

SEMINARARBEIT

Rahmenthema des Wissenschaftspropädeutischen Seminars:

Klima

Leitfach: Physik

Thema der Arbeit:

Die Strahlungsphysik des CO₂-
Treibhauseffekts

Verfasser/in: Christopher Mehnert

Kursleiter/in: Ulrich Steiner

Abgabetermin:

11. November 2025

Bewertung	Note	Notenstufe in Worten	Punkte		Punkte
Schriftliche Arbeit				x 3	
Abschlusspräsentation				x 1	
Summe:					
Gesamtleistung nach § 29 (6) GSO = Summe : 2 (gerundet)					

Datum und Unterschrift der Kursleiterin oder des Kursleiters

Erklärung:

Ich versichere, dass ich die vorgelegte Seminararbeit persönlich und unverfälscht verfasst, sämtliche hierfür zu Hilfe genommene gedruckte sowie digitale Quellen im Literaturverzeichnis angegeben und die aus diesen Quellen stammenden Zitate oder Belegstellen für sinngemäß wiedergegebene Inhalte in meiner Seminararbeit als solche kenntlich gemacht habe.

Die Seminararbeit ist in dieser oder einer ähnlichen Form in keinem anderen Kurs des diesjährigen oder eines vorhergehenden Abiturjahrgangs vorgelegt worden.

.....
Ort, Datum

.....
Unterschrift des/der Oberstufenschülers/in

S E M I N A R A R B E I T

Rahmenthema des Wissenschaftspropädeutischen Seminars:

Klima

Leitfach: Physik

Thema der Arbeit:

Die Strahlungsphysik des CO₂-Treibhauseffekts

Verfasser/in: Christopher Mehnert

Kursleiter/in: Ulrich Steiner

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	3
2	Physikalische Grundlagen der Wärmestrahlung	4
2.1	Grundbegriffe der elektromagnetischen Strahlung	4
2.2	Strahlungsgesetze	5
2.2.1	Das Plancksche Strahlungsgesetz	5
2.2.2	Das Stefan-Boltzmann Gesetz	6
2.2.3	Wiensches Verschiebungsgesetz	6
2.3	Strahlungsbilanz der Erde	7
3	Molekülphysik des CO₂	10
3.1	Grundlagen der molekularen Absorption	11
3.2	Molekülstruktur und Schwingungsmoden	11
3.3	Quantenmechanische Grundlagen der Absorption	13
3.3.1	Rotationsübergänge	13
3.3.2	Vibrationsübergänge	14
3.3.3	Kombinierte Übergänge	15
3.4	Das CO ₂ -Absorptionsspektrum	16
3.4.1	Das ν_3 -Vibrationsband von CO ₂	17
3.4.2	Das ν_2 -Vibrationsband von CO ₂	18
4	Der Treibhauseffekt	19
4.1	Mechanismus des Treibhauseffekts	20
4.2	Treibhausmodelle	20
4.2.1	Das einfache Treibhausmodell	20
4.2.2	Das undichte Treibhausmodell	22
4.2.3	Berechnung des Absorptionsgrads von CO ₂	23
5	Sättigungseffekte	23
6	Anhang	24
6.1	Abbildungsverzeichnis	24
6.2	Literaturverzeichnis	25
6.3	Daten und Tabellen	A
6.4	Formeln und Herleitungen	A
6.4.1	Herleitung des Wienschen Verschiebungsgesetzes	A
6.4.2	Herleitung der 3 Übergangsformeln	B
6.5	Herleitungen für das Treibhausmodell	C
6.6	Quellcode	D

1 Einleitung

Test

2 Physikalische Grundlagen der Wärmestrahlung

Um den Treibhauseffekt zu verstehen, ist es essenziell zu verstehen, wie die Erde den Großteil ihrer Energie erhält und wie die Erde ihre überschüssige Energie wieder abgibt. Der Energiehaushalt der Erde wird hauptsächlich durch Strahlungsprozesse bestimmt: Die Erde erhält Energie durch Strahlung der Sonne und strahlt selber wieder Energie in den Weltraum [12, S. 9–11]. Im folgenden Kapitel betrachten wir diese Strahlungsprozesse im Detail, um die Grundlage des Treibhauseffekts zu verstehen.

2.1 Grundbegriffe der elektromagnetischen Strahlung

Wärmestrahlung bezeichnet die elektromagnetische Strahlung, die von Materie aufgrund ihrer thermischen Energie emittiert wird. Elektromagnetische Strahlung ist eine Form der Energieübertragung, die sich im Raum ausbreitet und entweder als elektromagnetische Wellen (wie von der elektromagnetischen Wellentheorie beschrieben; [13]) oder als masselose Energiequanten, sogenannte *Photonen* (wie von der Quantenmechanik beschrieben; [4]), aufgefasst werden kann. Keine der beiden Sichtweisen können alle beobachteten Strahlungsphänomene vollständig beschreiben, weshalb beide Konzepte komplementär verwendet werden. [14, S. 1–2]

Elektromagnetische Strahlung bewegt sich mit der *Lichtgeschwindigkeit* $c = c_0/n$ wobei $c_0 = 2.998 \times 10^8 \text{ m s}^{-1}$ die Lichtgeschwindigkeit im Vakuum ist und n der Brechungsindex des Mediums ist. Da die in dieser Arbeit betrachteten Strahlungsprozesse hauptsächlich im Vakuum ($n \equiv 1$) oder in Luft ($n \approx 1.0002$) stattfinden, wird im Folgenden die Näherung $n = 1$ und somit $c = c_0$ verwendet. [14, S. 3]

Elektromagnetische Wellen werden durch folgende Eigenschaften charakterisiert:

Eigenschaft	Beschreibung und Einheit
Frequenz, ν	Anzahl der Schwingungen pro Zeiteinheit, [Hz] = [s ⁻¹]
Wellenlänge, λ	Abstand zwischen zwei Wellenmaxima, [μm] oder [nm]
Wellenzahl, η	Anzahl der Wellen pro Längeneinheit, [cm ⁻¹]

Tabelle 2.1: Charakteristische Eigenschaften elektromagnetischer Wellen [14, S. 4].

$$\nu = \frac{c_0}{\lambda} = c_0 \eta \quad [14, \text{S. } 4] \quad (2.1)$$

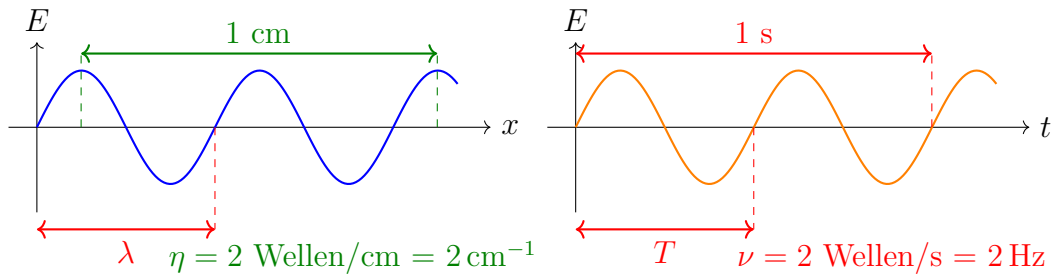


Abbildung 2.1: Visualisierung charakteristischer Eigenschaften elektromagnetischer Wellen. Links: Räumliche Darstellung zeigt die Wellenlänge λ und die Wellenzahl η . Rechts: Zeitliche Darstellung zeigt die Periode T und die Frequenz ν .

2.2 Strahlungsgesetze

Jedes Medium emittiert elektromagnetische Strahlung zufällig in alle Richtungen. Die Intensität dieser Emission hängt sowohl von der Temperatur als auch von den Materialeigenschaften des Mediums ab. Der von einer Oberfläche abgegebene Strahlungswärmestrom wird als *spezifische Ausstrahlung* bezeichnet.

Dabei wird zwischen der *gesamten spezifischen Ausstrahlung* E und der *spektralen spezifischen Ausstrahlung* E_ν unterschieden:

$E_\nu \equiv$ abgestrahlte Energie pro Zeit, Oberfläche und Frequenz.

$E \equiv$ abgestrahlte Energie pro Zeit und Oberfläche.

[14, S. 6–7]

2.2.1 Das Plancksche Strahlungsgesetz

Die spektrale spezifische Ausstrahlung eines ideal schwarzen Körpers $E_{b\nu}$ wird durch das Plancksche Strahlungsgesetz beschrieben. Es gibt an, wie viel Energie pro Zeit, Fläche und Frequenzintervall von einer ideal schwarzen Oberfläche bei einer bestimmten Temperatur T emittiert wird. Dieses Gesetz wurde 1900 von Max Planck [15] hergeleitet und ist heute als *Plancksches Strahlungsgesetz* bekannt. Für eine schwarze Oberfläche ergibt sich die spektrale spezifische Ausstrahlung [14, S. 7] zu:

$$E_{b\nu}(T, \nu) = \frac{2\pi h \nu^3}{c_0^2} \cdot \frac{1}{e^{h\nu/kT} - 1} \quad (2.2)$$

Das Plancksche Strahlungsgesetz lässt sich auch in Abhängigkeit von der Wellenlänge λ formulieren:

$$E_{b\lambda}(T, \lambda) = \frac{2\pi hc_0^2}{\lambda^5} \cdot \frac{1}{e^{hc_0/\lambda kT} - 1} \quad (2.3)$$

Dabei bezeichnet $h = 6.626 \times 10^{-34}$ J s das Plancksche Wirkungsquantum, $c_0 = 2.998 \times 10^8$ m s⁻¹ die Lichtgeschwindigkeit im Vakuum und $k = 1.381 \times 10^{-23}$ J K⁻¹ die Boltzmann-Konstante [19].

2.2.2 Das Stefan-Boltzmann Gesetz

Die Integration der spektralen spezifischen Ausstrahlung über das gesamte elektromagnetische Spektrum liefert die *Gesamtausstrahlung* E :

$$E = \int_0^\infty E_\nu d\nu \quad (2.4)$$

[3]

Für einen idealen schwarzen Körper setzen wir $E_{b\nu}$ aus Gleichung (2.2) in das Integral ein:

$$E_b(T) = \int_0^\infty \frac{2\pi h \nu^3}{c_0^2} \cdot \frac{1}{e^{h\nu/kT} - 1} d\nu$$

Die Auswertung dieses Integrals erfordert komplexe Integrationstechniken und ist in Integraltabellen dokumentiert [14, S. 13]. Das Ergebnis ist das *Stefan-Boltzmann Gesetz*:

$$E_b(T) = \frac{2\pi^5 k^4}{15c_0^2 h^3} T^4 = \sigma T^4 \quad [3] \quad (2.5)$$

Dabei bezeichnet $\sigma = 5.670 \times 10^{-8}$ W m⁻² K⁻⁴ die Stefan-Boltzmann Konstante [19].

