $c = C$ erfüllt ist. C ist also die kleine Halbachse der Äquipotentialflächen.

Da ein Ellipsoid rotationssymmetrisch ist, reicht es zunächst, die senkrechten Trajektorien in der Meridianebene $\mathcal{L} = 0$ zu ermitteln. Hier kann man einfach Ellipsen betrachten, diese erfüllen

$$\frac{x^2}{R^2} + \frac{z^2}{C^2} = 1. \tag{D.216}$$

Setzt man hier die Definition von C ein, folgt

$$x^2 + \left(1 + \mu + r\frac{R^2}{a^2}\right)z^2 = R^2. \tag{D.217}$$

Stellt man dies nach R^2 um, erhält man

$$R^2 = \frac{x^2 + \left(1 + \mu\right)z^2}{1 - r\frac{z^2}{a^2}}. \tag{D.218}$$

Weiterhin folgt hieraus

$$\begin{aligned} 1 + \mu + r\frac{x^2}{a^2} &= 1 + \mu + \frac{x^2}{z^2} - \frac{x^2}{z^2} + r\frac{x^2}{a^2} = R^2\frac{1}{z^2}\left(1 - r\frac{z^2}{a^2}\right) - \frac{x^2}{z^2}\left(1 - r\frac{z^2}{a^2}\right) \\ &= \left(1 - r\frac{z^2}{a^2}\right)\frac{R^2 - x^2}{z^2} = \left(1 - r\frac{z^2}{a^2}\right)\left(1 + \mu + r\frac{R^2}{a^2}\right). \end{aligned} \tag{D.219}$$

Bei festem R kann in einem Halbraum die Koordinate z einer Ellipse als Funktion von x aufgefasst werden. Diese

Funktion $z(x)$ erfüllt Glg. (D.216). Differenzieren dieser Gleichung nach x ergibt

$$\frac{dz}{dx} = -\frac{C^2}{R^2}\frac{x}{z}. \tag{D.220}$$

Dies ist eine Richtungsableitung entlang der Potentialfläche. Geometrisch ist klar, dass für die lokale Senkrechte zur Potentialfläche gilt

$$\frac{dz}{dx} = \frac{R^2}{C^2}\frac{z}{x}. \tag{D.221}$$

Mit der Definition von C folgt

$$\frac{R^2}{C^2} = 1 + \mu + r\frac{R^2}{a^2}, \tag{D.222}$$

somit gilt

$$\frac{dz}{dx} = \left(1 + \mu + r\frac{R^2}{a^2}\right)\frac{z}{x} = \frac{1 + \mu + r\frac{x^2}{a^2}}{1 - r\frac{z^2}{a^2}}\frac{z}{x}. \tag{D.223}$$

Dies kann man über das in Absch. A.7 vorgestellte Verfahren der Trennung der Variablen lösen. $z(x)$ ist bijektiv, somit sind die Voraussetzungen erfüllt. Zunächst rechnet man

$$\left(1 - r\frac{z^2}{a^2}\right)\frac{dz}{dx} = \frac{z}{x}\left(1 + \mu + r\frac{x^2}{a^2}\right) \Leftrightarrow \left(\frac{1}{z} - r\frac{z}{a^2}\right)\frac{dz}{dx} = \frac{1+\mu}{x} + r\frac{x}{a^2}. \tag{D.224}$$

Also folgt

$$\begin{aligned}
\int \frac{1}{z} - r\frac{z}{a^2}dz &= \int \frac{1+\mu}{x} + r\frac{x}{a^2}dx \\
\Leftrightarrow \frac{1}{a}\int \frac{a}{z} - r\frac{z}{a}d\left(\frac{z}{a}\right) &= \frac{1}{a}\int (1+\mu)\frac{a}{x} + r\frac{x}{a}d\left(\frac{x}{a}\right) \\
\Leftrightarrow \ln\frac{z}{a} - \frac{r}{2}\frac{z^2}{a^2} &= D' + (1+\mu)\ln\left(\frac{x}{a}\right) + \frac{r}{2a^2}x^2 \\
\Leftrightarrow \frac{z}{a} &= \exp\left(D' + (1+\mu)\ln\left(\frac{x}{a}\right) + \frac{r}{2a^2}x^2 + \frac{r}{2}\frac{z^2}{a^2}\right) \\
\Leftrightarrow z &= aD\left(\frac{x}{a}\right)^{1+\mu}\exp\left[\frac{r}{2a^2}(x^2+z^2)\right]
\end{aligned} \tag{D.225}$$

mit einer Integrationskonstanten $D := \exp(D') > 0$ mit $D' \in \mathbb{R}$. Für ein gegebenes x kann man durch Lösen dieser Gleichung dasjenige z finden, welches auf der gesuchten orthogonalen Trajektorie liegt. Um welche Trajektorie es sich dabei handelt, wird durch die Zahl D festgelegt, D ist also eine Funktion einer Breite φ, es ist $D = D(\varphi)$. Die genaue Form dieser Funktion $D = D(\varphi)$ ist Konvention. Hier wird sie festgelegt durch den Schnittpunkt der Trajektorie mit dem WGS 84. Sei $(x_S, z_S)^T$ dieser Schnittpunkt. Dann gilt

$$\begin{aligned}
|z_S| &= aD\left(\frac{x_S}{a}\right)^{1+\mu}\exp\left[\frac{r}{2a^2}(x_S^2+z_S^2)\right] \\
\Rightarrow D &= \frac{|z_S|}{a}\left(\frac{a}{x_S}\right)^{1+\mu}\exp\left[-\frac{r}{2a^2}(x_S^2+z_S^2)\right].
\end{aligned} \tag{D.226}$$

Somit legt folgende Gleichung die gesuchten senkrechten Trajektorien fest:

$$\frac{z}{z_S} = \left(\frac{x}{x_S}\right)^{1+\mu}\exp\left[\frac{r}{2a^2}(x^2+z^2) - \frac{r}{2a^2}(x_S^2+z_S^2)\right] \tag{D.227}$$

D.4 GREAT-Koordinaten

Die GREAT-Koordinaten werden in [22] beschrieben. Sie eignen sich, um Differenzialoperatoren in ellipsoidischen Geometrien auszudrücken. Außerdem sind sie orthogonal.

Zunächst werden alle Längen auf die große Halbachse der Erde a skaliert:

$$\frac{x}{a} \rightarrow x, \tag{D.228}$$

$$\frac{y}{a} \rightarrow y, \tag{D.229}$$

$$\frac{z}{a} \rightarrow z, \tag{D.230}$$

$$\frac{R}{a} \rightarrow R \tag{D.231}$$

Glg. (D.227) lautet dann

$$\frac{z}{z_S} = \left(\frac{x}{x_S}\right)^{1+\mu} \exp\left[\frac{r}{2}\left(x^2+z^2\right) - \frac{r}{2}\left(x_S^2+z_S^2\right)\right] \tag{D.232}$$

D.4.1 Vertikalkoordinate

In Kugelkoordinaten bezeichnet die radiale Koordinate r eine Kugeloberfläche. In GREAT-Koordinaten bezeichnet die Radialkoordinate R ein bestimmtes Ellipsoid, R wurde bereits als Äquatorradius des entsprechenden Ellipsoids eingeführt. Dies ist die Vertikalkoordinate im GREAT-System.

D.4.2 Zonale Koordinate

Die zonale Koordinate λ eines Ortes $\boldsymbol{r}$ ist der Winkel, um den man die xz-Ebene um die z-Achse drehen muss, bis $\boldsymbol{r}$ in dieser Ebene liegt. Dies ist analog zum Azimuthwinkel in gewöhnlichen Kugelkoordinaten.

D.4.3 Meridionale Koordinate

Um die Konsistenz mit Messdaten zu gewährleisten, wird als meridionale Koordinate die geographische Breite φ gewählt. Die geographische Breite eines Punktes $\boldsymbol{r}$ außerhalb der Erde findet man wie folgt:

- Finde die senkrechte Trajektorie, auf der $\boldsymbol{r}$ liegt.
- Verfolge diese senkrechte Trajektorie bis zu ihrem Schnittpunkt $\boldsymbol{r}_s$ mit dem WGS 84.
- Finde die Lotrichtung $\boldsymbol{s}$ auf das WGS 84 am Punkt $\boldsymbol{r}_s$ und bilde die Gerade $\boldsymbol{g} = \boldsymbol{r}_s + \gamma\boldsymbol{s}$ mit $\gamma \in \mathbb{R}$.
- Verfolge die Gerade $\boldsymbol{g}$ bis zu ihrem Schnittpunkt $\boldsymbol{r}_0$ mit der xy-Ebene der globalen Koordinaten. Der Winkel, den $\boldsymbol{r}_0$ mit der xy-Ebene einschließt, ist die geographische Breite φ.

D.4.4 Metrische Faktoren

Um die herrschenden Gleichungen in GREAT-Koordinaten ausdrücken zu können, müssen die Differenzialoperatoren durch partielle Ableitungen nach φ, λ, R ausgedrückt werden. Hierzu muss zunächst einige Vorarbeit geleistet werden. Sei also ein Punkt $\boldsymbol{r} = (x, y, z)^T$ in globalen Koordinaten gegeben, $\boldsymbol{r}$ habe die GREAT-Koordinaten (R, φ, λ). Die Transformation sämtlicher Differenzialoperatoren beruht auf den metrischen Faktoren $h_\lambda, h_\varphi, h_R > 0$, definiert durch

$$h_\lambda^2 = \left(\frac{\partial x}{\partial \lambda}\right)^2 + \left(\frac{\partial y}{\partial \lambda}\right)^2 + \left(\frac{\partial z}{\partial \lambda}\right)^2, \tag{D.233}$$

$$h_\varphi^2 = \left(\frac{\partial x}{\partial \varphi}\right)^2 + \left(\frac{\partial y}{\partial \varphi}\right)^2 + \left(\frac{\partial z}{\partial \varphi}\right)^2, \tag{D.234}$$

$$h_R^2 = \left(\frac{\partial x}{\partial R}\right)^2 + \left(\frac{\partial y}{\partial R}\right)^2 + \left(\frac{\partial z}{\partial R}\right)^2. \tag{D.235}$$

Um h_R und h_φ zu bestimmen, genügt eine Betrachtung in der Meridionalebene $\lambda = 0$. Wendet man die Umskalierungen Glg.en (D.228) - (D.231) auf die Gleichungen (D.217) und (D.225) an, erhält man

$$x^2 + \left(1 + \mu + rR^2\right) z^2 = R^2, \tag{D.236}$$

$$z = D(\varphi)\, x^{1+\mu} \exp\left[\frac{r}{2}\left(x^2+z^2\right)\right]. \tag{D.237}$$

Logarithmiert man dies, erhält man

$$\begin{aligned}
\ln\left(z^2\right) &= \ln\left(R^2 - x^2\right) - \ln\left(1 + \mu + rR^2\right), && \text{(D.238)}\\
\ln\left(z\right) &= \ln\left[D\left(\varphi\right)\right] + \left(1 + \mu\right)\ln\left(x\right) + \frac{r}{2}\left(x^2 + z^2\right). && \text{(D.239)}
\end{aligned}$$

$D\left(\varphi\right)$ ergibt sich aus Glg. (D.226), die umskaliert lautet

$$D\left(\varphi\right) = \frac{\left|z_S\left(\varphi\right)\right|}{x_S\left(\varphi\right)^{1+\mu}}\exp\left[-\frac{r}{2}\left(x_S\left(\varphi\right)^2 + z_S\left(\varphi\right)^2\right)\right]. \tag{D.240}$$

Nun differenziert man Glg (D.240) partiell nach R:

$$\begin{aligned}
\frac{2}{z}\frac{\partial z}{\partial R} &= -\frac{\partial x}{\partial R}2x\frac{1}{R^2 - x^2} + 2R\frac{1}{R^2 - x^2} - 2rR\frac{1}{1 + \mu + rR^2}\\
\Leftrightarrow \left(1 + \mu + rR^2\right)z\frac{\partial z}{\partial R} &= -\frac{\partial x}{\partial R}\left(1 + \mu + rR^2\right)\frac{xz^2}{R^2 - x^2} + \left(1 + \mu + rR^2\right)\frac{Rz^2}{R^2 - x^2} - rRz^2. && \text{(D.241)}
\end{aligned}$$

Setzt man hier Glg. (D.236) ein, erhält man

$$\left(1 + \mu + rR^2\right)z\frac{\partial z}{\partial R} + x\frac{\partial x}{\partial R} = R\left(1 - rz^2\right). \tag{D.242}$$

Differenziert man Glg. (D.239) partiell nach R, erhält man:

$$\begin{aligned}
\frac{1}{z}\frac{\partial z}{\partial R} &= \left(1 + \mu\right)\frac{1}{x}\frac{\partial x}{\partial R} + r\left(x\frac{\partial x}{\partial R} + z\frac{\partial z}{\partial R}\right)\\
\Leftrightarrow \left(1 + \mu\right)\frac{1}{x}\frac{\partial x}{\partial R} - \frac{1}{z}\frac{\partial z}{\partial R} &= -r\left(x\frac{\partial x}{\partial R} + z\frac{\partial z}{\partial R}\right)\\
\Leftrightarrow \left(1 + \mu + rR^2\right)\frac{1}{x}\frac{\partial x}{\partial R} - \frac{1}{z}\frac{\partial z}{\partial R} &= -r\left(x\frac{\partial x}{\partial R} + z\frac{\partial z}{\partial R}\right) + rR^2\frac{1}{x}\frac{\partial x}{\partial R}\\
\Leftrightarrow \left(1 + \mu + rR^2\right)\frac{1}{x}\frac{\partial x}{\partial R} - \frac{1}{z}\frac{\partial z}{\partial R} &= \frac{r}{x}\frac{\partial x}{\partial R}\left(R^2 - x^2\right) - rz\frac{\partial z}{\partial R}. && \text{(D.243)}
\end{aligned}$$

Setzt man hier Glg. (D.236) ein, erhält man

$$\begin{aligned}
\Leftrightarrow \left(1 + \mu + rR^2\right)\frac{1}{x}\frac{\partial x}{\partial R} - \frac{1}{z}\frac{\partial z}{\partial R} &= \frac{r}{x}\frac{\partial x}{\partial R}\left(1 + \mu + rR^2\right)z^2 - rz\frac{\partial z}{\partial R}\\
\Leftrightarrow \left(1 + \mu + rR^2\right)\frac{1}{x}\frac{\partial x}{\partial R} - \frac{1}{z}\frac{\partial z}{\partial R} &= rz^2\left[\frac{1}{x}\frac{\partial x}{\partial R}\left(1 + \mu + rR^2\right)z^2 - \frac{1}{z}\frac{\partial z}{\partial R}\right]\\
\Leftrightarrow \left(1 + \mu + rR^2\right)\frac{1}{x}\frac{\partial x}{\partial R} - \frac{1}{z}\frac{\partial z}{\partial R} &= 0. && \text{(D.244)}
\end{aligned}$$

Stellt man dies nach $\frac{\partial z}{\partial R}$ um, erhält man

$$\frac{\partial z}{\partial R} = \frac{z}{x}\left(1 + \mu + rR^2\right)\frac{\partial x}{\partial R}. \tag{D.245}$$

Setzt man dies in Glg. (D.242) ein, erhält man

$$\begin{aligned}
& \left(1+\mu+rR^2\right)^2 \frac{z^2}{x}\frac{\partial x}{\partial R} + x\frac{\partial x}{\partial R} = R\left(1-rz^2\right) \\
\Leftrightarrow\quad & x\frac{\partial x}{\partial R}\left[1+\frac{z^2}{x^2}\left(1+\mu+rR^2\right)^2\right] = R\left(1-rz^2\right) \\
\Leftrightarrow\quad & \frac{\partial x}{\partial R} = \frac{R\left(1-rz^2\right)x^2}{x\left[x^2+z^2\left(1+\mu+rR^2\right)^2\right]} \\
\Leftrightarrow\quad & \frac{\partial x}{\partial R} = \frac{R\left(1-rz^2\right)\left(R^2-\left(1+\mu+rR^2\right)z^2\right)}{x\left[R^2-\left(1+\mu+rR^2\right)z^2+z^2\left(1+\mu+rR^2\right)^2\right]} \\
\Leftrightarrow\quad & \frac{\partial x}{\partial R} = \frac{R\left(1-rz^2\right)\left(R^2-\left(1+\mu+rR^2\right)z^2\right)}{x\left[R^2+z^2\left(1+\mu+rR^2\right)\left(\mu+rR^2\right)\right]}.
\end{aligned} \tag{D.246}$$

Dabei wurde wieder Glg. (D.236) verwendet. Setzt man Glg. (D.246) in Glg. (D.245) ein und verwendet wieder Glg. (D.238), folgt

$$\frac{\partial z}{\partial R} = \frac{zR\left(1-rz^2\right)\left(1+\mu+rR^2\right)}{R^2+z^2\left(1+\mu+rR^2\right)\left(\mu+rR^2\right)}. \tag{D.247}$$

Man erhält also mit Glg. (D.236)

$$\begin{aligned}
h_R &= \sqrt{\left(\frac{\partial x}{\partial R}\right)^2+\left(\frac{\partial z}{\partial R}\right)^2} = \frac{R\left(1-rz^2\right)\sqrt{z^2\left(1+\mu+rR^2\right)^2+x^2}}{R^2+z^2\left(1+\mu+rR^2\right)\left(\mu+rR^2\right)} \\
&= \frac{R\left(1-rz^2\right)}{\left[R^2+z^2\left(1+\mu+rR^2\right)\left(\mu+rR^2\right)\right]^{1/2}}.
\end{aligned} \tag{D.248}$$

Nun differenziert man Glg. (D.238) partiell nach φ:

$$\frac{2}{z}\frac{\partial z}{\partial \varphi} = -2x\frac{\frac{\partial x}{\partial \varphi}}{R^2-x^2} \Leftrightarrow \frac{R^2-x^2}{z}\frac{\partial z}{\partial \varphi} = -x\frac{\partial x}{\partial \varphi}. \tag{D.249}$$

Setzt man hier wiederum Glg. (D.236) ein, erhält man

$$\left(1+\mu+rR^2\right)z\frac{\partial z}{\partial \varphi} + x\frac{\partial x}{\partial \varphi} = 0. \tag{D.250}$$

Verfährt man analog mit Glg. (D.239), erhält man

$$\begin{aligned}
& \frac{1}{z}\frac{\partial z}{\partial \varphi} = \frac{d\ln\left[D\left(\varphi\right)\right]}{d\varphi} + \frac{1+\mu}{x}\frac{\partial x}{\partial \varphi} + rx\frac{\partial x}{\partial \varphi} + rz\frac{\partial z}{\partial \varphi} \\
\Leftrightarrow\quad & \left[1+\mu+rx^2\right]\frac{1}{x}\frac{\partial x}{\partial \varphi} - \left[1-rz^2\right]\frac{1}{z}\frac{\partial z}{\partial \varphi} = -\frac{d\ln\left[D\left(\varphi\right)\right]}{d\varphi} \\
\Leftrightarrow\quad & \frac{1+\mu+rx^2}{1-rz^2}\frac{1}{x}\frac{\partial x}{\partial \varphi} - \frac{1}{z}\frac{\partial z}{\partial \varphi} = -\frac{1}{1-rz^2}\frac{d\ln\left[D\left(\varphi\right)\right]}{d\varphi} \\
\Leftrightarrow\quad & \left(1+\mu+rR^2\right)\frac{1}{x}\frac{\partial x}{\partial \varphi} - \frac{1}{z}\frac{\partial z}{\partial \varphi} = -\frac{1}{1-rz^2}\frac{d\ln\left[D\left(\varphi\right)\right]}{d\varphi}.
\end{aligned} \tag{D.251}$$

Dabei wurde im letzten Schritt die mit den Glg.en (D.228) - (D.231) umskalierte Version von Glg. (D.226) eingesetzt. Stellt man dies nach $\frac{\partial z}{\partial \varphi}$ um, erhält man

$$\frac{\partial z}{\partial \varphi} = z\left(1+\mu+rR^2\right)\frac{1}{x}\frac{\partial x}{\partial \varphi} + \frac{z}{1-rz^2}\frac{d\ln\left[D\left(\varphi\right)\right]}{d\varphi}. \tag{D.252}$$

Setzt man dies in Glg. (D.250) ein, folgt

$$
\begin{aligned}
& \left(1+\mu+rR^2\right)^2 z^2 \frac{1}{x}\frac{\partial x}{\partial \varphi} + z^2 \frac{1+\mu+rR^2}{1-rz^2}\frac{d\ln\left[D\left(\varphi\right)\right]}{d\varphi} + x\frac{\partial x}{\partial \varphi} = 0 \\
\Leftrightarrow \quad & \frac{\partial x}{\partial \varphi}\left(x+\frac{z^2}{x}\left(1+\mu+rR^2\right)^2\right) = -\frac{z^2\left(1+\mu+rR^2\right)}{1-rz^2}\frac{d\ln\left[D\left(\varphi\right)\right]}{d\varphi} \\
\Leftrightarrow \quad & \frac{\partial x}{\partial \varphi}\left(x^2+z^2\left(1+\mu+rR^2\right)^2\right) = -\frac{xz^2\left(1+\mu+rR^2\right)}{1-rz^2}\frac{d\ln\left[D\left(\varphi\right)\right]}{d\varphi} \\
\Leftrightarrow \quad & \frac{\partial x}{\partial \varphi}\left(x^2+z^2\left(1+\mu+rR^2\right)\left(\mu+rR^2\right)+z^2\left(1+\mu+rR^2\right)\right) \\
= \quad & -\frac{xz^2\left(1+\mu+rR^2\right)}{1-rz^2}\frac{d\ln\left[D\left(\varphi\right)\right]}{d\varphi}.
\end{aligned}
\tag{D.253}
$$