2.2.3 Wiensches Verschiebungsgesetz

Die Wellenlänge λ_{max} , bei welcher die spektrale spezifische Ausstrahlung eines idealen schwarzen Körpers $E_{b\lambda}$ mit der Temperatur T ein Maximum erreicht, erhält man durch Ableitung der Gleichung (2.3) nach λ und Nullsetzen dieser Ableitung (die vollständige Herleitung befindet sich in Unterunterabschnitt 6.4.1). Das daraus resultierende *Wiensche Verschiebungsgesetz* besagt, dass sich das Maximum der spektralen Ausstrahlung mit steigender Temperatur zu kürzeren Wellenlängen verschiebt [10, S. 101], wobei die Konstante $b = 2.8978 \times 10^{-3}$ m K als *Wiensche Verschiebungskonstante* bezeichnet wird [19, S. 49]:

$$\lambda_{max} = \frac{b}{T} \quad (2.6)$$

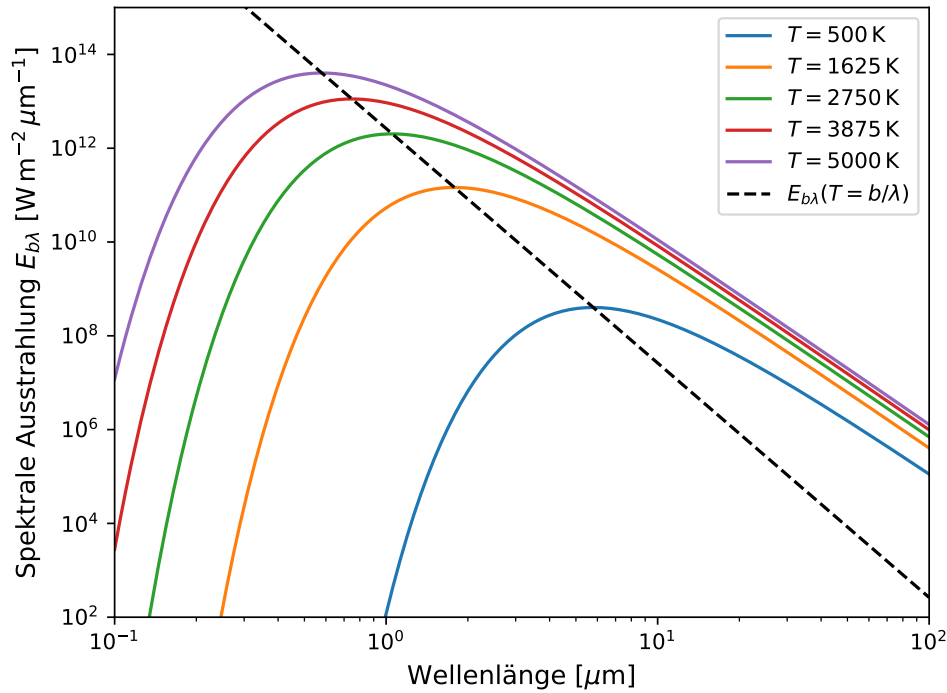


Abbildung 2.2: Spektrale spezifische Ausstrahlung $E_{b\lambda}$ eines schwarzen Körpers nach dem Planckschen Strahlungsgesetz für verschiedene Temperaturen. Die gestrichelte Linie verbindet die Maxima der Planck-Kurven und verdeutlicht das Wiensche Verschiebungsgesetz. Grafik wurde mithilfe von [16] erstellt, der Code ist im Anhang 6.3 dokumentiert.

2.3 Strahlungsbilanz der Erde

Die Erde bezieht nahezu ihre gesamte Energie von der Sonne. Um ein thermisches Gleichgewicht aufrechtzuerhalten, muss sie Energie mit derselben Rate wieder abstrahlen, mit der sie diese empfängt[12, S. 9]:

$$P_{\text{in}} = P_{\text{out}} \quad (2.7)$$

Die einfallende solare Bestrahlungsstärke am oberen Rand der Atmosphäre, die sogenannte *Solarkonstante*, beträgt $S_0 = 1361 \text{ W m}^{-2}$ [9, S. 5–6]. Da die Querschnittsfläche der Erde, welche die solare Strahlung abfängt, πr^2 beträgt[12, S. 11], wobei $r = 6.371 \times 10^6 \text{ m}$ [17, S. 56] der Erdradius ist, ergibt sich für die einfallende Strahlungsleistung:

$$\begin{aligned} P_{\text{solar}} &= S_0 \pi r^2 \\ &= 1.735 \times 10^{17} \text{ W} \end{aligned} \quad (2.8)$$

Jedoch wird nicht die gesamte Strahlung von der Erde absorbiert, da ein Teil reflektiert wird. Der Anteil der reflektierten Strahlung wird als *Albedo* α bezeichnet. Abbildung 2.3 zeigt, dass α von der reflektierenden Oberfläche abhängt (detaillierte Werte für ver-

schiedene Oberflächen siehe Anhang Tabelle 6.1). Im globalen Mittel wird ein Anteil von $\alpha_p \simeq 0,30$ der eingehenden Strahlung reflektiert. Diese Größe wird als *planetare Albedo* bezeichnet[12, S. 11].

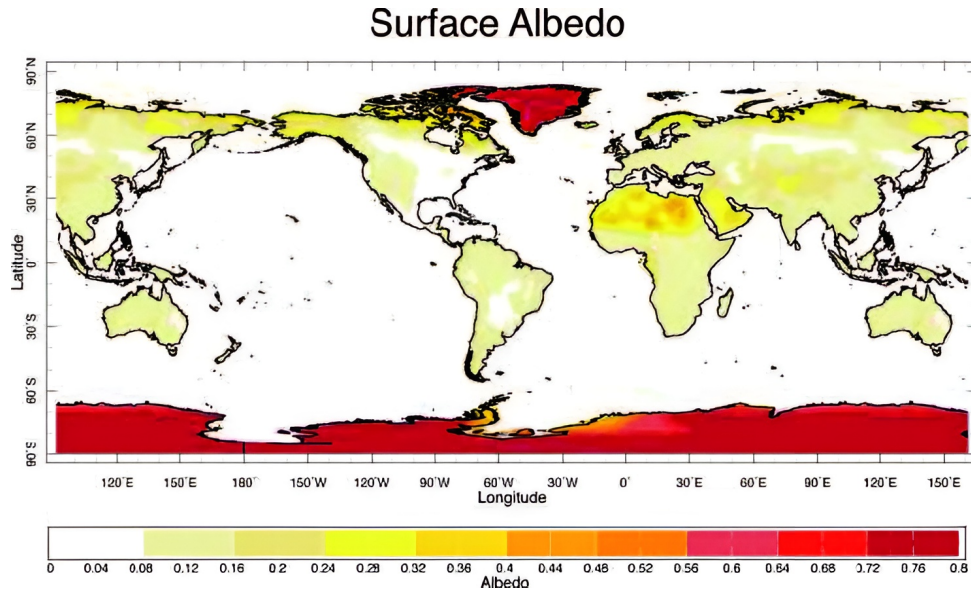


Abbildung 2.3: Räumliche Verteilung der Albedo an der Erdoberfläche[12, S. 12].

Daraus folgt für die von der Erde absorbierte Strahlungsleistung:

$$\begin{aligned} P_{\text{in}} &= (1 - \alpha_p) S_0 \pi r^2 \\ &= 1.215 \times 10^{17} \text{ W} \end{aligned} \quad (2.9)$$

Wegen des Energiegleichgewichts muss die von der Erde emittierte Strahlung die absorbierte Strahlung kompensieren. Dazu kann man annehmen, dass sich die Erde wie ein idealer schwarzer Körper mit gleichmäßiger Temperatur T_e verhält (bekannt als *effektive planetare Temperatur*) und dass das *Stefan-Boltzmann-Gesetz* wie in Unterunterabschnitt 2.2.2 anwendbar ist.

Gleichung 2.5 gibt die Gesamtausstrahlung $E_b(T)$ an, welche die ausgestrahlte Leistung pro Einheit der Oberfläche beschreibt: $E_b = \frac{P}{A}$ [3]. Die Erde strahlt über ihre gesamte Oberfläche $A = 4\pi r^2$ ab. Umgestellt nach der Strahlungsleistung ergibt sich[12, S. 11]:

$$P_{\text{out}} = \sigma \cdot 4\pi r^2 \cdot T_e^4 \quad (2.10)$$

Durch Einsetzen von Gleichung 2.9 und Gleichung 2.10 in Gleichung 2.7 und Umstellen nach T_e erhält man:

$$T_e = \left(\frac{S_0(1 - \alpha_p)}{4\sigma} \right)^{1/4} \quad (2.11)$$

Mit den Werten $S_0 = 1361 \text{ W m}^{-2}$, $\alpha_p = 0,30$ und $\sigma = 5.670 \times 10^{-8} \text{ W m}^{-2} \text{ K}^{-4}$ ergibt sich:

$$\begin{aligned} T_e &= \left(\frac{1361 \text{ W m}^{-2} \cdot (1 - 0,30)}{4 \cdot 5.670 \times 10^{-8} \text{ W m}^{-2} \text{ K}^{-4}} \right)^{1/4} \\ &= 254.6 \text{ K} \end{aligned} \quad (2.12)$$

Diese Temperatur von etwa -18°C liegt deutlich unter der gemessenen globalen Mitteltemperatur der Erdoberfläche von circa 288 K [12, S. 11]. Die Differenz von etwa 33 K wird durch den natürlichen Treibhauseffekt der Atmosphäre verursacht. Lacis et al. (2010) schlussfolgern: „In round numbers, water vapor accounts for about 50% of Earth’s greenhouse effect, with clouds contributing 25%, CO₂ 20%, and the minor GHGs and aerosols accounting for the remaining 5%.“[11], was zunächst vermuten lässt, dass CO₂ nicht die bedeutendste Rolle im Treibhauseffekt spielt. Jedoch bilden die nicht kondensierenden Treibhausgase CO₂, O₃, N₂O und CH₄ die Grundlage des Treibhauseffekts, da sie im Gegensatz zu Wasserdampf nicht durch Niederschlag aus der Atmosphäre entfernt werden. Wasserdampf und Wolken (zusammen 75%) wirken als schnelle Rückkopplungsmechanismen, deren Konzentration von der Temperatur und damit von den nicht kondensierenden Treibhausgasen abhängt[11].

Die Anwendung des Wienschen Verschiebungsgesetzes (Gleichung 2.6) auf Sonne ($T_{\text{Sonne}} = 5772 \text{ K}$ [9, S. 6]) und Erde ($T_{\text{Erde}} = 288 \text{ K}$ [12, S. 11]) verdeutlicht die fundamentale spektrale Asymmetrie zwischen solarer und terrestrischer Strahlung. Während die solare Strahlung ihr Maximum bei $\lambda_{\text{Sonne,max}} = 0.50 \mu\text{m}$ hat, liegt das Maximum der terrestrischen Strahlung bei $\lambda_{\text{Erde,max}} = 10.06 \mu\text{m}$ (visualisiert in Abbildung 2.4).