Setzt man hier wiederum Glg. (D.236) ein, erhält man

$$
\frac{\partial x}{\partial \varphi} = -\frac{xz^2\left(1+\mu+rR^2\right)}{\left(1-rz^2\right)\left(R^2+\left(\mu+rR^2\right)\left(1+\mu+rR^2\right)z^2\right)}\frac{d\ln\left[D\left(\varphi\right)\right]}{d\varphi}. \tag{D.254}
$$

Setzt man dies in Glg. (D.252) ein und verwendet wieder Glg. (D.236), so folgt

$$
\begin{aligned}
\frac{\partial z}{\partial \varphi} &= -\frac{z^3\left(1+\mu+rR^2\right)^2}{\left(1-rz^2\right)\left(R^2+\left(\mu+rR^2\right)\left(1+\mu+rR^2\right)z^2\right)}\frac{d\ln\left[D\left(\varphi\right)\right]}{d\varphi} + \frac{z}{1-rz^2}\frac{d\ln\left[D\left(\varphi\right)\right]}{d\varphi} \\
&= \frac{zR^2+z^3\left(1+\mu+rR^2\right)\left(\mu+rR^2\right)-z^3\left(1+\mu+rR^2\right)^2}{\left(1-rz^2\right)\left(R^2+\left(\mu+rR^2\right)\left(1+\mu+rR^2\right)z^2\right)}\frac{d\ln\left[D\left(\varphi\right)\right]}{d\varphi} \\
\Leftrightarrow \frac{\partial z}{\partial \varphi} &= \frac{zR^2-z^3\left(1+\mu+rR^2\right)}{\left(1-rz^2\right)\left(R^2+\left(\mu+rR^2\right)\left(1+\mu+rR^2\right)z^2\right)}\frac{d\ln\left[D\left(\varphi\right)\right]}{d\varphi} \\
\Leftrightarrow \frac{\partial z}{\partial \varphi} &= \frac{zx^2}{\left(1-rz^2\right)\left(R^2+\left(\mu+rR^2\right)\left(1+\mu+rR^2\right)z^2\right)}\frac{d\ln\left[D\left(\varphi\right)\right]}{d\varphi}.
\end{aligned}
\tag{D.255}
$$

Somit folgt wiederum mit Glg. (D.236)

$$
\begin{aligned}
h_\varphi &= \sqrt{\left(\frac{\partial x}{\partial \varphi}\right)^2+\left(\frac{\partial \varphi}{\partial z\varphi}\right)^2} = \frac{xz\sqrt{x^2+z^2\left(1+\mu+rR^2\right)^2}}{\left(1-rz^2\right)\left(R^2+\left(\mu+rR^2\right)\left(1+\mu+rR^2\right)z^2\right)}\left|\frac{d\ln\left[D\left(\varphi\right)\right]}{d\varphi}\right| \\
\Leftrightarrow \quad h_\varphi &= \frac{xz\sqrt{R^2+z^2\left(\mu+rR^2\right)\left(1+\mu+rR^2\right)}}{\left(1-rz^2\right)\left(R^2+\left(\mu+rR^2\right)\left(1+\mu+rR^2\right)z^2\right)}\left|\frac{d\ln\left[D\left(\varphi\right)\right]}{d\varphi}\right| \\
\Leftrightarrow \quad h_\varphi &= \frac{xz}{\left(1-rz^2\right)\left(R^2+\left(\mu+rR^2\right)\left(1+\mu+rR^2\right)z^2\right)^{1/2}}\left|\frac{d\ln\left[D\left(\varphi\right)\right]}{d\varphi}\right|
\end{aligned}
\tag{D.256}
$$

Logarithmiert man beide Seiten von Glg. (D.238), erhält man

$$
\ln\left(D\right) = \ln\left(\left|z_S\right|\right) - \left(1+\mu\right)\ln\left(x_S\right) - \frac{r}{2}\left(x_S^2+z_S^2\right). \tag{D.257}
$$

Differenziert man dies, folgt

$$
\begin{aligned}
\frac{d\ln\left(D\right)}{d\varphi} &= \frac{d\ln\left(\left|z_S\right|\right)}{d\varphi} - \left(1+\mu\right)\frac{d\ln\left(x_S\right)}{d\varphi} - rx_S\frac{dx_S}{d\varphi} - rz_S\frac{dz_S}{d\varphi} \\
&= \frac{d\ln\left(\left|z_S\right|\right)}{d\varphi}\left(1-rz_S^2\right) - \frac{d\ln\left(x_S\right)}{d\varphi}\left(1+\mu+rx_S^2\right).
\end{aligned}
\tag{D.258}
$$

Diese Gleichung kann genutzt werden, um $\frac{d\ln(D)}{d\varphi}$ durch $\frac{dx_S}{d\varphi}$ und $\frac{dz_S}{d\varphi}$ auszudrücken.

Es gelten

$$x = \sqrt{x^2 + y^2}\cos\lambda, \tag{D.259}$$
$$y = \sqrt{x^2 + y^2}\sin\lambda. \tag{D.260}$$

Somit folgt

$$h_\lambda = \sqrt{\left(\frac{\partial x}{\partial \lambda}\right)^2 + \left(\frac{\partial y}{\partial \lambda}\right)^2} = \sqrt{x^2 + y^2}. \tag{D.261}$$

D.4.5 Transformation von GREAT-Koordinaten in globale Koordinaten

Sei ein Punkt $\boldsymbol{r}$ mit den GREAT-Koordinaten (R, φ, λ) gegeben. Man möchte die globalen Koordinaten $(x, y, z)^T$ dieses Punktes bestimmen. Nehme zunächst $\lambda = 0$ an. Quadriert man Glg. (D.237), erhält man

$$z^2 = D(\varphi)^2 (x^2)^{1+\mu} \exp\left[r\left(x^2 + z^2\right)\right]. \tag{D.262}$$

Setzt man hier Glg. (D.239) ein, folgt

$$z^2 = D(\varphi)^2 \left[R^2 - z^2\left(1 + \mu + rR^2\right)\right]^{1+\mu} \exp\left[r\left(R^2 - z^2\left(\mu + rR^2\right)\right)\right]. \tag{D.263}$$

Diese Gleichung ist implizit und daher iterativ zu lösen. $D(\varphi)$ und R sind hierbei Konstanten, z^2 ist die einzige verbleibende, zu bestimmende Größe. Über Glg. (D.239) lässt sich dann x^2 bestimmen. Das Vorzeichen von z ist das Vorzeichen von φ. Im Fall $\lambda \neq 0$ ist

$$x^2 \to r_\perp^2 \tag{D.264}$$

zu ersetzen, sodass man erhält

$$x = r_\perp \cos(\lambda), \tag{D.265}$$
$$y = r_\perp \sin(\lambda). \tag{D.266}$$

D.4.6 Transformation von globalen Koordinaten in GREAT-Koordinaten

Sei ein Punkt $\boldsymbol{r}$ mit den globalen Koordinaten $(x, y, z)^T$ gegeben, und man möchte die GREAT-Koordinaten (R, φ, λ) von $\boldsymbol{r}$ bestimmen. Notiert man Glg. (D.218) mit den Ersetzungen Glg.en (D.228) - (D.231), erhält man

$$R^2 = \frac{x^2 + y^2 + (1 + \mu) z^2}{1 - rz^2}. \tag{D.267}$$

Dabei wurde $x^2 \to x^2 + y^2$ ersetzt, da man vom allgemeinen Fall $\lambda \neq 0$ ausgeht. λ erhält man über

$$\lambda = \operatorname{sign}(y) \arccos\left(\frac{x}{\sqrt{x^2 + y^2}}\right). \tag{D.268}$$

Um φ zu bestimmen, stellt man zunächst Glg. (D.237) nach D um und ersetzt wieder $x^2 \to x^2 + y^2$:

$$D = \frac{z}{\sqrt{x^2 + y^2}^{1+\mu}} \exp\left(-\frac{r}{2}\left(x^2 + y^2 + z^2\right)\right) \tag{D.269}$$

Nun setzt man in Glg. (D.263) $R = 1$ ein, was der Oberfläche des WGS 84 entspricht, und löst numerisch für z_S^2, das Vorzeichen von z_S ist identisch mit dem Vorzeichen von z. Nun kann man Glg. (D.236) mit $R = 1$, $z = z_S$ und $x^2 \to x_S^2 + y_S^2$ verwenden, um $x_S^2 + y_S^2$ zu bestimmen. Über die Gleichung

$$\varphi_S = \arctan\left[\frac{a^2}{c^2}\frac{z_S}{\sqrt{x^2 + y^2}}\right] \tag{D.270}$$

kann man φ_S schließlich bestimmen. Glg. (D.270) soll nun noch hergeleitet werden. Betrachte hierzu o. B. d. A. die Ebene $\lambda = 0$, also $y = 0$. Der Schnitt des WGS 84 mit dieser Ebene ist gegeben durch (man beachte die

Skalierung)

$$x^2 + \frac{z^2}{c^2} = 1. \tag{D.271}$$

Definiere

$$f(x,z) := x^2 + \frac{z^2}{c^2}, \tag{D.272}$$

dann gilt

$$\nabla f = \begin{pmatrix} 2x \\ \frac{2z}{c^2} \end{pmatrix}. \tag{D.273}$$

Das WGS 84 ist gegeben durch die Konturmenge $f = 1$. Definiere die Gerade $\boldsymbol{g}$ in der xz-Ebene der globalen Koordinaten durch

$$\boldsymbol{g} = \begin{pmatrix} x_S \\ z_S \end{pmatrix} + \gamma \begin{pmatrix} x_S \\ \frac{z_S}{c^2} \end{pmatrix} \tag{D.274}$$

mit $\gamma \in \mathbb{R}$. Der Schnittpunkt von $\boldsymbol{g}$ mit der x-Achse ist im Fall $z_S \neq 0$ gegeben durch

$$0 = z_S + \gamma \frac{z_S}{c^2} \Rightarrow \gamma = -c^2. \tag{D.275}$$

Für die x-Koordinate dieses Punktes erhält man

$$x = x_S \left(1 - c^2\right). \tag{D.276}$$

Es gilt also

$$\tan\left(\varphi_S\right) = \frac{z_S}{x_S c^2}. \tag{D.277}$$

Mit Glg. (D.271) folgt

$$z_S^2 = c^2 \left(1 - x_S^2\right) \tag{D.278}$$

und damit gilt

$$\begin{aligned} \tan\left(\varphi_S\right) &= \frac{c\sqrt{1 - x_S^2}}{x_S c^2} = \frac{\sqrt{1 - x_S^2}}{x_S c} \Leftrightarrow \tan^2\left(\varphi_S\right) = \frac{1 - x_S^2}{x_S^2 c^2} \Leftrightarrow x_S^2 \left(c^2 \tan^2\left(\varphi_S\right) + 1\right) = 1 \\ \Leftrightarrow x_S^2 &= \frac{\cos^2\left(\varphi_S\right)}{c^2 \sin^2\left(\varphi_S\right) + \cos^2\left(\varphi_S\right)}. \end{aligned} \tag{D.279}$$

Mit $x_S > 0$ folgt

$$x_S = \frac{\cos\left(\varphi_S\right)}{\sqrt{c^2 \sin^2\left(\varphi_S\right) + \cos^2\left(\varphi_S\right)}}. \tag{D.280}$$

Stellt man Glg. (D.271) nach x_S um, erhält man

$$x_S = \sqrt{1 - \frac{z^2}{c^2}}. \tag{D.281}$$

Setzt man dies in Glg. (D.277) ein, erhält man

$$\begin{aligned}
\tan(\varphi_S) &= \frac{z_S}{c^2\sqrt{1-\frac{z_S^2}{c^2}}} \Leftrightarrow c^4\tan^2(\varphi_S)\left(1-\frac{z_S^2}{c^2}\right) = z_S^2 \\
\Leftrightarrow z_S^2\left(1+c^2\tan^2(\varphi_S)\right) &= c^4\tan^2(\varphi_S) \Leftrightarrow z_S^2 = \frac{c^4\sin^2(\varphi_S)}{\cos^2(\varphi_S)+c^2\sin^2(\varphi_S)} \\
\Leftrightarrow z_S &= \operatorname{sign}(\varphi_S)\frac{c^2\sin(\varphi_S)}{\sqrt{\cos^2(\varphi_S)+c^2\sin^2(\varphi_S)}}. \qquad \text{(D.282)}
\end{aligned}$$

Es gilt somit

$$\frac{z_S}{x_S} = \frac{c^2}{a^2}\tan(\varphi), \qquad \text{(D.283)}$$

mit der Verallgemeinerung $x_S \to \sqrt{x_S^2+y_S^2}$ folgt Glg. (D.270).

Nun soll noch ein expliziter Ausdruck für $D(\varphi)$ gefunden werden. Hierzu setzt man die Glg.en (D.280) und (D.282) mit $y = 0$ in Glg. (D.269) ein:

$$\begin{aligned}
D(\varphi_S) &= \frac{|z_S|}{x_S^{1+\mu}}\exp\left(-\frac{r}{2}\left(x_S^2+z_S^2\right)\right) \\
&= \frac{c^2\sin(\varphi_S)\left(\cos^2(\varphi_S)+c^2\sin^2(\varphi_S)\right)^{\mu/2}}{\left(\cos(\varphi_S)\right)^{1+\mu}}\exp\left[-\frac{r}{2}\left(\frac{\cos^2(\varphi_S)+c^4\sin^2(\varphi_S)}{\cos^2(\varphi_S)+c^2\sin^2(\varphi_S)}\right)\right]. \qquad \text{(D.284)}
\end{aligned}$$

Logarithmiert man dies, folgt

$$\begin{aligned}
\ln\left[D(\varphi_S)\right] &= 2\ln(c)+\ln(\sin(\varphi_S))+\frac{\mu}{2}\ln\left(\cos^2(\varphi_S)+c^2\sin^2(\varphi_S)\right)-\left(1+\mu\right)\ln(\cos(\varphi_S)) \\
&\quad -\frac{r}{2}\left(\frac{\cos^2(\varphi_S)+c^4\sin^2(\varphi_S)}{\cos^2(\varphi_S)+c^2\sin^2(\varphi_S)}\right). \qquad \text{(D.285)}
\end{aligned}$$

Somit erhält man

$$\begin{aligned}
\frac{d\ln\left[D(\varphi)\right]}{d\varphi} &= \frac{\cos(\varphi_S)}{\sin(\varphi_S)}+\frac{\mu}{2}\frac{-2\sin(\varphi_S)\cos(\varphi_S)+c^2 2\cos(\varphi_S)\sin(\varphi_S)}{\cos^2(\varphi_S)+c^2\sin^2(\varphi_S)}+\left(1+\mu\right)\frac{\sin(\varphi_S)}{\cos(\varphi_S)} \\
&\quad -\frac{r}{2}\frac{\left(-2\cos(\varphi_S)\sin(\varphi_S)+2c^4\cos(\varphi_S)\sin(\varphi_S)\right)\left(\cos^2(\varphi_S)+c^2\sin^2(\varphi_S)\right)}{\left(\cos^2(\varphi_S)+c^2\sin^2(\varphi_S)\right)^2} \\
&\quad +\frac{r}{2}\frac{\left(\cos^2(\varphi_S)+c^4\sin^2(\varphi_S)\right)\left(-2\sin(\varphi_S)\cos(\varphi_S)+c^2 2\cos(\varphi_S)\sin(\varphi_S)\right)}{\left(\cos^2(\varphi_S)+c^2\sin^2(\varphi_S)\right)^2} \\
&= \frac{1}{\sin(\varphi_S)}\left(\cos(\varphi_S)+\frac{\sin^2(\varphi_S)}{\cos(\varphi_S)}\right)+\mu\sin(\varphi_S)\cos(\varphi_S)\frac{c^2-1+1+c^2\tan^2(\varphi_S)}{\cos^2(\varphi_S)+c^2\sin^2(\varphi_S)} \\
&\quad +r\frac{\left(\cos(\varphi_S)\sin(\varphi_S)-c^4\cos(\varphi_S)\sin(\varphi_S)\right)\left(\cos^2(\varphi_S)+c^2\sin^2(\varphi_S)\right)}{\left(\cos^2(\varphi_S)+c^2\sin^2(\varphi_S)\right)^2} \\
&\quad +r\frac{\left(\cos^2(\varphi_S)+c^4\sin^2(\varphi_S)\right)\left(-\sin(\varphi_S)\cos(\varphi_S)+c^2\cos(\varphi_S)\sin(\varphi_S)\right)}{\left(\cos^2(\varphi_S)+c^2\sin^2(\varphi_S)\right)^2} \\
&= \frac{1}{\sin(\varphi_S)\cos(\varphi_S)}+\mu\tan(\varphi_S)\frac{c^2}{\cos^2(\varphi_S)+c^2\sin^2(\varphi_S)} \\
&\quad +r\frac{\sin(\varphi_S)\cos(\varphi_S)\left(c^2\left(\sin^2(\varphi_S)+\cos^2(\varphi_S)\right)+c^4\left(-\sin^2(\varphi_S)-\cos^2(\varphi_S)\right)\right)}{\left(\cos^2(\varphi_S)+c^2\sin^2(\varphi_S)\right)^2} \\
&= \frac{1}{\sin(\varphi_S)\cos(\varphi_S)}+\mu\tan(\varphi_S)\frac{c^2}{\cos^2(\varphi_S)+c^2\sin^2(\varphi_S)}+r\frac{\sin(\varphi_S)\cos(\varphi_S)\,c^2\left(1-c^2\right)}{\left(\cos^2(\varphi_S)+c^2\sin^2(\varphi_S)\right)^2}. \qquad \text{(D.286)}
\end{aligned}$$

Die Transformation der Differenzialoperatoren kann nun durchgeführt werden. Dies wird hier jedoch nicht mehr gemacht, da analytische Rechnungen in Kugelkoordinaten vorgenommen werden und es für die Transformation der Differenzialoperatoren auf das Modellgitter auch nicht in Gänze benötigt wird.

D.4.7 Lamb-Transformation in GREAT-Koordinaten

D.5 Ellipsoidische Geometrie

D.5.1 Ellipsoidische Geodäten

D.5.2 Ellipsoidische Dreiecke

D.5.3 Ellipsoidische Voronoi-Gitter

Literatur

[1] M. Abramowitz und I. A. Stegun. *Handbook of Mathematical Functions. With Formulas, Graphs, and Mathematical Tables*. 2014.

[2] National Aeronautics und Space Administration. *Earth Fact Sheet*. 2016. URL: https://nssdc.gsfc.nasa.gov/planetary/factsheet/earthfact.html.

[3] A. Arakawa und V. R. Lamb. Computational design of the basic dynamical processes of the UCLA general circulation model. In: *Methods of Computational Physics* 17 (1977), S. 173–265.

[4] S. Chandrasekhar. *Radiative Transfer*. Dover Publications, 1960.

[5] T. Fließbach. *Elektrodynamik. Lehrbuch zur Theoretischen Physik II*. Heidelberg: Spektrum Akademischer Verlag, 2012.

[6] T. Fließbach. *Mechanik. Lehrbuch zur Theoretischen Physik I*. Heidelberg: Spektrum Akademischer Verlag, 2009.

[7] T. Fließbach. *Quantenmechanik. Lehrbuch zur Theoretischen Physik III*. Heidelberg: Spektrum Akademischer Verlag, 2008.

[8] T. Fließbach. *Statistische Physik. Lehrbuch zur Theoretischen Physik IV*. Heidelberg: Spektrum Akademischer Verlag, 2010.

[9] *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 (besucht am 21. 11. 2019).

[10] M. Hantel. *Einführung Theoretische Meteorologie*. Berlin, Heidelberg: Springer Spektrum, 2013.

[11] J. R. Holton. *An Introduction to Dynamic Meteorology*. New York: Academic Press, Inc., 1979.

[12] National Imagery und Mapping Agency. *Department of Defense World Geodetic System 1984. Its Definition and Relationships with Local Geodetic Systems*. 2000.

[13] C. Jablonowski und D. L. Williamson. A baroclinic instabiliy test case for atmospheric model dynamical cores. In: *Q. J. R. Meteorol. Soc.* 132 (2006), S. 2943–2975.

[14] J. D. Klett und H. R. Pruppacher. *Mircrophysisc of Clouds and Precipitation*. 2. Aufl. Bd. 18. Atmospheric and Oceanographic Sciences Library. Springer Science+Business Media, 2010.