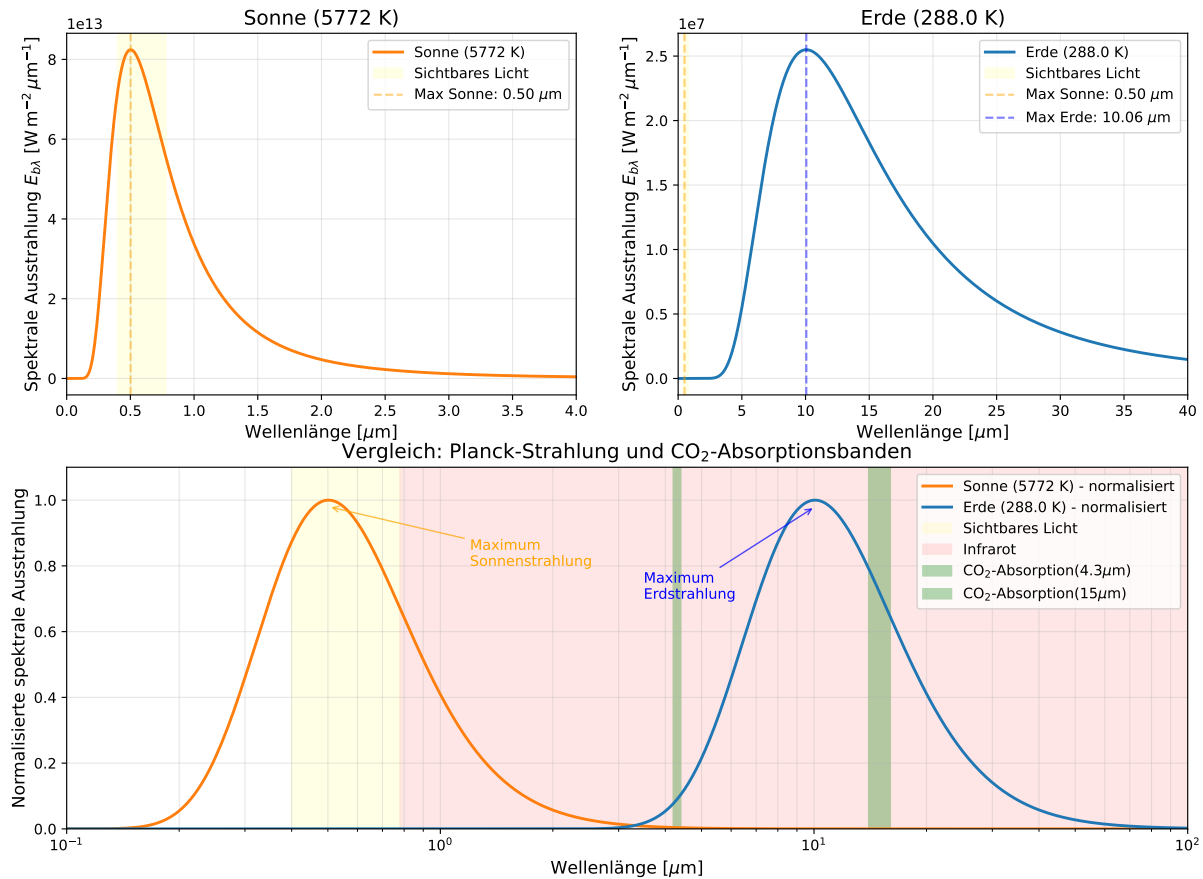


Abbildung 2.4: Vergleich der spektralen spezifischen Ausstrahlung von Sonne und Erde nach dem Planckschen Strahlungsgesetz mit den Absorptionsbanden von CO₂. Grafik erstellt mit [16], Code dokumentiert in Anhang 6.4.

Die in diesem Kapitel dargestellten Strahlungsgesetze bilden das Fundament für das Verständnis des Treibhauseffekts. Die Analyse der Strahlungsbilanz zeigt, dass die berechnete effektive planetare Temperatur deutlich unter der gemessenen globalen Mitteltemperatur liegt [12, S. 11]. Diese Differenz resultiert aus dem natürlichen Treibhauseffekt, dessen zentraler Mechanismus die wellenlängenselektive Absorption durch Treibhausgase wie CO₂ ist, wie man schon in Abbildung 2.4 erkennen kann. Die molekularen Grundlagen der CO₂-Absorption werden im folgenden Kapitel untersucht.

3 Molekülphysik des CO₂

Bei Betrachtung der Abbildung 2.4 stellt sich die fundamentale Frage: *Warum absorbiert CO₂ gerade bei diesen spezifischen Wellenlängen?* Die Antwort liegt in der quantenmechanischen Wechselwirkung elektromagnetischer Strahlung mit dem CO₂-Molekül, einem Phänomen von erheblicher Komplexität. Im Rahmen dieser Arbeit wird der Fokus auf die für den Treibhauseffekt relevanten Absorptionsprozesse von CO₂ gelegt, wobei die quantenmechanischen Grundlagen zur besseren Verständlichkeit teilweise vereinfacht

dargestellt werden, ohne die vollständige molekülphysikalische Theorie zu behandeln.

Für praktische Berechnungen atmosphärischer Strahlungstransfers stehen umfassende spektroskopische Datenbanken zur Verfügung. Die HITRAN-Datenbank [5][8] enthält hochaufgelöste Absorptionslinien für über 50 atmosphärische Moleküle und bildet den Standard für quantitative Analysen. Die folgenden Abschnitte erläutern die physikalischen Grundlagen dieser Absorptionsprozesse, ohne die vollständige quantenmechanische Behandlung zu vertiefen.

3.1 Grundlagen der molekularen Absorption

Ein Photon, das auf ein Gasmolekül trifft, kann entweder absorbiert oder gestreut werden. Der Effekt der Streuung ist für unsere Betrachtung jedoch von untergeordneter Bedeutung, weshalb der Fokus auf der Absorption liegt. Wird ein Photon absorbiert, führt dies dazu, dass das Energieniveau des Moleküls angehoben wird. Umgekehrt kann ein Molekül sein Energieniveau senken, indem es ein Photon emittiert. Die Gesamtenergie eines Moleküls setzt sich dabei aus verschiedenen Beiträgen zusammen: der elektronischen Energie, die durch die Verteilung der Elektronen in den Molekülorbitalen bestimmt wird, der Rotationsenergie, die aus der Drehbewegung des gesamten Moleküls um seine Trägheitsachsen resultiert, sowie der Schwingungsenergie, die durch die periodischen Relativbewegungen der Atomkerne gegeneinander entsteht [14, S. 286–287, S. 292].

Für die Wechselwirkung eines Moleküls mit elektromagnetischer Strahlung im Infrarotbereich ist ein zeitlich veränderliches Dipolmoment fundamental. Dies bedeutet, dass sich die Ladungsverteilung des Moleküls während der Rotation oder Schwingung periodisch ändern muss, wodurch ein oszillierendes elektrisches Dipolmoment entsteht [2, S. 273].

Nach den Grundsätzen der Quantenmechanik können die Energieniveaus für molekulare Elektronenorbitale, ebenso wie die Energieniveaus für molekulare Rotation und Vibration, nur bestimmte diskrete Werte annehmen. Ein Photon kann nur dann absorbiert werden, wenn seine Energie $E = h\nu$ exakt der Energiedifferenz zwischen zwei erlaubten Zuständen entspricht (Resonanzbedingung). Daher können nur Photonen mit ganz bestimmten Frequenzen absorbiert oder emittiert werden, was zu charakteristischen Spektrallinien führt [14, S. 287].

3.2 Molekülstruktur und Schwingungsmoden

Wir haben bereits die drei möglichen Arten der Energieniveaus eines Moleküls kennengelernt. Jedoch ist die Energie, welche nötig ist, um elektronische Übergänge zu bewirken, so groß, dass man elektromagnetische Strahlung mit sehr niedriger Wellenlänge benötigt (zwischen 0.01 μm und 1.5 μm)[14, S. 287]. Da sich diese Arbeit auf CO₂ konzentriert und

dieses keine für uns relevanten Absorptionsbanden im Bereich unter 1.5 μm besitzt (siehe Abbildung 3.1), werden wir diese Energieänderungen vernachlässigen.

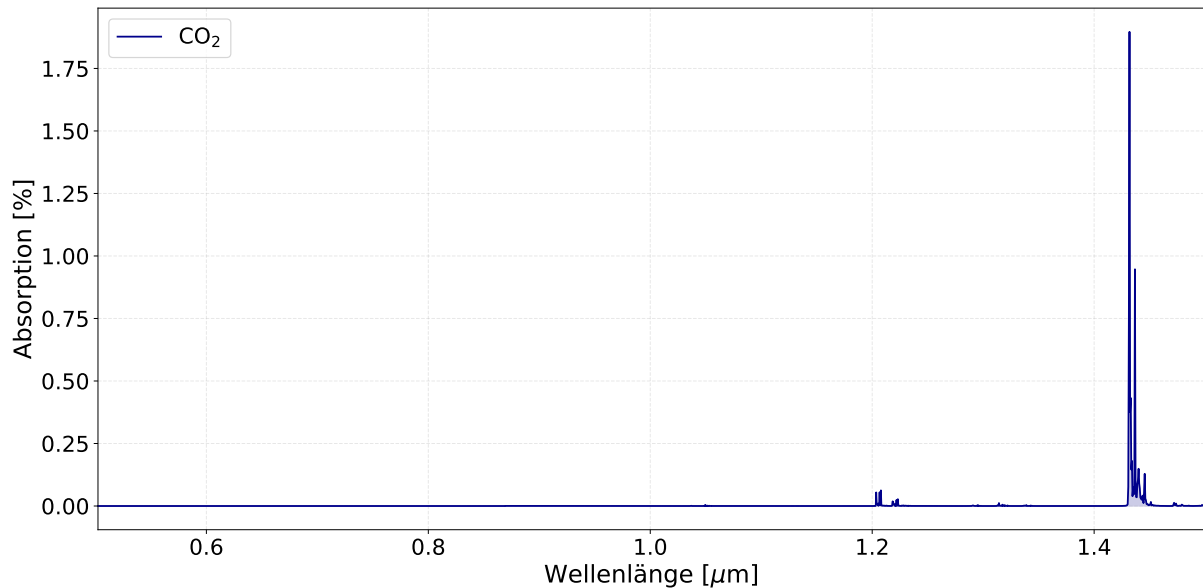


Abbildung 3.1: Absorptionsspektrum von CO₂ unter 1.5 μm . Das einzige erkennbare Absorptionsband bei circa 1.435 μm ist nur knapp über 1.75% Absorption. Daten kommen von der HITRAN Datenbank [8], Grafik wurde mithilfe von [16] erstellt, der Code ist im Anhang 6.6 dokumentiert.

Vibrationsübergänge erfordern deutlich weniger Energie, weshalb die zugehörigen Spektrallinien typischerweise zwischen 1.5 μm und 10 μm auftreten. Rotationsübergänge benötigen die geringste Energie und erscheinen daher bei Wellenlängen oberhalb von 10 μm . In der Praxis werden Vibrationsübergänge jedoch fast immer von simultanen Rotationsübergängen begleitet. Daraus resultieren eng benachbarte Spektrallinien, die teilweise überlappen und die sogenannten *Vibrations-Rotations-Bänder* im Infrarotspektrum formen, die im Fokus dieser Arbeit stehen. Diese entstehen durch die *Freiheitsgrade* eines Moleküls. Jedes Molekül bewegt sich im dreidimensionalen Raum, weshalb jedes Molekül drei translatorische Freiheitsgrade für die x-, y- und z-Richtung besitzt. Da jedes Atom eines Moleküls sich theoretisch im dreidimensionalen Raum bewegen kann, beträgt die Gesamtzahl der Freiheitsgrade eines Moleküls mit N Atomen $3N$. Da die Atome im Molekül miteinander verbunden sind, können sie sich nicht unabhängig voneinander bewegen, sondern nur relativ zueinander. Diese Bewegungen entsprechen den Vibrations- und Rotations-Freiheitsgraden. Die Anzahl dieser inneren Freiheitsgrade beträgt $3N - 3$, also die Gesamtzahl der Freiheitsgrade minus die drei translatorischen Freiheitsgrade. Je nachdem, ob das Molekül linear oder nichtlinear ist, werden diese inneren Freiheitsgrade unterschiedlich auf Rotations- und Vibrations-Freiheitsgrade aufgeteilt (siehe Abbildung 3.2). Für lineare Moleküle gibt es zwei Rotations-Freiheitsgrade. Für CO₂ ergeben sich daher $3 \cdot 3 - 3 - 2 = 4$ Vibrations-Freiheitsgrade [14, S. 292–293].

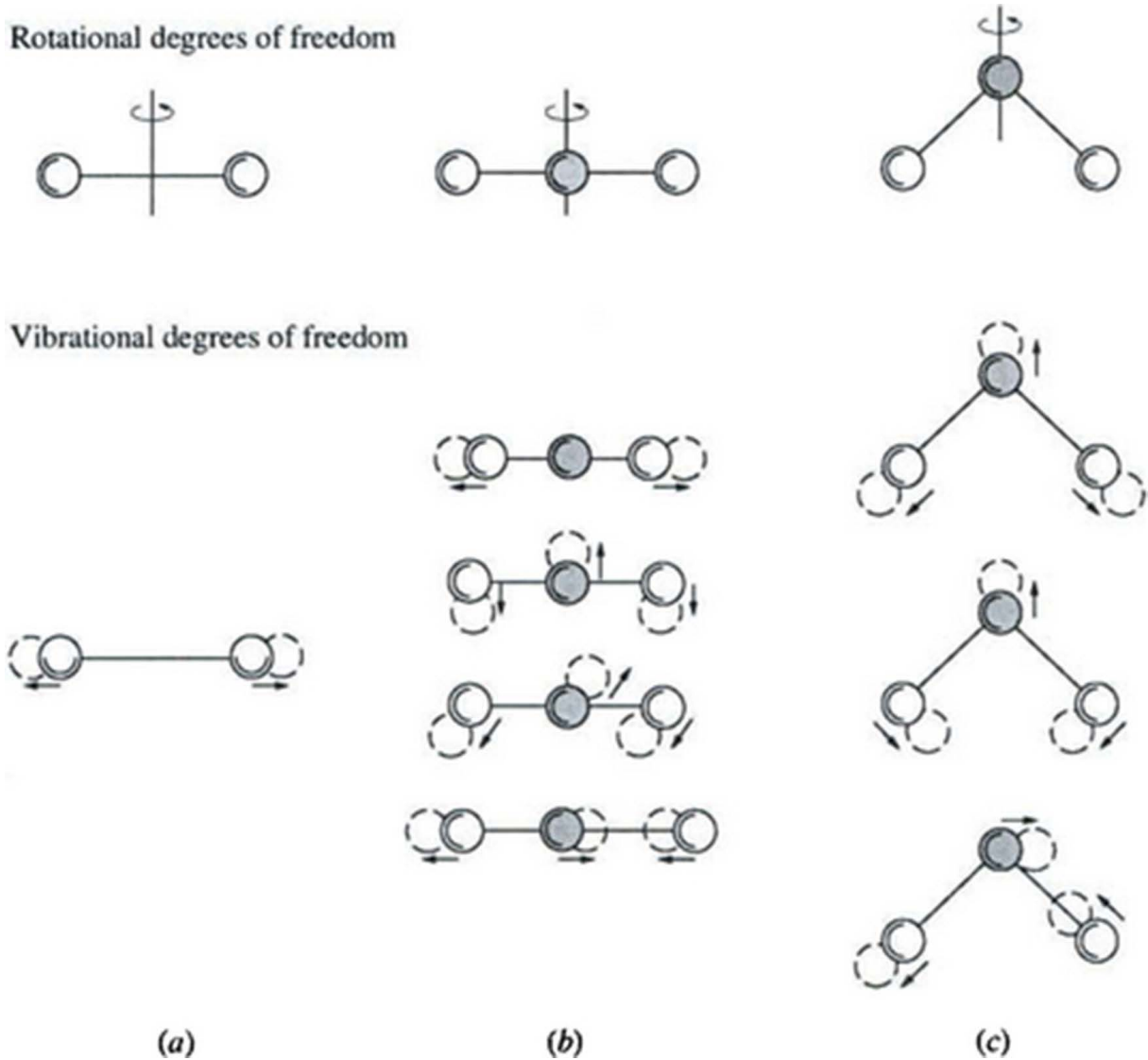


Abbildung 3.2: Rotations- und Vibrations-Freiheitsgrade für (a) zweiatomige, (b) linear dreiatomige und (c) nichtlineare dreiatomige Moleküle. [14, S. 293]

3.3 Quantenmechanische Grundlagen der Absorption

3.3.1 Rotationsübergänge

Zur Vereinfachung wird angenommen, dass ein Molekül aus Punktmassen besteht, die durch starre, masselose Stäbe verbunden sind, das sogenannte Modell des starren Rotators (rigid rotator model). Mit diesem Modell lassen sich die erlaubten Rotationsenergieniveaus mittels der Schrödinger-Gleichung berechnen. Die Lösung dieser Gleichung für lineare Moleküle besagt, dass die möglichen Energieniveaus wie folgt gegeben sind [14, S. 293][7, S. 66]:

$$E_j = \frac{\hbar^2}{2I} j(j+1) = hc_0 B j(j+1), \quad j = 0, 1, 2, \dots \quad [14, \text{S. 293}][7, \text{S. 68–71}] \quad (3.1)$$

Dabei ist I das Trägheitsmoment des Moleküls und \hbar die reduzierte Planck-Konstante. Zur Vereinfachung wurde B eingeführt, das die *Rotationskonstante* beschreibt. Die Rotationsquantenzahl j beschreibt den Rotationszustand des Moleküls. Für den Grundzustand gilt $j = 0$, bei dem das Molekül nicht rotiert. Je höher j ist, desto schneller ist die Rotationsgeschwindigkeit des Moleküls [14, S. 294].

Die für die Absorption bei einem Rotationsübergang erforderliche Energie lässt sich mit $\Delta E = E_{j+1} - E_j$ berechnen, wodurch auch die entsprechende Frequenz bestimmt werden kann ($E = h\nu$). Eine notwendige Bedingung für die Beobachtung solcher Übergänge ist jedoch, dass das Molekül ein permanentes elektrisches Dipolmoment besitzt. Da CO₂ aufgrund seiner symmetrischen linearen Struktur kein permanentes Dipolmoment aufweist, können reine Rotationsübergänge nicht beobachtet werden [14, S. 294]. Warum Rotationsübergänge trotzdem für CO₂ von Bedeutung sind, wird in Unterunterabschnitt 3.3.3 erläutert.

3.3.2 Vibrationsübergänge

Zur Vereinfachung wird angenommen, dass zwei Punktmassen durch eine perfekt elastische masselose Feder verbunden sind. Dieses Modell wird als harmonische Oszillator bezeichnet. Bei diesem Modell lassen sich die möglichen Energieniveaus ebenfalls mit einer Lösung der Schrödinger-Gleichung berechnen [14, S. 294–295][7, S. 73–74]:

$$E_v = h\nu_e \left(v + \frac{1}{2} \right), \quad v = 0, 1, 2, \dots \quad [14, \text{S. 259}][7, \text{S. 76}] \quad (3.2)$$

Dabei ist ν_e die Eigenfrequenz der harmonischen Schwingung und v ist die Vibrationsquantenzahl, die ähnlich wie die Rotationsquantenzahl den Vibrationszustand beschreibt. Dieses Modell lässt nur die Auswahlregel $\Delta v = \pm 1$ zu, sodass die Vibrationszustände nur um 1 erhöht oder gesenkt werden können. Dies würde zu einer einzigen Spektrallinie bei der Eigenfrequenz führen [14, S. 295]:

$$\Delta E = E_{v+1} - E_v = h\nu_e \left(\left(v + \frac{3}{2} \right) - \left(v + \frac{1}{2} \right) \right) = h\nu_e = \text{const} \quad (3.3)$$

Allerdings ist das Modell eines harmonischen Oszillators deutlich ungenauer als das des starren Rotators. Dies lässt sich dadurch erklären, dass bei einer perfekt elastischen Feder die Kraft linear mit der Auslenkung zunimmt, wohingegen die Kraft bei Atomen, die sich relativ zueinander bewegen, nichtlinear zunimmt. Wird daher eine komplexere Federkonstante in die Analyse einbezogen, führt dies zu weiteren Termen in Gleichung 3.2, wodurch sich die Auswahlregel zu $\Delta v = \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots$ ändert. Dies resultiert in mehreren ungefähr gleichmäßig voneinander entfernten Spektrallinien. Der Übergang mit $\Delta v = \pm 1$ wird als *Fundamentalübergang* bezeichnet und ist normalerweise bei weitem der stärkste, während

die weiteren Übergänge mit $\Delta v = \pm 2, \Delta v = \pm 3, \dots$ als Obertöne bezeichnet werden. Der Vibrationszustand eines Moleküls wird mithilfe der Vibrationsquantenzahlen beschrieben, bei CO₂ beispielsweise durch (v_1, v_2, v_3) . Obwohl CO₂ vier Vibrations-Freiheitsgrade besitzt (siehe Unterabschnitt 3.2), werden nur drei Quantenzahlen benötigt. Der Grund hierfür ist, dass die zweite Vibrationsmode v_2 zweifach entartet ist: Es handelt sich um dieselbe Schwingung, die in zwei senkrecht zueinander stehenden Ebenen stattfindet [14, S. 295–297].

3.3.3 Kombinierte Übergänge

Wären für CO₂ nur Vibrationsübergänge möglich, gäbe es im Absorptionsspektrum nur sehr schmale Spektrallinien. Dies ist jedoch nicht der Fall (siehe Abbildung 3.3), da Vibrationsübergänge und Rotationsübergänge oft gleichzeitig stattfinden und zu den oben genannten *Vibrations-Rotations-Bändern* führen, welche aus vielen nah aneinanderliegenden Spektrallinien bestehen. Für Fundamentalübergänge liegt der Mittelpunkt dieser Linien wie beim Modell des harmonischen Oszillators bei der Eigenfrequenz des Vibrationsübergangs ν_e . Dieser Punkt wird als Bandmitte $\eta_0 = \nu_e/c_0$ bezeichnet [14, S. 298].

Für das einfachste Modell eines starren Rotators (Gleichung 3.1) kombiniert mit einem harmonischen Oszillator (Gleichung 3.2) ergibt sich die Gesamtenergie eines Molekülzustands als Summe der Vibrationsenergie und der Rotationsenergie:

$$E_{vj} = h\nu_e \left(v + \frac{1}{2} \right) + hc_0 B_v j(j+1), \quad v, j = 0, 1, 2, \dots \quad (3.4)$$

Im Gegensatz zum idealisierten starren Rotator ist die Rotationskonstante in realen Molekülen vom Vibrationszustand abhängig, weshalb hier B_v verwendet wird. Durch die gleichzeitige Änderung von Rotations- und Vibrationszustand entstehen bei einem Fundamentalübergang ($\Delta v = \pm 1$) drei charakteristische Zweige: der *P*-Zweig ($\Delta j = -1$), der *Q*-Zweig ($\Delta j = 0$) und der *R*-Zweig ($\Delta j = +1$) [14, S. 298]. Die Wellenzahlen der Spektrallinien in diesen Zweigen sind gegeben durch:

$$\eta_P(j) = \eta_0 + j^2(B_{v+1} - B_v) - j(B_{v+1} + B_v) \quad (3.5a)$$

$$\eta_Q(j) = \eta_0 + j^2(B_{v+1} - B_v) + j(B_{v+1} - B_v) \quad (3.5b)$$

$$\eta_R(j) = \eta_0 + j^2(B_{v+1} - B_v) + j(3B_{v+1} - B_v) + 2B_{v+1} \quad (3.5c)$$

wobei η_0 die Bandmitte bezeichnet. Die detaillierte Herleitung dieser Formeln findet sich in Unterabschnitt 6.4.2. Bei linearen Molekülen wie CO₂ gibt es oft keinen *Q*-Zweig. Mehr dazu in Unterabschnitt 3.4.