[15] Pijush K. Kundu, Ira M. Cohen und David R. Dowling. *Fluid Mechanics*. Sixth Edition. Boston: Academic Press, 2016. ISBN: 978-0-12-405935-1. DOI: https://doi.org/10.1016/B978-0-12-405935-1.00001-0. URL: http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/B9780124059351000010.

[16] P. Kurzweil, B. Frenzel und F. Gebhard. *Physik Formelsammlung*. Wiesbaden: Springer Vieweg, 2014.

[17] Stanisław R. Massel. *Ocean Surface Waves. Their Physics and Prediction*. 3. Aufl. Bd. 45. Advanced Series on Ocean Engineering. World Scientific Publishing, 2018.

[18] D. D. McCarthy und G. Petit. *IERS Conventions (2003)*. International Earth Rotation und Reference Systems Service. 2003.

[19] P. J. Mohr, D. B. Newell und B. N. Taylor. CODATA recommended values of the fundamental physical constants: 2014. In: *Reviews of Modern Physics* 88 (2016).

[20] International Association for the Properties of Water und Steam. *Guideline on the Use of Fundamental Physical Constants and Basic Constants of Water. IAPWS G5-01(2016)*. 2016.

[21] A. Staniforth und J. Thuburn. Horizontal grids for global weather and climate prediction: a review. In: *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society* (2011).

[22] A. Staniforth und A. White. Geophysically Realistic, Ellipsoidal, Analytically Tractable (GREAT) coordinates for atmospheric and oceanic modelling. In: *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society* (2015).

[23] *The five different grids by Arakawa*. Wikimedia Commons, user: Rpnl ocn, license: CC BY - SA 4.0.

Index

Θ−Funktion, 219
β−Ebene, 160
β−Effekt
    orographischer, 171
ω−Gleichung, 197, 222
σ_p−System, 124
σ_z−System, 123
θ−System, 122, 140
    hydrostatische Stabilität, 176
k^{-3}−Spektrum, 232
$k^{-5/3}$−Spektrum, 232
2D-vektorinvariante Form der Geschwindigkeitsadvektion, 314
3D-Var, 267
4-Vektor, 28
4D-Var, 267

Ableitung
    materielle, 301, 314
        Kugelkoordinaten, 313
    mehrdimensionale, 301
    totale, 121, 301
absolute Feuchte, 89
Absorptionskoeffizient, 150, 241
Abstand
    zweier Ereignisse in der Raumzeit, 28
Absteigeoperator, 60
Additionstheorem, 293
Adhäsionsbedingung, 117, 227
Adiabatenexponent, 181
adiabatische Konversion, 139
adjungierte Matrix, 42
Advektion, 117, 302
    vertikale, 276, 278
Advektionsform, 129
Advektionsoperator, 302
Algebra
    Hauptsatz der, 43
allgemeine binomische Formel, 289
Amplitudenspektrum, 318
Ampère'sches Gesetz, 24
anormale Dispersion, 179
Antisymmetrie
    der Wellenfunktion, 73
Antizyklogenese, 222
APE, 140
Approximation, 241
    hydrostatische, 203
    traditionelle, 118
Arakawa-Gitter, 259
Arbeit, 17, 78
Arcusfunktion, 292, 294
Areafunktion, 291
Atmosphäre
    einphasige
        Integralrelation, 137
    Gesamtdrehimpuls, 140
    Gesamtimpuls, 139
    Hamilton-Funktion, 142
    Hamiltonä-Formalismus, 142
    Zustand, 103
atmosphärische Optik, 241
atmosphärischer Zustand, 104
Aufsteigeoperator, 60
Auslösetemperatur, 219
available potential Energy (APE), 140
Axiom
    Newton'sches
        Zusatz, 15
    Zweites
        Newton'sches, 139

BAC-CAB-Regel, 300
Badsystem, 81
Balancegleichung, 173
    lineare, 173
barokline Instabilität, 207
barokline Rossby-Wellen, 194
barokline Schwerewelle, 201
    Gruppengeschwindigkeit, 205, 206
    Phasengeschwindigkeit, 205, 206
barokline Welle, 191
barotrope Instabilität, 206
barotrope potentielle Vorticity, 170
barotrope Rossby-Welle, 190
barotrope Vorticitygleichung, 168, 206
barotrope Welle, 181
Barotropie, 156
Basiselemente
    kovariante, 272
Bernoulli-Gleichung, 138
    zeitabhängige, 171, 210
Bewegungsgleichung
    Hamilton-Formalismus, 22
Bijektion, 288
Binomialkoeffizient, 288
binomische Formel
    allgemeine, 289
binomischer Lehrsatz, 289
Bodenreibung, 117, 226
Bose-Verteilung, 100
Boson, 61
Boussinesq-Approximation, 158, 159
Brazustand, 41
Breiten
    hohe, 221
    mittlere, 221
Bretherton-Transformation, 203
Brunt-Väisälä-Frequenz, 192, 214
Bulk-Viskosität, 114
buoyancy, 201
Burgers-Gleichung, 226

CAPE, 218, 219
CCL, 220
CFL-Kriterium, 276
cgs-System, 9, 287
chemische Reaktion, 74
chemisches Element, 49
chemisches Potential, 82
    ideales Gas, 88
CIN, 219
Clausius-Clapeyron-Gleichung, 95, 96
convective available potential Energy (CAPE), 218, 219
convective condensation level (CCL), 220
convective inhibition (CIN), 219
Coriolis-Parameter, 116
Coriolis-Vektor, 116
Coulomb'sches Gesetz, 24
Crank-Nicolson-Verfahren, 253, 276, 278

d'Alembert-Operator, 31

Datenassimilation, 267
Deltadistribution, 294
Determinante, 272, 290
Diagnostik, 133
diagnostische Variable, 273
Dichte
  mikroskopische, 104
  trockener Luft, 103
Dichteoperator, 75
Dicke der Grenzschicht, 229
Differenz
  finite, 247
Differenzialgleichung
  Hermite'sche, 328
  Laguerre'sche, 54
  Legendre'sche, 319
Differenzialoperator
  Rechenregel, 304
  unter Koordinatentransformation, 307
differenzielle Temperaturadvektion, 222
Diffusion, 94, 148
  horizontale, 281
  skalare
    Parametrisierung, 231
  vertikale, 281
Diffusionsgleichung, 94
Diffusionskonstante, 94
diffusiver Fluss, 269
Dirac-Gleichung, 67
Dirac-Notation, 41
diskrete Schichtung
  Kelvin-Helmholtz-Instabilität, 208
Diskretisierung, 247
  mimetische Eigenschaft, 276
Dispersion
  anormale, 179
Dispersionsrelation, 178, 182
  einer hydrostatischen Schwerewelle, 205
  einer Schwerewelle, 205
  Quantenmechanik
    freies Teilchen, 34
Dissipation, 139, 148, 149
Divergenz, 163, 171, 263, 301
  eines Vektorfeldes, 301
Divergenzgleichung, 172
  p-System, 172
Drehimpuls, 17
  der Atmosphäre, 140
  quantenmechanischer, 56
  Wasserstoffatom, 58
Drehimpulserhaltung
  im Modell, 280
Drehimpulserhaltungssatz, 17
Drehimpulsoperator, 56
Drehimpulsquantenzahl, 56, 59
Drehmoment, 17
dreielementiges Erzeugendensystem, 260
Druck, 103
  Gleichung
    prognostische, 129
  prognostische Gleichung, 129
Druck mittlerer, 114
Druckgradient, 147
Druckgradientbeschleunigung, 147
  Exner-Druck, 130
Druckgradientkraft, 110
Dynamik, 9, 155
  tropische, 223
dynamische Randbedingung, 117, 209, 210
dynamische Viskosität, 94, 113
dynamischer Kern, 9, 269, 283
  erweiterter, 269
  irreversibler Teil, 269
  primärer Teil, 269
  reversibler Teil, 269
  sekundärer Teil, 269
  trockener, 269
  Zeitschrittverfahren, 275, 280

Eddy-Austauschkoeffizient, 226
Eddy-Stress-Term, 226
Eddy-Viskositäts-Koeffizient, 227
Eichinvarianz der Maxwell-Gleichungen, 24
Einheitskugel, 270
Einheitsvektor, 260
Einstein'sche Summenkonvention, 29
Ekman-Schicht, 227
Ekman-Spirale, 161
Ekman-Transport, 227
Ekman-Zahl, 230
elektrisches Feld, 104
Elektrodynamik, 23
elektromagnetische Welle, 25
elektromagnetisches Feld
  Energie, 26
Element
  chemisches, 49
Ellipse, 337
  Halbachse
    große, 337
    kleine, 337
Ellipsoid, 337, 338
ellipsoidische Approximation
  des Schwerefeldes, 338
ellipsoidische Geometrie, 366
ellipsoidisches Voronoi-Gitter, 366
Emissivität, 101
Energie, 17
  des elektromagnetischen Feldes, 26
  freie, 83
  innere, 137, 139, 140
  kinetische, 18, 116, 140, 232
    Reibung, 115
    spezifische, 137, 275
  potentielle, 140
    konvektiv verfügbare, 218, 219
    totale, 140
    verfügbare, 140
Energiedichte, 28, 137
  kinetische, 137
Energiekaskade, 232
Ensemble, 75
  großkanonisches, 81
  kanonisches, 81
  mikrokanonisches, 77
Entartung, 56
Enthalpie, 83, 139, 140
  freie, 83
  spezifische, 130
Entropie, 132, 145
  spezifische, 125
EPV-Advektion
  im Modell, 280
Erde
  Schwerefeld, 337