3.4 Das CO₂-Absorptionsspektrum

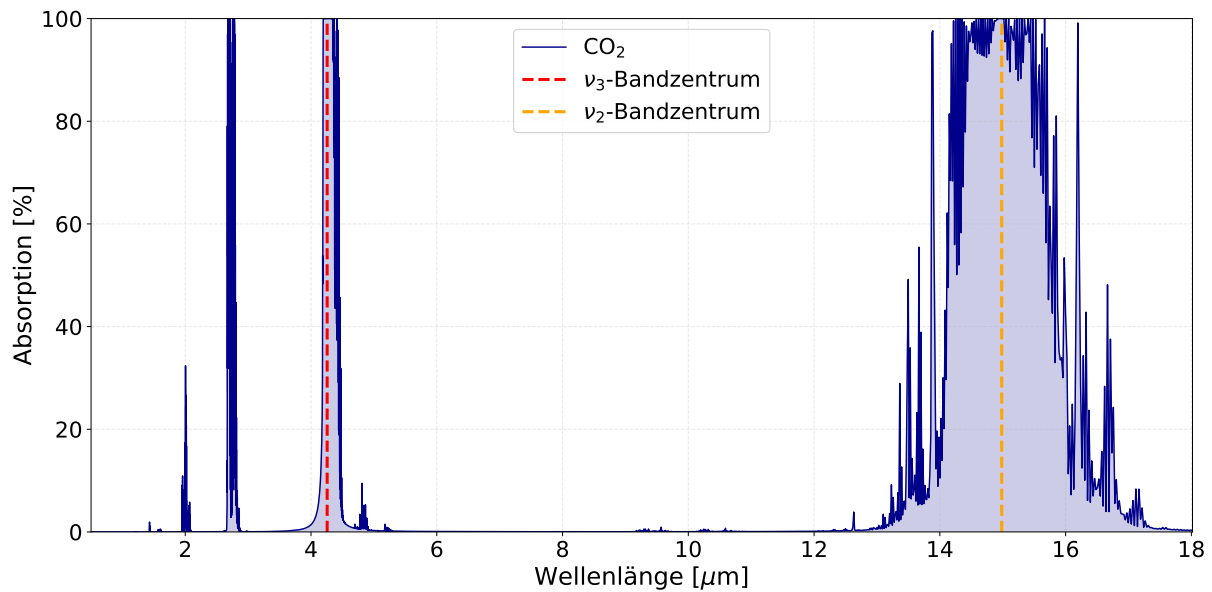


Abbildung 3.3: Absorptionsspektrum von CO₂. Daten stammen aus der HITRAN-Datenbank [8], Grafik wurde mithilfe von [16] erstellt, der Code ist im Anhang 6.6 dokumentiert.

Abbildung 3.3 zeigt die charakteristischen Absorptionsbanden von CO₂. Die beiden Hauptabsorptionsbanden sind die zweifach entartete Biegeschwingung ν_2 bei $\approx 667 \text{ cm}^{-1}$ ($\approx 15.0 \mu\text{m}$) und die asymmetrische Streckschwingung ν_3 bei $\approx 2349 \text{ cm}^{-1}$ ($\approx 4.26 \mu\text{m}$). Die in Abbildung 3.2 dargestellte symmetrische Streckschwingung ν_1 bei $\approx 1388 \text{ cm}^{-1}$ ($\approx 7.20 \mu\text{m}$) erscheint nicht im Spektrum, da diese Schwingungsmode keine Änderung des Dipolmoments bewirkt und somit infrarot-inaktiv ist [18, S. 39]. Das Absorptionsband bei $\approx 2.7 \mu\text{m}$ resultiert aus Kombinationsschwingungen: Die Überlagerung von $\nu_1 + \nu_3$ ergibt $\approx 3737 \text{ cm}^{-1}$ ($\approx 2.68 \mu\text{m}$), während die Kombination $2\nu_2 + \nu_3$ zu $\approx 3683 \text{ cm}^{-1}$ ($\approx 2.72 \mu\text{m}$) führt [6, S. 274]. Bei kritischer Beobachtung fällt auf, dass die symmetrische Streckschwingung ν_1 eigentlich infrarot-inaktiv ist, jedoch wird die Kombination infrarot-aktiv, da die gleichzeitige Anregung mit ν_3 zu einer Dipolmomentänderung führt.

3.4.1 Das ν_3 -Vibrationsband von CO₂

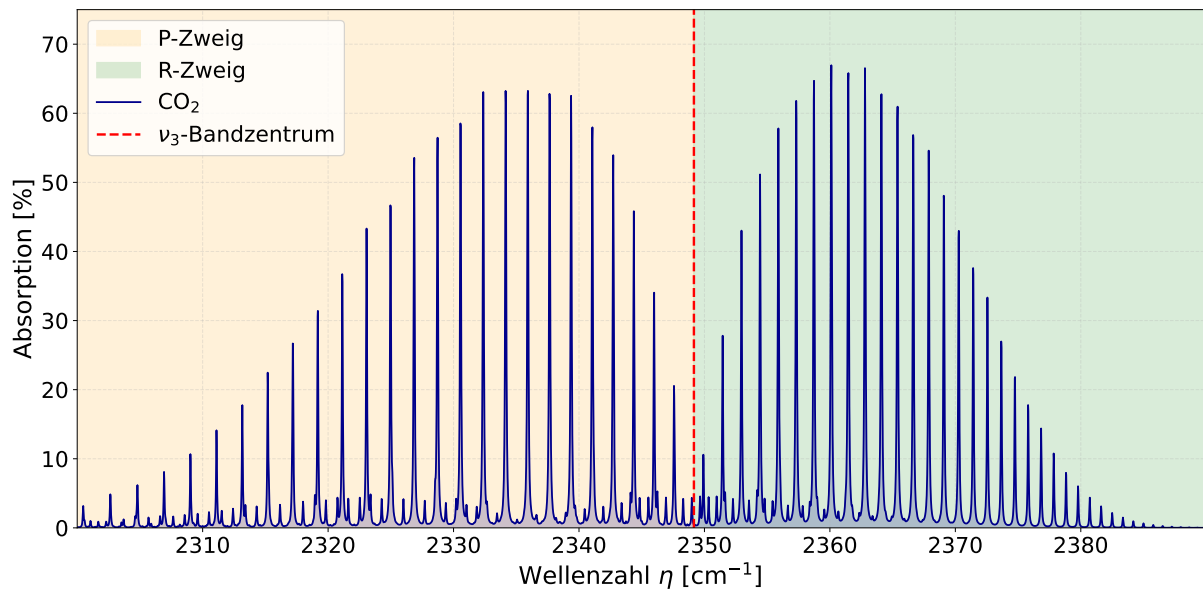


Abbildung 3.4: Absorptionsspektrum des ν_3 -Vibrationsbandes von CO₂. Daten kommen von der HITRAN Datenbank [8] und von [18, S. 39], Grafik wurde mithilfe von [16] erstellt, der Code ist im Anhang 6.7 dokumentiert.

Bei genauerer Betrachtung des ν_3 -Vibrationsbandes in Abbildung 3.4 zeigt sich, dass kein Q-Zweig gebildet wird. Das lässt sich durch den Drehimpuls eines Photons erklären, jedes Photon trägt einen Drehimpuls von \hbar , welcher bei Absorption auf das Molekül übertragen werden muss. Deswegen muss es einen kombinierten Rotationsübergang ($\Delta v = +1$, $\Delta j = \pm 1$) geben. Da unsere Auswahlregel $\Delta j = 0$ nicht zulässt, ist der Q-Zweig verboten. Die P - und R -Zweige sind gut sichtbar.

3.4.2 Das ν_2 -Vibrationsband von CO₂

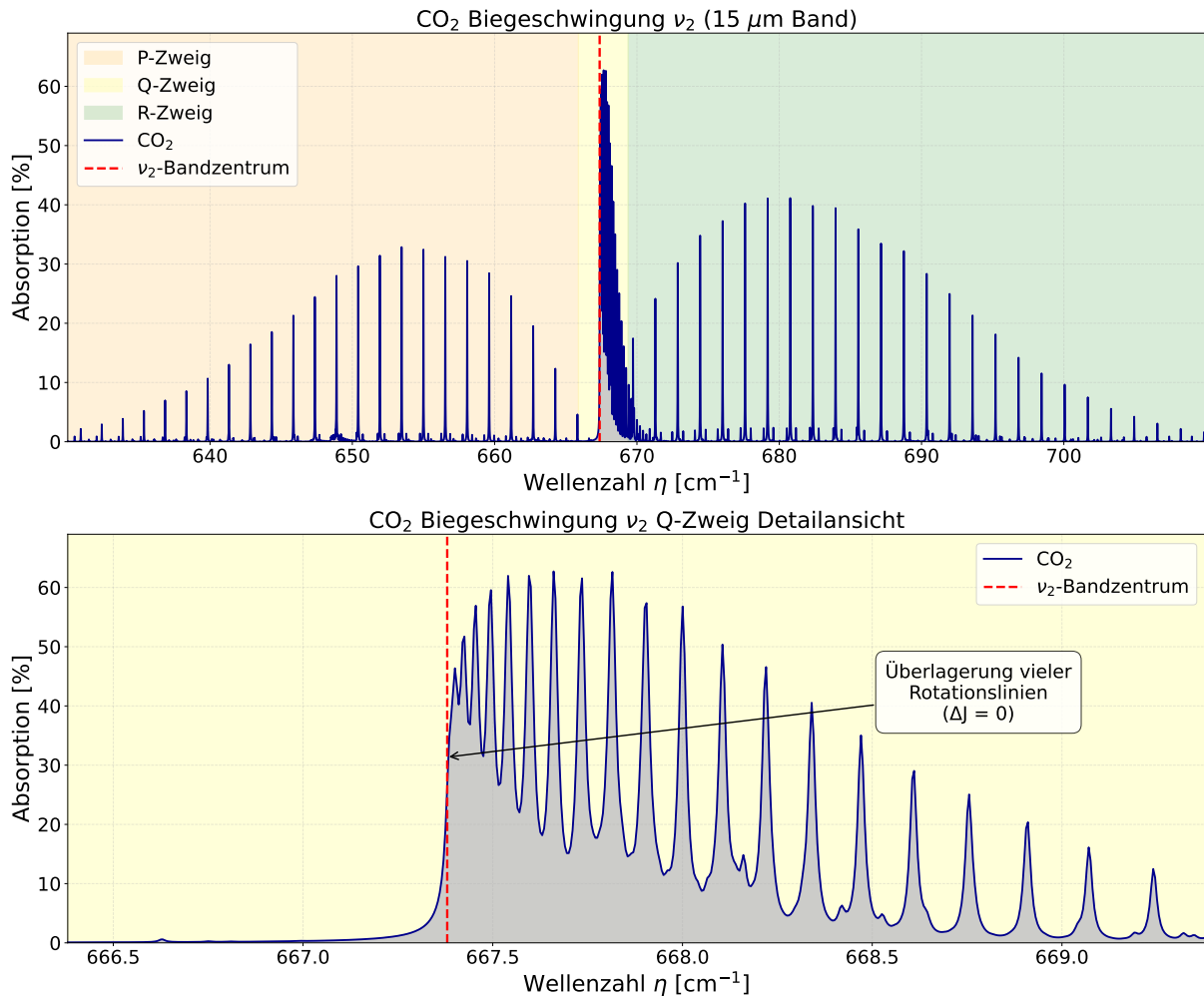


Abbildung 3.5: Absorptionsspektrum des ν_2 -Vibrationsbandes von CO₂. Daten kommen von der HITRAN Datenbank [8] und von [18, S. 39], Grafik wurde mithilfe von [16] erstellt, der Code ist im Anhang 6.7 dokumentiert.

Im Gegensatz zu Abbildung 3.4 zeigt das ν_2 -Vibrationsband eine deutlich komplexere Struktur. Neben den deutlich sichtbaren *P*- und *R*-Zweigen sieht man einen stark ausgeprägten *Q*-Zweig. Dieser kommt zustande, da durch die Biegeschwingung ν_2 das CO₂ Molekül seine lineare Form verlässt, und da diese Schwingung wie bereits erwähnt zweifach entartet ist, kann diese Auslenkung in 2 zueinander senkrechten Ebenen stattfinden. Dies ermöglicht das beide Schwingungen z.B. mit 90° Phasenverschiebung schwingen und dadurch einen Drehimpuls um die Molekülachse entsteht (Schwingungsdrehimpuls). Dieses Phänomen ist in Abbildung 3.6 konzeptionell veranschaulicht. Der Drehimpuls eines absorbierten Photons kann nun entweder die Rotation des Moleküls ändern ($\Delta j = \pm 1$) was zu den *P*- und *R*-Zweigen führt oder kann in den Schwingungsdrehimpuls fließen ($\Delta j = 0$) [2, S. 238–240, S 275]. Die im Vergleich zu den restlichen Zweigen starke Intensität des *Q*-Zweigs lässt sich durch die Gleichung 3.5b für den *Q*-Zweig erklären. Im

Gegensatz zu den anderen Zweigen (3.5a, 3.5c) ist bei dem Q-Zweig der wichtigste Faktor $B_{v+1} - B_v$, welcher so klein ist, dass die Q-Zweig-Linien unabhängig von j nahe bei η_0 liegen und sich zu einem intensiven Peak überlagern [1, S. 90]. Im Gegensatz dazu enthalten die P- und R-Zweige Terme mit $B_{v+1} + B_v$ wodurch sich die Linien mit zunehmenden j weiter verteilen.

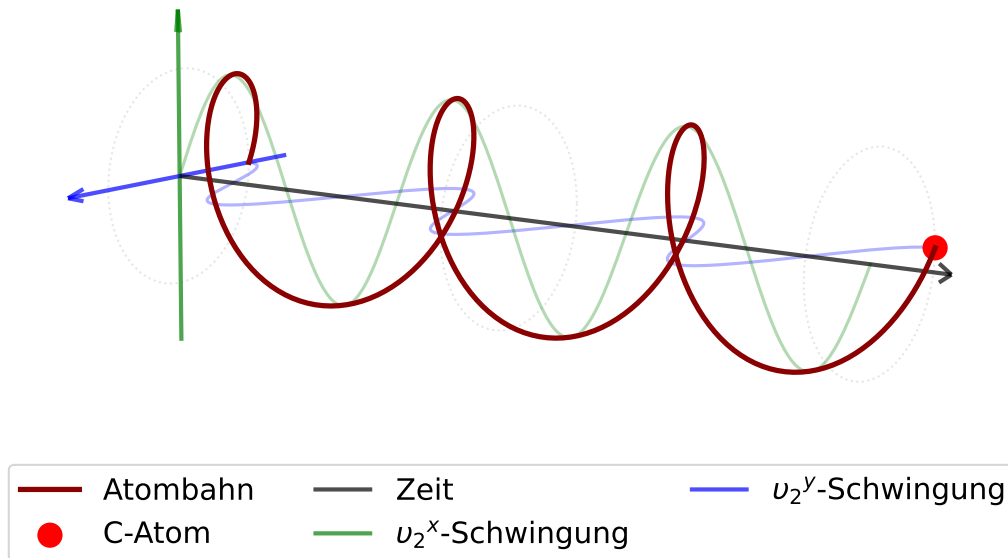


Abbildung 3.6: Konzeptuelle Visualisierung des Schwingungsdrehimpulses des ν_2 -Vibrationsbandes von CO_2 . Grafik wurde mithilfe von [16] erstellt, der Code ist im Anhang 6.7 dokumentiert.

Die quantenmechanische Analyse der CO_2 -Molekülphysik beantwortet die eingangs gestellte Frage nach der wellenlängenselektiven Absorption: CO_2 absorbiert elektromagnetische Strahlung nur bei jenen Wellenlängen, deren Photonenenergie exakt der Energiedifferenz zwischen erlaubten quantenmechanischen Zuständen entspricht. Die spektrale Überlappung der CO_2 -Absorptionsbanden mit der terrestrischen Wärmestrahlung (siehe Abbildung 2.4) erklärt die zentrale Rolle von CO_2 im Treibhauseffekt: Es ist weitgehend transparent für die kurzwellige solare Strahlung, absorbiert jedoch effektiv die langwellige terrestrische Strahlung.

4 Der Treibhauseffekt

Die Analyse der Strahlungsbilanz in Unterabschnitt 2.3 zeigte, dass die berechnete effektive planetare Temperatur deutlich unter der gemessenen globalen Mitteltemperatur liegt. Diese Differenz resultiert aus dem natürlichen Treibhauseffekt. Der zentrale Mechanismus

dieses Effekts und dessen Einfluss auf die Energiebilanz der Erde werden im folgenden Kapitel untersucht.

4.1 Mechanismus des Treibhauseffekts

Der Treibhauseffekt entsteht durch die wellenlängenabhängige Absorption elektromagnetischer Strahlung in der Atmosphäre. Während die kurzwellige solare Strahlung die Atmosphäre weitgehend ungehindert durchdringt und die Erdoberfläche erwärmt, wird die von der Oberfläche emittierte langwellige Infrarotstrahlung teilweise von atmosphärischen Spurengasen absorbiert. Die Atmosphäre emittiert ihrerseits thermische Strahlung sowohl in Richtung Weltraum als auch zurück zur Erdoberfläche. Diese zusätzliche Gegenstrahlung führt zu einer Erhöhung der Oberflächentemperatur gegenüber dem Zustand ohne Atmosphäre.

Die physikalischen Grundlagen dieses Prozesses wurden bereits im 19. Jahrhundert erkannt: Joseph Fourier identifizierte 1824 den Mechanismus der atmosphärischen Wärmespeicherung, John Tyndall wies dies 1863 experimentell nach, und Svante Arrhenius quantifizierte 1896 erstmals den Zusammenhang zwischen CO_2 -Konzentration und globaler Temperatur [lacis2010atmospheric].

4.2 Treibhausmodelle

Zur quantitativen Beschreibung des Treibhauseffekts dienen vereinfachte Strahlungsbilanzmodelle, die den Mechanismus schrittweise veranschaulichen und eine analytische Abschätzung der Oberflächentemperatur ermöglichen.

4.2.1 Das einfache Treibhausmodell

Das Modell setzt voraus, dass die Atmosphäre vollständig transparent für kurzwellige Sonnenstrahlung ist, jedoch vollständig opak für Infrarotstrahlung (visualisiert in Abbildung 4.1). Folglich ist die Gesamtausstrahlung der Erde von der Temperatur der Atmosphäre T_a abhängig, da nicht die Erdoberfläche direkt, sondern die Atmosphäre in den Weltraum strahlt. Die Gesamtausstrahlung ergibt sich mithilfe des Stefan-Boltzmann-Gesetzes aus Gleichung 2.5:

$$E_{\text{out}} = \sigma \cdot T_a^4 = A \uparrow \quad (4.1)$$

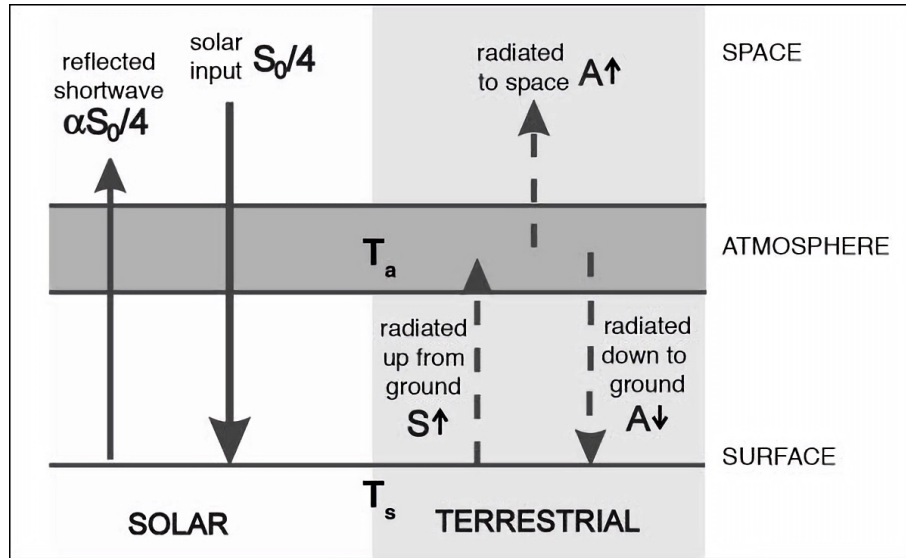


Abbildung 4.1: Schematische Darstellung des einfachen Treibhausmodells [12, S. 15]

Die Energiezufuhr erfolgt durch die Sonneneinstrahlung. Da nur die Querschnittsfläche der Erde die Sonnenstrahlung abfängt, muss die Sonneneinstrahlung auf die gesamte Erdoberfläche umgerechnet werden. Der Faktor für den Anteil der reflektierten Sonneneinstrahlung (planetare Albedo α_p) bleibt gleich (siehe Unterabschnitt 2.3).

$$E_{\text{sun}} = \frac{\text{interceptierte Sonnenstrahlung}}{\text{Oberfläche der Erde}} = \frac{S_0 \pi r^2}{4\pi r^2} = \frac{S_0}{4} \quad (4.2)$$

$$E_{\text{in}} = (1 - \alpha_p) \frac{S_0}{4} \quad (4.3)$$

In diesem Treibhausmodell existieren zwei fundamentale Energiegleichgewichte: $E_{\text{in}} = A \uparrow$, also Gesamteinstrahlung = Gesamtausstrahlung, und $S \uparrow = E_{\text{in}} + A \downarrow$, also Ausstrahlung der Oberfläche = auf die Oberfläche einfallende Strahlung.