Erdrotation, 118
Ereignis, 28
Erster Hauptsatz
der Thermodynamik, 249
Erster Hauptsatz der Thermodynamik, 201, 249
in der Atmosphäre, 124
Erster Hauptsatz der Thermodynamik, 78
Ertel'scher Wirbelsatz, 174
Erwartungswert, 318
Erzeugendensystem, 261
dreielementiges, 260
Erzeugungsoperator, 45, 47
Euler-Gleichung, 110
Euler-Identität, 293
Euler-Verfahren
explizites, 251, 275
implizites, 253, 275
Euler-Wind, 161
evaneszente Welle, 177
Exner-Druck, 130
Druckgradientbeschleunigung, 130
explizites Eueler-Verfahren, 275
explizites Euler-Verfahren, 251
explizites Zeitschrittverfahren, 275
Exponentialfunktion, 237, 291
komplexe, 317
extensive Größe, 88
externe Kraft, 139
Extratropen, 221
Exzentrizität, 337

f-Ebene, 159
f-Kugel, 159, 189
Fakultät, 288
Faraday'sches Induktionsgesetz, 24
Fehlerfunktion, 296
Feinstrukturkonstante, 67
Feld
elektrisches, 104
im Modell, 273
Feldstärketensor, 31
Fermion, 61
Feuchtadiabate
irreversible, 215, 218
reversible, 215
feuchtadiabatischer Temperaturgradient, 217
Feuchte
absolute, 89
mikroskopische, 105
relative, 89
spezfische, 109
spezifische, 89
feuchte Luft, 103, 134
Feuchtemaß, 89
feuchter Luft
spezifische Wärmekapazität, 134
fiktive molare Masse, 133
Filter
Zeitschrittverfahren, 276
Filterung, 155
finite Differenz, 247
Flachwassergleichung, 119
Flachwassergleichungen
Linearisierung, 120
Flachwasserwelle, 182
Fluid
ideales, 115
Newton'sches, 114
Fluss
diffusiver, 269
Flussdichte
magnetische, 104
Flussform, 129
Forcing, 105
Formel
binomische
allgenmeine, 289
Forward-backward-Verfahren, 256
Fourier-Transformation, 232, 317
inverse, 232, 317
freie Energie, 83
freie Enthalpie, 83
freie Konvektion, 219
freies Teilchen, 34
Frequenz
intrinsiche, 204
Front, 222
Frontalzone, 233
Frontogenese, 197
Funktion
rationale, 291
trigonometrische, 292
Funktional, 143
Funktionaldeterminante, 117, 272, 315
generalisierte Vertikalkoordinate, 272
Funktionensysteme
orthogonale, 317

Gammafunktion, 296
Gas
ideales, 86
chemisches Potential, 88
einatomiges, 124
Gaskonstante
individuelle, 124, 249
Gasmodell
kinetisches, 93
Gasphase, 103
Gauß'sche Summenformel, 287
Gauß'scher Satz, 23, 156, 315
gemischter Zustand, 76
generalisierte Geschwindigkeit, 20
generalisierte Koordinaten, 19
Skalarprodukt, 308
Vektorprodukt, 308
generalisierte Vertikalkoordinate, 120, 156, 272
Funktionaldeterminante, 272
Geodäsie, 335
Geodäte, 335
Geofluidsimulation, 248
geographische Koordinaten, 335
geographischen Koordinaten, 117
Geometrie
ellipsoidische, 366
sphärische, 335
geometrische Reihe, 288
Geopotential, 137
Geopotentialtendenz, 221
geopotentielle Höhe, 156
Geostrophie, 157
geostrophische Mode, 205
gerade Permutation, 288
Gesamtdrehimpuls der Atmosphäre, 140
Gesamtimpuls der Atmosphäre, 139
Geschwindigkeit
generalisierte, 20
Geschwindigkeitsadvektion

2D-vektorinvariante Form, 314
Kugelkoordinaten, 311
Geschwindigkeitsdivergenz, 171
Geschwindigkeitsgradiententensor, 113
Geschwindigkeitspotential, 163
Gesetz
Coulomb'sches, 24
gewichtetes Mittel
allgemeines, 231
Gibbs-Potential, 83, 88
ideales Gas, 88
Gitter
Arakawa, 259
horizontales, 269
Orthogonalität, 249
Quasi-Uniformität, 249
Uniformität, 249
Gitterbox
Volumen, 337
Gitteroptimierung, 271
Gleichgewichtsniveau, 219
Gleichung
herrschende, 152
kanonische, 22
prognostische
Druck, 129
Gleichungen
herrschende, 103
zonal gemittelte, 233
Gleichungssystem
lineares, 277, 279
gleitendes Mittel, 230
gleitendes Zeitmittel, 230
globale Koordinaten, 272, 335
globale Mode, 189
Gradientenwind, 160
Gradientenwindhöhe, 230
Gravitationsgesetz
Newton'sches, 338
Gravitationskonstante
Newton'sche, 156
Graßmann-Identität, 300
GREAT-Koordinaten, 358
Lamb-Transformation, 366
meridionale Koordinate, 359
metrische Faktoren, 359
Transformation, 363
Vertikalkoordinate, 359
zonale Koordinate, 359
Grenzschicht, 229
planetare, 226
große Halbachse, 337
große Skala, 9
großkanonisches Ensemble, 81
großkanonisches Potential, 83
Großskala, 9
Grundfunktion, 291
Additionstheoreme, 293
Symmetrieeigenschaften, 292
Grundgleichung
hydrostatische, 155
Grundkonzepte
Numerik, 247
Gruppengeschwindigkeit, 178
barokline Schwerewelle, 205, 206
Größe
extensive, 88
H-Atom, 49
relativistische Korrektur, 73
Übergang, 71
H-Theorem, 77
Halbachse
große, 337
kleine, 337
Hamilton'sche Bewegungsgleichung, 22
Hamilton-Formalismus, 18, 21
Atmosphäre, 142
Hamilton-Funktion, 21, 23
Atmosphäre, 142
Hamilton-Operator, 33
harmonischer Oszillator, 38
Hauptquantenzahl, 55
Hauptsatz der Algebra, 43
Hauptsatz der Vektoranalysis, 163, 264
Hebungskondensationsniveau (HKN), 215, 218
Hebungskurve, 128
Held-Suarez-Test, 281
Herleitung
einer Parametrisierung, 231
Hermite'sche Differenzialgleichung, 328
Hermite'scher Operator, 43
Hermite-Polynom, 40, 328
Hermitezität
Impulsoperator, 44
herrschende Gleichung, 103, 152
Hesselberg-Mittel, 225
HEVI-Konzept, 276
Hilbert-Raum, 40
HKN, 215, 218
hohe Breiten, 221
holonome Zwangsbedingung, 18
horizontale Diffusion, 281
horizontale Entkopplung, 241
horizontaler Laplace-Operator, 302
horizontaler Nabla-Operator, 302
horizontales Gitter, 269
horizontales Skalarfeld, 271
horizontally explicit, vertically implicit (HEVI), 276
Hydrostatik, 122, 155, 203
hydrostatische Arpproximation, 203
hydrostatische Grundgleichung, 155
hydrostatische Stabilität im θ−System, 176
Hyperbelfunktion, 291
Höhe
geopotentielle, 156

ideales Fluid, 115
ideales Gas, 86
chemisches Potential, 88
einatomiges, 124
Zustandsgleichung, 125
Ikosaeder, 270
implizites Eueler-Verfahren, 275
implizites Euler-Verfahren, 253
implizites Zeitschrittverfahren, 275, 276
Impuls
der Atmosphäre, 139
kanonischer, 21
Impulsdiffusion
horizontale, 281
vertikale, 281
Impulserhaltung
im Modell, 280
Impulserhaltungssatz, 17

Impulsflussdichtetensor, 110
Impulsgleichung, 109, 116
Impulsoperator, 34
    Hermitezität, 44, 45
individuelle Gaskonstante, 124, 249
Induktion
    vollständige, 288
Induktionsgesetz
    Faraday'sches, 24
Inertialwelle, 185
Inertialwellen, 185
Informationsverlust
    deskriptiver
        Wolkenmikrophysik, 105
Inkompressibilität, 115
innere Energie, 137, 139, 140
Instabilität, 117, 177, 206
    barokline, 207
    barotrope, 206
    lineare, 251
    thermische, 215
Integralformel, 295
Integralrechnung
    mehrdimensionale, 315
Integralrelation
    einer einphasigen Atmosphäre, 137
Integration
    partielle, 140, 295
intrinsische Frequenz, 204
inverse Fourier-Transformation, 232, 317
inverse Matrix, 42
Inversion, 215
Ion, 49
Ionisation, 49
Ionosphäre, 104
irreversible Feuchtadiabate, 215, 218
iseentrope Koordinate, 176
isentrope Koordinate, 122, 135
Isentropenexponent, 181
isentropes Koordinatensystem, 135
Isotop, 49
isotroper Tensor, 113
Isotropie, 113

Jacobi-Matrix, 301
Jet, 207, 233
JW-Test, 280

kalorische Zustandsgleichung, 80
kalorische Zustandsgleichung idealer Gase, 87
kanonische Gleichung, 22
kanonischer Impuls, 21
kanonisches Ensemble, 81
Kapilardruck, 97
Kapillarität, 97
Kapillarwellen, 184
kartesichen Koordinaten, 275
kartesisches Koordinatensystem, 112
Kelvin-Gleichung, 97, 98
Kelvin-Helmholtz-Instabilität
    in diskreter Schichtung, 208
    in kontinuierlicher Schichtung, 212
Kelvin-Welle, 186
    äquatoriale, 188
Kelvon-Helmholtz-Instabilität, 208
Kern
    dynamischer, 9, 269, 283
        erweiterter, 269
        irreversibler Teil, 269
        primärer Teil, 269
        reversibler Teil, 269
        sekundären Teil, 269
        trockener, 269
        Zeitschrittverfahren, 275, 280
Ketzustand, 41
Kinematik
    Welle, 177
kinematische Randbedingung, 117, 138, 209, 210
kinematische Viskosität, 115
kinetische Energie, 18, 140, 232
    Reibung, 115
    spezifische, 116, 137, 275
kinetische Energiedichte, 137
kinetisches Gasmodell, 93
Kirchhoff'sches Strahlungsgesetz, 102
KKN, 220
klassische Mechanik, 15
kleine Halbachse, 337
Klimatologie
    der Atmosphäre, 233
Kollision, 148
Kommutator, 46
kommutierende Operatoren, 46
Komnbinatorik, 288
komplexe Exponentialfunktion, 317
komplexe Zahl, 294
Kondensat, 135, 249
Kondensatklasse, 103
konkrete Mittelungsoperatoren, 230
konservatives Kraftfeld, 18
Konsistenz
    eines numerischen Verfahrens, 247
kontinuierliche Schichtung
    Kelvin-Helmholtz-Instabilität, 212
Kontinuitätsgleichung, 106, 129, 132, 249
Kontinuumsübergang, 103
    Zweiter, 103
Konvektion
    freie, 219
Konvektionskondensationsniveau (KKN), 220
konvektiv verfügbare potentielle Energie, 218, 219
konvektive Schranke, 219
Konvention
    über Koordinatensysteme, 335
Konversion
    adiabatische, 139
Koordinate
    generalisierte, 19
    isentrope, 135, 176
    orographische, 123, 124
Koordinaten
    geographische, 117
    globale, 272
    kartesiche, 275
    orthogonale, 307
    ruhende, 140
Koordinatenfläche, 112
Koordinatensystem, 204, 272
    geographisches, 335
    globales, 335
    GREAT, 358
    isentropes, 135
    kartesisches, 112
    Konvention, 335
    Kugel, 308
    orthogonales, 307
    ruhendes, 335