Wird das Stefan-Boltzmann-Gesetz in das erste Energiegleichgewicht eingesetzt, ergibt sich:

$$(1 - \alpha_p) \frac{S_0}{4} = \sigma \cdot T_a^4 \quad (4.4)$$

Für das zweite Energiegleichgewicht folgt:

$$\sigma \cdot T_s^4 = (1 - \alpha_p) \frac{S_0}{4} + \sigma \cdot T_a^4 \quad (4.5)$$

Durch Einsetzen von Gleichung 4.4 in Gleichung 4.5 ergibt sich:

$$\begin{aligned} \sigma \cdot T_s^4 &= 2\sigma \cdot T_a^4 \\ T_s &= 2^{1/4} T_a \end{aligned}$$

Dies zeigt, dass die Oberflächentemperatur in diesem Modell um den Faktor $2^{1/4} \approx 1,19$ größer ist als die effektive planetare Temperatur: $254,6 \text{ K} \cdot 1,19 \approx 303 \text{ K}$. Dieser Wert liegt näher an der globalen Mitteltemperatur der Erdoberfläche von 288 K , stellt jedoch eine Überschätzung dar. Diese Diskrepanz resultiert aus der Modellannahme, dass die Atmosphäre die gesamte Infrarotstrahlung absorbiert. Wie in Unterabschnitt 3.4 gezeigt wurde, absorbiert CO_2 jedoch nicht den gesamten Infrarot-Wellenlängenbereich, sondern nur bestimmte spektrale Banden. Folglich muss das Treibhausmodell dahingehend modifiziert werden, dass es nur einen Teil der Infrarotstrahlung absorbiert.

4.2.2 Das undichte Treibhausmodell

Im erweiterten Modell wird angenommen, dass die Atmosphäre einen Teil der von der Oberfläche emittierten Strahlung absorbiert und einen Teil transmittiert. Das Modell arbeitet mit drei Temperaturen: T_a bezeichnet die Temperatur der Atmosphäre, T_s die Oberflächentemperatur und T_e die effektive planetare Temperatur (wie in Unterabschnitt 2.3 definiert), also die Temperatur der Erde als idealer schwarzer Körper ohne Atmosphäre.

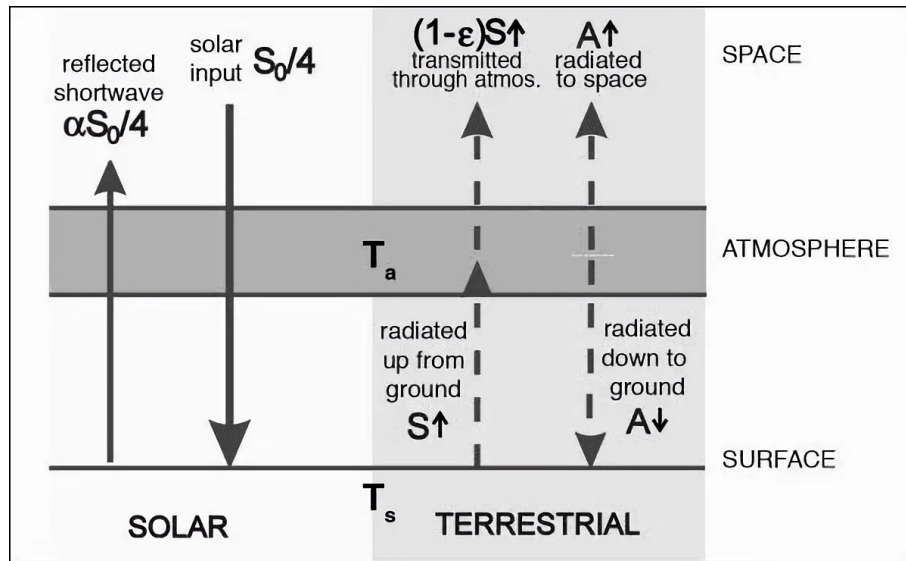


Abbildung 4.2: Schematische Darstellung des undichten Treibhausmodells [12, S. 17]

Das Energiegleichgewicht zwischen Gesamteinstrahlung und Gesamtausstrahlung lautet in diesem Modell:

$$E_{\text{in}} = A \uparrow + (1 - \epsilon) S \uparrow \quad (4.6)$$

wobei ϵ den Absorptionsgrad der Atmosphäre im Infrarotbereich beschreibt. Das Energiegleichgewicht $S \uparrow = E_{\text{in}} + A \downarrow$ bleibt unverändert. Da $A \downarrow = A \uparrow$ gilt, folgt:

$$S \uparrow = \frac{2}{2 - \epsilon} E_{\text{in}}$$

Mit $S \uparrow = \sigma T_s^4$ und $E_{\text{in}} = \sigma T_e^4$ ergibt sich:

$$T_s = \left(\frac{2}{2 - \varepsilon} \right)^{1/4} T_e \quad (4.7)$$

Die detaillierte Herleitung befindet sich in Unterabschnitt 6.5. Mit dieser Gleichung lässt sich der reelle Absorptionsgrad der Atmosphäre bestimmen, da für $T_s = 288 \text{ K}$ und $T_e = 254.6 \text{ K}$ Werte vorliegen. Aufgelöst nach ε ergibt sich:

$$\varepsilon = 2 - \frac{2}{(T_s/T_e)^4} = 77.8 \% \quad (4.8)$$

4.2.3 Berechnung des Absorptionsgrads von CO_2

Um den spezifischen Beitrag von CO_2 der Gesamtabsorption zu berechnen, können wir die Absorption jeder Wellenlänge berechnen und über den gesamten Wellenlängenbereich integrieren.

$$\varepsilon_{\text{CO}_2}(T) = \frac{\int_0^\infty \varepsilon(\lambda) \cdot E_{b\lambda}(\lambda, T_s) d\lambda}{\int_0^\infty E_{b\lambda}(\lambda, T_s) d\lambda} = \frac{\int_0^\infty \varepsilon(\lambda) \cdot E_{b\lambda}(\lambda, T_s) d\lambda}{\sigma T_s^4} \quad (4.9)$$

Die Wellenlängenabhängige Absorption von CO_2 $\varepsilon(\lambda)$ erhalten wir mithilfe der HITRAN-Daten [8]. Die Berechnung erfolgte mithilfe von Python [16], der Code ist in ... dokumentiert. Das Ergebnis ist: $\varepsilon_{\text{CO}_2} = 22.95 \%$.

5 Sättigungseffekte

6 Anhang

6.1 Abbildungsverzeichnis

2.1	Visualisierung charakteristischer Eigenschaften elektromagnetischer Wellen. Links: Räumliche Darstellung zeigt die Wellenlänge λ und die Wellenzahl η . Rechts: Zeitliche Darstellung zeigt die Periode T und die Frequenz ν	5
2.2	Spektrale spezifische Ausstrahlung $E_{b\lambda}$ eines schwarzen Körpers nach dem Planckschen Strahlungsgesetz für verschiedene Temperaturen. Die gestrichelte Linie verbindet die Maxima der Planck-Kurven und verdeutlicht das Wiensche Verschiebungsgesetz. Grafik wurde mithilfe von [16] erstellt, der Code ist im Anhang 6.3 dokumentiert.	7
2.3	Räumliche Verteilung der Albedo an der Erdoberfläche [12, S. 12].	8
2.4	Vergleich der spektralen spezifischen Ausstrahlung von Sonne und Erde nach dem Planckschen Strahlungsgesetz mit den Absorptionsbanden von CO_2 . Grafik erstellt mit [16], Code dokumentiert in Anhang 6.4.	10
3.1	Absorptionsspektrum von CO_2 unter $1.5\ \mu\text{m}$. Das einzige erkennbare Absorptionsband bei circa $1.435\ \mu\text{m}$ ist nur knapp über 1.75% Absorption. Daten kommen von der HITRAN Datenbank [8], Grafik wurde mithilfe von [16] erstellt, der Code ist im Anhang 6.6 dokumentiert.	12
3.2	Rotations- und Vibrations-Freiheitsgrade für (a) zweiatomige, (b) linear dreiatomige und (c) nichtlineare dreiatomige Moleküle. [14, S. 293]	13
3.3	Absorptionsspektrum von CO_2 . Daten stammen aus der HITRAN-Datenbank [8], Grafik wurde mithilfe von [16] erstellt, der Code ist im Anhang 6.6 dokumentiert.	16
3.4	Absorptionsspektrum des ν_3 -Vibrationsbandes von CO_2 . Daten kommen von der HITRAN Datenbank [8] und von [18, S. 39], Grafik wurde mithilfe von [16] erstellt, der Code ist im Anhang 6.7 dokumentiert.	17
3.5	Absorptionsspektrum des ν_2 -Vibrationsbandes von CO_2 . Daten kommen von der HITRAN Datenbank [8] und von [18, S. 39], Grafik wurde mithilfe von [16] erstellt, der Code ist im Anhang 6.7 dokumentiert.	18
3.6	Konzeptuelle Visualisierung des Schwingungsdrehimpulses des ν_2 -Vibrationsbandes von CO_2 . Grafik wurde mithilfe von [16] erstellt, der Code ist im Anhang 6.7 dokumentiert.	19
4.1	Schematische Darstellung des einfachen Treibhausmodells [12, S. 15]	21
4.2	Schematische Darstellung des undichten Treibhausmodells [12, S. 17]	22

6.2 Literaturverzeichnis

- [1] C.N. Banwell. *Fundamentals of Molecular Spectroscopy*. McGraw-Hill, 1966.
- [2] W. Demtröder. *Molekülphysik: Theoretische Grundlagen und experimentelle Methoden*. De Gruyter, 2013.
- [3] Physics Department. *STEFAN - BOLTZMANN'S LAW OF RADIATION*. URL: https://laboratoriofisica.uc3m.es/guiones_ing/qp/Stefan-Boltzmann_guide_english.pdf (besucht am 31.10.2025).
- [4] P. A. M. Dirac. *The principles of quantum mechanics*. und. 1962.
- [5] I.E. Gordon u. a. „The HITRAN2020 molecular spectroscopic database“. In: *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer* 277 (2022), S. 107949. ISSN: 0022-4073. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.jqsrt.2021.107949>. URL: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0022407321004416>.
- [6] Gerhard Herzberg. *Infrared and Raman spectra of polyatomic molecules*. D. Van Nostrand Company Inc., 1945.
- [7] Gerhard Herzberg. *Molecular Spectra and Molecular Structure Vol. I. Spectra of Diatomic Molecules*. 2nd ed. D. Van Nostrand Company Inc., 1950.
- [8] HITRAN. *HITRAN2020 molecular spectroscopic database*. 2020. URL: <https://hitran.org> (besucht am 04.11.2025).
- [9] Greg Kopp. „Solar irradiance measurements“. In: *Living Reviews in Solar Physics* 22 (Juli 2025). DOI: [10.1007/s41116-025-00040-5](https://doi.org/10.1007/s41116-025-00040-5).
- [10] H. Kraus. *Die Atmosphäre der Erde: Eine Einführung in die Meteorologie*. Springer Berlin Heidelberg, 2007. ISBN: 9783540350170. URL: <https://books.google.de/books?id=2RilBgAAQBAJ>.
- [11] Andrew Lacis u. a. „Atmospheric CO₂: Principal Control Knob Governing Earth's Temperature“. In: *Science (New York, N.Y.)* 330 (Okt. 2010), S. 356–9. DOI: [10.1126/science.1190653](https://doi.org/10.1126/science.1190653).
- [12] J. Marshall und R.A. Plumb. *Atmosphere, Ocean and Climate Dynamics: An Introductory Text*. International Geophysics. Academic Press, 2007. ISBN: 9780080556703. URL: <https://books.google.de/books?id=KvJfvYBHiegC>.
- [13] James Clerk Maxwell. *A treatise on electricity and magnetism*. eng. Oxford: Clarendon Press.
- [14] M. F. Modest. *Radiative heat transfer*. eng. 2nd ed. Amsterdam ; Academic Press, 2003. ISBN: 1-281-11929-6.
- [15] Max Planck. „Ueber das Gesetz der Energieverteilung im Normalspectrum“. In: *Annalen der Physik* 309.3 (1901), S. 553–563. DOI: <https://doi.org/10.1002/andp.19013090310>. eprint: <https://onlinelibrary.wiley.com/doi/pdf/10.1002/andp.19013090310>. URL: <https://onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1002/andp.19013090310>.