Koordinatentransformation
Differenzialoperator, 307
Koordinte
isentrope, 122
Korrelationsfluss, 225
kovariante Basiselemente, 272
Kraft
externe, 139
verallgemeinerte, 21, 78
Kraftfeld
konservatives, 18
Krümmungsradius, 302
Krümmungsvorticity, 165
Kugelflächenfunktion, 332
Produkte, 334
Kugelkoordinaten, 272, 308
Geschwindigkeitsadvektion, 311
Laplace-Operator, 310
materielle Ableitung, 313
Köhler-Formel, 243
Körper
schwarzer, 102

Ladungsdichte, 23
der Tracer, 104
Lagrange-Formalismus, 18
Lagrange-Funktion, 21
Lagrange-Gleichung
1. Art, 19
2. Art, 21
Laguerre'sche Differenzialgleichung, 54
Laguerre-Polynom, 54, 330
Lamb-Transformation, 307, 311
GREAT-Koordinaten, 366
laminare Strömung, 225
laminare Unterschicht, 227
Landéfaktor, 63
Langwellennäherung, 72
Laplace-Gleichung, 211
Laplace-Operator, 302
horizontaler, 302
Kugelkoordinaten, 310
latente Wärme, 147
Layer, 271
LCL, 215, 218
Leapfrog-Verfahren, 252
Legendre'sche Differenzialgleichung, 319
Legendre-Funktion
assoziierte, 326
Legendre-Polynom, 319
Legendre-Polynome
Normierung, 322
Orthogonalität, 322
Lehrsatz
binomischer, 289
Leistungsspektrum, 318
Leiteroperator, 47
Level, 271
level of free convection, 219
Levi-Civita-Symbol, 289
LFC, 219
lifted condensation level (LCL), 215, 218
Limiter, 281
lineare Balancegleichung, 173
lineare Instabilität, 251
lineare Unabhängigkeit, 261
lineares Gleichungssystem, 277, 279
Linearisierung
der Flachwassergleichungen, 120
Wellengleichung, 179
Literatur, 9
Logarithmusfunktion
natürliche, 291
Longitudinalwelle, 179
Lorentz-Kraft, 23
Lorentz-Transformation, 28
Lorenz-Eichung, 24
Luft, 103
feuchte, 103, 134
trockene, 103

magnetische Flussdichte, 104
Magnetquantenzahl, 59
Makrozustand, 75, 105
Masse
molare
fiktive, 133
Massendiffusion
horizontale, 281
vertikale, 281
Massenstromdichte, 104
Massenzahl, 49
Mastergleichung, 76
materielle Ableitung, 301, 314
Kugelkoordinaten, 313
Matrix, 297
adjungierte, 42
inverse, 42
quadratische, 298
unitäre, 42
maximale Wolkenobergrenze, 219
Maxwell'scher Verschiebungsstrom, 24
Maxwell-Gleichung, 23, 104
Maxwell-Gleichungen
Eichinvarianz, 24
Maxwell-Relation, 84
Maxwell-Verteilung, 91
Mechanik
klassische, 15
mechanische Oberflächenspannung, 97
mehrdimensionale Ableitung, 301
mehrdimensionale Integralrechnung, 315
Mehrteilchensystem, 73
Meso$-\alpha-$Skala, 9, 221
Meso$-\beta-$Skala, 9
Meso$-\gamma-$Skala, 9
Mesoskala, 9, 221
metrische terme, 117
metrischer Tensor, 272, 309
mikrokanonische Zustandssumme, 77
mikrokanonisches Ensemble, 77
Mikroskala, 9
mikroskopische Dichte, 104
mikroskopische Feuchte, 105
Mikrozustand, 74, 105
mimetische Eigenschaft
einer Diskretisierung, 276
Mischungsverhältnis, 89
Mischungsweg, 226
Mittel
gewichtetes
allgemeines, 231
gleitendes, 230
Mittelungsoperator
konkreter, 230
mittlere Breiten, 221

mittlere Stoßzeit, 93
mittlerer Druck, 114
Mode
    geostrophische, 205
    globale, 189
    vertikale, 193
model output statistics, 281
Modell
    Drehimpulserhaltung, 280
    EPV-Advektion, 280
    Impulserhaltung, 280
    obere Randbedingung, 280
    Rotationsfeld, 273
    Skalarfeld, 273
    untere Randbedingung, 280
    Vektorfeld, 273
Modellgitter
    Erweiterung
        vertikale, 271
    Generierung auf der Einheitskugel, 271
    vertikale Erweiterung, 271
molare Masse
    fiktive, 133
molekulare Skala, 9
Molekülspektrum, 74
Montgomery-Potential, 123
Multinomialkoeffizient, 289
Multischrittverfahren, 276

Nabla-Operator
    horizontaler, 302
natürliche Logarithmusfunktion, 291
Navier-Stokes-Gleichung, 103, 104
Newton'sche Gravitationskonstante, 156
Newton'sches Axiom
    Zusatz, 15
    Zweites, 15, 139
        der Rotation, 17
Newton'sches Fluid, 114
Newton'sches Gravitationsgesetz, 338
Normierung
    Legendre-Polynome, 322
Numerik, 9, 247
    Grundkonzepte, 247

obere Randbedingung
    im Modell, 280
Oberflächenschicht, 227
Oberflächenspannung, 97
    mechanische, 97
Obliquität, 10
Observable
    vollständige, 49
Operator, 298
    Hermite'scher, 43
    statistischer, 75
Operatoren
    kommutierende, 46
Optik
    atmosphärische, 241
Orbital, 56
Orographie, 140
orographie, 123
orographische Koordinate, 123, 124
orographischer β–Effekt, 171
orthogonale Funktionensysteme, 317
Orthogonalität
    eines Gitters, 249
    eines Koordinatensystems, 307
    Legendre-Polynome, 322
Oszillator
    harmonischer, 38
overshooting top, 219
Ozeanzirkulation, 235

p-System, 121, 142, 175, 176
Parallelisierung, 249
Parametrisierung, 226, 269
    der Reibung durch Stommel, 236
    Diffusion
        skalare, 231
    Herleitung, 231
    Phasenübergangsrate, 232
    skalare Diffusion, 231
Parseval-Identität, 319
partielle Integration, 140, 295
Pauli-Gleichung, 63
Pauli-Matrix, 62
Pauli-Prinzip, 74
Permutation, 288
    gerade, 288
    ungerade, 288
    Vorzeichen, 288
Permutationsoperator, 73
Phasengeschwindigkeit
    barokline Schwerewelle, 205, 206
Phasenraum, 22
Phasenspektrum, 318
Phasenübergang, 148
    Zweiter, 104
Phasenübergangsrate
    Parametrisierung, 232
Phasenübergangswärme, 148
Photonengas, 99
Physik
    statistische, 74, 105, 113
plan-parallele Atmosphäre, 241
Planck'sches Strahlungsgesetz, 101
Planck'sches Wirkungsquantum, 33
planetare Vorticity, 164
planetrische Grenzschicht, 226
Poincaré-Welle, 183, 201
Poisson-Gleichung, 163
Poisson-Klammer, 22, 143
Polarkreis, 221
Polynom, 291
Potential, 18
    chemisches, 82
    großkanonisches, 83
    skalares, 24
    thermodynamisches, 82
Potentialstufe, 36
Potentialtopf, 35
potentielle Energie, 140
    konvektiv verfügbare, 218, 219
    verfügbare, 140
potentielle Temperatur, 127, 129, 143
    Wasserdampf, 134
potentielle Vorticitiy, 222
potentielle Vorticity, 174, 175
Powerspektrum, 318
Poynting-Theorem, 27
    Meteorologie, 137
Prandtl-Frequenz, 215
Prandtl-Schicht, 227, 228

primitive, nonhydrostatic equations (PNEs), 249
Produkt
  von Kugelflächenfunktionen, 334
Produktwellenfunktion, 37
prognostische Gleichung
  Druck, 129
prognostische Variable, 273
Prozess
  quasistatischer, 78
pseudopotentielle Temperatur, 218
PV-Denken, 222

quadratische Matrix, 298
Quantenmechanik, 33
quantenmechanischer Drehimpuls, 56
Quasi-Uniformität
  eines Gitters, 249
Quasigeostrophie, 194, 221
quasigeostrophische potentielle Vorticity, 196
quasigeostrophische Vorticitygleichung, 196
quasigeostrophisches Zweischichtmodell, 197
quasistationärer Zustand, 104
quasistatische Zunstandsänderung, 113
quasistatischer Prozess, 78

radiale Schrödinger-Gleichung, 52
Randbedingung, 116, 151, 237
  dynamische, 117, 209, 210
  kinematische, 117, 138, 209, 210
  obere
    im Modell, 280
  untere
    im Modell, 280
Rapidität, 30
rationale Funktion, 291
Rauhigkeitslänge, 227
Raumzeit, 28
Reaktion
  chemische, 74
Rechenregel
  Differenzialoperator, 304
Reibung, 115
  Boden, 117
  kinetische Energie, 115
  Stokes'sche, 243
Reibungsgeschwindigkeit, 227
Reibungswind, 161
Reihe, 287
  geometrische, 288
reiner Zustand, 76
relative Feuchte, 89
relative Vorticity, 164
Relativistik
  H-Atom, 73
Relativitätstheorie
  Spezielle, 28
Residuensatz, 297
reversibel, 138
reversibel-pseudopotentielle Temperatur, 218
reversible Feuchtadiabate, 215
Reynolds-Mittelung, 225
Reynolds-Operator, 225
Reynolds-Zahl, 117
rheonome Zwangsbedingung, 18
Richardson-Zahl, 215
Richtungsdivergenz, 171
Rodrigues-Formel, 317
Rossby-Parameter, 159
Rossby-Welle, 190
  barokline, 194
  barotrope, 190
Rossby-Zahl, 157
Rotationsellipsoid, 337, 338
Rotationsfeld, 273
Rotationstensor, 113
ruhende Koordinaten, 140, 335
Runge-Kutta-Verfahren, 253
  dritter Ordnung, 276

Sackur-Tetrode-Gleichung, 87
Satz
  Gauß'scher, 156
Satz von Clairaut, 354
Satz von Gauß, 23, 315
Satz von Stokes, 23, 165, 166
Schallgeschwindigkeit, 202
Schallwelle, 180, 203
Scheinkraft, 111
Scherungsvorticity, 165
Schichtung
  diskrete
    Kelvin-Helmholtz-Instabilität, 208
  kontinuierliche
    Kelvin-Helmholtz-Instabilität, 212
Schichtungswelle, 191, 219
Schließungsproblem, 226
Schranke
  konvektive, 219
Schrödinger-Gleichung, 33, 51
  freies Teilchen, 34
  harmonischer Oszillator, 38
  Potentialstufe, 36
  Potentialtopf, 35
  radiale, 52
  stationäre, 34, 38
schwarzer Körper, 102
Schwerefeld der Erde, 337
  ellipsoidische Approximation, 338
Schwerewelle
  barokline, 201
    Gruppengeschwindigkeit, 205, 206
    Phasengeschwindigkeit, 205, 206
  Dispersionsrelation, 205
  hydrostatische
    Dispersionsrelation, 205
Schwerpunkt, 15
Selbstkonsistenz
  eines numerischen Verfahrens, 247
Semigeostrophie, 222
senkrechte Trajektorie, 356
SGA (spherical geopotential approximation), 273
shallow atmosphere, 117, 118, 273
shallow-atmosphere-Approximation, 315
SI-System, 9, 287
Skala
  große, 9
  Meso$-\alpha-$Skala, 9, 221
  Meso$-\beta-$Skala, 9
  Meso$-\gamma-$Skala, 9
  Mesoskala, 9, 221
  Mikroskala, 9
  molekulare, 9
  synoptische, 9
skalare Diffusion
  Parametrisierung, 231
skalares Potential, 24

Skalarfeld, 262
horizontales, 271
im Modell, 273
Skalarprodukt
generalisierte Koordinaten, 308
Skalenanalyse, 9
Tropen, 223
Skalierbarkeit, 249
skleronome Zwangsbedingung, 18
Solenoidterm, 168
Spannungstensor, 113
spektrale Strahldichte, 104, 241
Spektrum, 317
Spezielle Relativitätstheorie, 28
spezifische Enthalpie, 130
spezifische Entropie, 125
spezifische Feuchte, 89, 109
spezifische kinetische Energie, 116, 137
spezifische Wärmekapazität, 80, 249
feuchter Luft, 134
spherical geopotential approximation (SGA), 273
sphärische Geometrie, 335
sphärisches Voronoi-Gitter, 337
Spin, 61, 62
Spin-Bahn-Kopplung, 66
Spin-down, 230
Spin-down-Zustand, 61
Spin-up-Zustand, 61
Spinmatrix, 62
Spinoperator, 62
Spinor, 62
Spinzustand, 61
Stabilitätsparameter, 126
statischer, 195
Stabilitätswellenzahl, 198
Standardatmosphäre, 135, 273
stationäre Schrödinger-Gleichung, 34, 38
statischer Stabilitätsparameter, 195
statistische Physik, 74, 105, 113
statistischer Operator, 75
Staubteufel, 161
Stefan-Boltzmann-Gesetz, 101
Stefan-Boltzmann-Konstante, 101
Steilheit, 179
Stirling-Formel, 296
Stokes'sche Reibung, 243
Stokes'scher Satz, 23, 165, 166
Stokes-Annahme, 114
Stokes-Drift, 182
Stommel-Modell, 236
Stoßzeit
mittlere, 93
Strahldichte, 28
spektrale, 104, 241
Strahlung, 27, 147
in Modellen, 283
Strahlungsenergie, 28
Strahlungsfluss, 28
Strahlungsflussdichte, 28, 283
Strahlungsgesetz
Kirchhoff'sches, 102
Planck'sches, 101
Strahlungsgröße, 27
Strahlungstransport, 149, 241
Strahlungstransportmodell, 283
Strahlungsübertragungsgleichung, 149, 150, 283
Stress, 112
stress, 113
Stress-Tensor, 112
Grenzfall
inkompressibler, 115
inkompressibler Grenzfall, 115
Streukoeffizient, 241
Streuquerschnitt, 102, 150
Stromdichte, 23
Stromfunktion, 163, 209
Strömung
laminare, 225
Störungstheorie, 63
zeitabhängige, 69
zeitunabhängige, 63
Sub-Poincaré-Welle, 181
Subgeostrohpie, 160
subgeostrophischer Wind, 160
Substitutionsregel, 295
Summe, 287
Summenformel
Gauß'sche, 287
Summenkonvention
Einstein'sche, 29
Supergeostrohpie, 160
supergeostrophischer Wind, 160
Sverdrup-Balance, 236, 237
Symmetrie
der Grundfunktionen, 292
der Wellenfunktion, 73
Synoptik, 117
der Extratropen, 221
synoptische Skala, 9
Synotpik, 117
Sättigungsfeuchte, 99

Taylor-Goldstein-Gleichung, 214
Teilchen
freies, 34
Teilchenzahloperator, 45, 47
Temperatur, 78, 103
potentielle, 127, 129, 143
pseudopotentielle, 218
reversibelpseudopotentielle, 218
virtuelle, 89
Temperaturadvektion
differenzielle, 222
Temperaturdiffusion
horizontale, 281
vertikale, 281
Temperaturgradient
feuchtadiabatischer, 217
trockenadiabatischer, 127, 215
Temperaturleitfähigkeit, 95
Temperaturzuschlag
virtueller, 89
Tendenz
des Geopotentials, 221
Tendenzgleichung, 197, 221
Tensor, 113
isotroper, 113
metrischer, 272, 309
Terme
metrische, 117
thermische Instabilität, 215
thermische Zustandsgleichung, 80, 249
thermischer Wind, 158
Thermodynamik

Erster Hauptsatz, 201, 249
in der Atmosphäre, 124
Thermodynamik
Erster Hauptsatz, 370
thermodynamisches Potential, 82
Thermodynmaik
Erster Hauptsatz, 249
thermohaline Zirkulation, 238
Tide, 235
Tiefwasserwelle, 182
Tornado, 161
totale Ableitung, 121, 301
totale potentielle Energie, 140
totale Zeitableitung, 23
Tracer, 103, 104
Tracerklasse, 103, 105
traditionelle Approximation, 118
Trajektorie
senkrechte, 356
Transversalwelle, 179
Trennung der Variablen, 295
trigonometrischen Funktionen, 292
Trockenadiabate, 127
trockenadiabatischer Temperaturgradient, 127, 215
trockene Luft, 103
Tropen, 221
Tropopausenhöhe, 219
Tunneleffekt, 36
Turbulenz, 117, 225
volle, 225
Turbulenzkorrelationstensor, 226
Turbulenzparametrisierung, 281
Turbulenzparametrisierungen, 269
Turbulenzspektrum, 232

Unabhängigkeit
lineare, 261
ungerade Permutation, 288
Uniformität
eines Gitters, 249
unitäre Matrix, 42
Unschärferelation, 48
untere Randbedingung
im Modell, 280
Unterschicht
laminare, 227

Variable
diagnostische, 273
prognostische, 273
Vektoranalysis, 301
Hauptsatz, 264
Vektorfeld
Divergenz, 301
Vektorfelder
im Modell, 273
Vektorpotential, 24
Vektorprodukt, 299
generalisierte Koordinaten, 308
Vektorraum, 297
verallgemeinerte Kraft, 21, 78
verbotener Übergang, 43
verfügbare potentielle Energie, 140
Vernichtungsoperator, 45, 47
Verschiebungsstrom, 24
vertikale Diffusion, 281
vertikale Erweiterung des Modellgitters, 271
vertikale Mode, 193
Vertikalkoordinate
generalisierte, 120, 156, 272
Funktionaldeterminante, 272
virtuelle Temperatur, 89
virtueller Temperaturzuschlag, 89
Viskosität
dynamische, 94, 113
kinematische, 115
volle Turbulenz, 225
vollständige Induktion, 288
vollständige Observable, 49
Volumen
einer Gitterboxen, 337
von Karman-Konstante, 227
von Neumann-Gleichung, 76
Voronoi-Gitter
ellipsoidisches, 366
sphärisches, 337
Vorticity, 163, 164, 264
planetare, 164
potentielle, 174, 175, 222
barotrope, 170
quasigeostrophische
potentielle, 196
relative, 164
Vorticitygleichung, 167
barotrope, 168, 206
p-System, 169
quasigeostrophische, 196
Vorzeichen einer Permutation, 288

Wasserdampf
potentielle Temperatur, 134
Wasserstoff, 49
Wassserstoff
Drehimpuls, 58
Welle, 177
barokline, 191
barotrope, 181
elektromagnetische, 25
evaneszente, 177
Flachwasser, 182
Inertialwelle, 185
Instabilität, 206
Kelvin-Welle, 186
Kinematik, 177
Poincaré-Welle, 183
Rossby-Welle
barokline, 194
barotrope, 190
Schichtungswelle, 191
Schwerewelle
barokline, 201
Sub-Poincaré, 181
Tiefwasser, 182
Wellenfunktion
Antisymmetrie, 73
Symmetrie, 73
Wellenhöhe, 179
Wellenlänge, 205
Wendekreis, 221
Wind
subgeostrophischer, 160
supergeostrophischer, 160
thermischer, 158
zyklostrophsicher, 161
windgetriebene Zirkulation, 235
Windsee, 238
Windvektor, 103

Wirbelsatz
Ertel'scher, 174
Wirkungsquerschnitt, 93
Wolkenmikrophysik, 243
Informationsverlust
deskriptiver, 105
Wolkenobergrenze
maximale, 219
Wärme, 78
latente, 147
Wärmedurchgangszahl, 149
Wärmefluss, 147
Wärmekapazität, 80, 133
spezifische, 80
sspezifsiche, 249
Wärmeleistungsdichte, 241
Wärmeleistungsdichten, 283
Wärmeleitung, 147, 148
Wärmeleitungsgleichung, 95
Wärmeübergang, 147, 148

Zahl
komplexe, 294
zeitabhängige Bernoulli-Gleichung, 171, 210
zeitabhängige Störungstheorie, 69
Zeitableitung
totale, 23
Zeitmittel
gleitendes, 230
Zeitschrittverfahren, 251
explizites, 275
Filter, 276
im dynamischen Kern, 275, 280
implizites, 275, 276
zeitunabhängige Störungstheorie, 63
Zerfall, 148
Zirkulation
thermohaline, 238
windgetriebene, 235
Zirkulationssatz, 166, 209
zonal gemittelte Gleichungen, 233
Zunstandsänderung
quasistatische, 113
Zusatz
zu den Newton'schen Axiomen, 15
Zustand, 40
atmosphärischer, 104
der Atmosphäre, 103
gemischter, 76
quasistationärer, 104
reiner, 76
Zustandsgleichung
kalorische, 80
idealer Gase, 87
thermische, 80, 249
Zustandsgleichung idealer Gase, 125
Entropieformulierung, 133
Zustandssumme
mikrokanonische, 77
Zwangsbedingung, 18
holonome, 18
rheonome, 18
skleronome, 18
Zweischichtmodell
quasigeostrophisches, 197
Zweiter Kontinuumsübergang, 103
Zweiter Phasenübergang, 104
Zweites Newton'sches Axiom, 15, 139
der Rotation, 17
Zyklogenese, 155, 197, 221, 223
Zyklostrophischer Wind, 161

Übergang
verbotener, 43
Übergang im H-Atom, 71
äquatoriale Kelvin-Welle, 188