-
- [16] Python Software Foundation. *Python Programming Language*. Version 3.13. 2024. URL: <https://www.python.org>.
 - [17] Westermann Schulbuchverlag. *Mathematisch-Naturwissenschaftliche Formelsammlung IQB - Für die Abiturprüfung*. Braunschweig, Deutschland: Westermann Bildungsmedien Verlag GmbH, 2024, S. 72. ISBN: 978-3-14-127795-1.
 - [18] T. Shimanouchi. *Tables of Molecular Vibrational Frequencies Consolidated Volume I*. NSRDS-NBS 39. National Bureau of Standards, 1972, S. 1–160.
 - [19] Eite Tiesinga u. a. „CODATA recommended values of the fundamental physical constants: 2018“. In: *Rev. Mod. Phys.* 93 (2 Juni 2021), S. 025010. DOI: [10.1103/RevModPhys.93.025010](https://doi.org/10.1103/RevModPhys.93.025010). URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/RevModPhys.93.025010>.

6.3 Daten und Tabellen

Art der Oberfläche	Albedo (%)
Ozean	2-10
Wald	6-18
Städte	14-18
Grass	7-25
Acker	10-20
Natürliche Graslandökosysteme	16-20
Wüste(Sand)	35-45
Eis	20-70
Wolken (dünn)	30
Wolken (dick)	60-70
Schnee (alt)	40-60
Schnee (frisch)	75-95

Tabelle 6.1: Albedos für Unterschiedliche Oberflächen[12, S.11].

6.4 Formeln und Herleitungen

6.4.1 Herleitung des Wienschen Verschiebungsgesetzes

Das in Unterunterabschnitt 2.2.3 erläuterte Wiensche Verschiebungsgesetz wird durch die Ableitung des Planckschen Verschiebungsgesetzes (2.3) nach λ hergeleitet, indem man die Ableitung gleich null setzt. Die folgende mathematische Herleitung folgt Kraus [10, S. 101].

$$\frac{\partial E_{b\lambda}(T, \lambda)}{\partial \lambda} = 0$$

Die Ableitung nach λ ergibt mit der Produktregel:

$$-10 \frac{hc_0^2}{\lambda^6} \cdot \frac{1}{e^{hc_0/k\lambda T} - 1} - 2 \frac{hc_0^2}{\lambda^5} \cdot \frac{1}{(e^{hc_0/k\lambda T} - 1)^2} \cdot e^{hc_0/k\lambda T} \cdot \left(-\frac{hc_0}{k\lambda^2 T} \right) = 0$$

$$\frac{5}{\lambda} = \frac{1}{e^{hc_0/k\lambda T} - 1} \cdot e^{hc_0/k\lambda T} \cdot \frac{hc_0}{k\lambda^2 T}$$

Mit der Substitution $x = \frac{hc_0}{k\lambda T}$ ergibt sich die transzendente Gleichung:

$$5 = \frac{x \cdot e^x}{e^x - 1}$$

Die numerische Lösung dieser Gleichung liefert $x \approx 4.9651$. Rücksubstitution in $x_{max} = \frac{hc_0}{k\lambda_{max}T}$ ergibt das *Wiensche Verschiebungsgesetz*:

$$\begin{aligned}\lambda_{max} &= \frac{hc_0}{kx_{max}T} \\ \lambda_{max}T &= \frac{hc_0}{kx_{max}} \\ &= \frac{6.626\,12 \times 10^{-34} \text{ J s} \cdot 2.997\,92 \times 10^8 \text{ m s}^{-1}}{1.380\,65 \times 10^{-23} \text{ J K}^{-1} \cdot 4.9651} \\ &= 2.8978 \times 10^{-3} \text{ m K}\end{aligned}$$

6.4.2 Herleitung der 3 Übergangsformeln

Die in Unterunterabschnitt 3.3.3 beschriebenen 3 Gleichungen für die verschiedenen Zweige eines Vibrations-Rotations-Bands kommen wie folgt zustande:

Als Grundlage wird Gleichung 3.4 genommen und da wir ja einen Übergang der Energieniveaus brauchen, gehen wir erstmal von einem anfänglichen v'' , j'' und finalen v' , j' Zustand aus:

$$\begin{aligned}\Delta E &= E_{j'v'} - E_{j''v''} \\ &= h\nu_e \left(v' + \frac{1}{2} \right) + hc_0 B_{v'} j'(j' + 1) \\ &\quad - \left[h\nu_e \left(v'' + \frac{1}{2} \right) + hc_0 B_{v''} j''(j'' + 1) \right] \\ &= h\nu_e (v' - v'') + hc_0 [B_{v'} j'(j' + 1) - B_{v''} j''(j'' + 1)]\end{aligned}$$

Wir betrachten hier nur den Fundamentalübergang einer Absorption, deswegen gilt $\Delta v = +1$ was zu $v' = v'' + 1$ führt. Die Notation für beide Zustände wird jetzt zu $v'' = v$ und $v' = v + 1$ vereinfacht. In die Formel eingesetzt:

$$\begin{aligned}\Delta E &= h\nu_e (v + 1 - v) + hc_0 [B_{v+1} j'(j' + 1) - B_v j''(j'' + 1)] \\ &= h\nu_e + hc_0 [B_{v+1} j'(j' + 1) - B_v j''(j'' + 1)]\end{aligned}$$

Umgerechnet in Wellenzahl ergibt sich:

$$\Delta\eta = \frac{\Delta E}{hc_0} = \frac{\nu_e}{c_0} + B_{v+1} j'(j' + 1) - B_v j''(j'' + 1)$$

Da $\eta_0 = \nu_e/c_0$:

$$\Delta\eta = \eta_0 + B_{v+1} j'(j' + 1) - B_v j''(j'' + 1) \quad (6.1)$$

Ähnlich wie bei einem vorherigen Schritt führen wir wieder die Vereinfachung $j'' = j$ ein, j' kann auch wieder vereinfacht werden, je nach Zweig zu $j' = j + 1$, $j' = j$ oder $j' = j - 1$. Für den P Zweig ($j' = j - 1$) ergibt das:

$$\begin{aligned} j'(j' + 1) &= (j - 1)(j - 1 + 1) \\ &= (j - 1) \cdot j \\ &= j^2 - j \end{aligned}$$

Eingesetzt in Gleichung 6.1:

$$\begin{aligned} \eta_P &= \eta_0 + B_{v+1}(j^2 - j) - B_v j(j + 1) \\ &= \eta_0 + B_{v+1}j^2 - B_{v+1}j - B_v j^2 - B_v j \\ &= \eta_0 + j^2(B_{v+1} - B_v) - j(B_{v+1} + B_v) \end{aligned}$$

6.5 Herleitungen für das Treibhausmodell

Für die Formel

$$S \uparrow = \frac{2}{2 - \varepsilon} E_{\text{in}}$$

müssen wir erstmal das Energiegleichgewicht zwischen Gesamteinstrahlung und Gesamtausstrahlung aufstellen:

$$E_{\text{in}} = A \uparrow + (1 - \varepsilon) S \uparrow$$

Da $A \downarrow = A \uparrow$ und $A \downarrow = S \uparrow - E_{\text{in}}$ ergibt sich:

$$\begin{aligned} E_{\text{in}} &= A \uparrow + (1 - \varepsilon) S \uparrow \\ E_{\text{in}} &= S \uparrow - E_{\text{in}} + (1 - \varepsilon) S \uparrow \\ E_{\text{in}} &= (2 - \varepsilon) S \uparrow - E_{\text{in}} \\ 2E_{\text{in}} &= (2 - \varepsilon) S \uparrow \\ S \uparrow &= \frac{2}{2 - \varepsilon} E_{\text{in}} \end{aligned}$$

Da $S \uparrow = \sigma T_s^4$ und da $E_{\text{in}} = \sigma T_e^4$ ergibt sich:

$$\sigma T_s^4 = \frac{2}{2 - \varepsilon} \sigma T_e^4$$

$$T_s = \left(\frac{2}{2 - \varepsilon} \right)^{1/4} T_e$$

6.6 Quellcode

Liste aller Quellcodes

6.1	Verschiedene implementierungen für physikalische Gesetzte.	E
6.2	Verschiedene Hilfs-Funktionen	F
6.3	Planck Funktion für verschiedene Temperaturen mit Wienschem Verschiebungsgesetz.	G
6.4	Planck Funktion für Sonne & Erde mit CO ₂ Absorptionsbändern.	I
6.5	Visualisierung des CO ₂ -Absorptionsspektrums	K
6.6	Visualisierung des CO ₂ -Absorptionsspektrums unter 1.5 micrometern . . .	L
6.7	Visualisierung des CO ₂ -Absorptionsspektrums des ν_3 -Vibrationsbandes . .	N


```
1  from scipy import constants
2  import numpy as np
3
4  def plancks_law(wavelength: float, temperature: float, *, refractive_index: float = 1.0) -> float:
5      """Planck's radiation law
6
7      Returns spectral radiance in W/(m^3)
8      """
9      first = (2 * constants.pi * constants.h * (constants.c ** 2)) / ((refractive_index**2) * (wavelength
10 ↪ ** 5))
11      second = 1 / (np.exp((constants.h * constants.c) / (wavelength * constants.k * temperature)) - 1)
12      return first * second
13
14  def wien_displacement_law(temperature: float, *, refractive_index: float = 1.0) -> float:
15      """Wien's displacement law
16
17      Returns the peak wavelength of a body's radiation
18      """
19      b_wien = constants.value("Wien wavelength displacement law constant")
20      return b_wien / temperature * refractive_index
21
22
23  def wien_displacement_law_temperature(wavelength: float) -> float:
24      """Wien's displacement law temperature
25      Returns the peak temperature of a body's radiation
26      """
27
28      b_wien = constants.value("Wien wavelength displacement law constant")
29      return b_wien / wavelength
```

Listing 6.1: Verschiedene implementierungen für physikalische Gesetzte welche von anderen Quellcodes benutzt werden.

```
1 import numpy as np
2 import pandas as pd
3
4
5 def read_hitran_par(filename: str) -> pd.DataFrame:
6     """
7     Liest HITRAN .par Format ein
8     """
9     data = []
10
11     with open(filename, 'r') as f:
12         for line in f:
13             molecule_id = int(line[0:2])
14             isotopologue = int(line[2:3])
15             wavenumber = float(line[3:15])
16             intensity = float(line[15:25])
17
18             data.append({
19                 'molecule': molecule_id,
20                 'isotopologue': isotopologue,
21                 'wavenumber': wavenumber,
22                 'intensity': intensity
23             })
24
25     return pd.DataFrame(data)
26
27
28 def create_absorption_spectrum(wavenumbers, intensities, wn_grid,
29                               path_length=1.0, concentration=400e-6, pressure=1.0, temperature=296,
30                               ↪ gamma=0.1):
31     number_density = 2.69e19 * (pressure * 1.0) * (273.15 / temperature) * concentration
32
33     optical_depth = np.zeros_like(wn_grid)
34
35     gamma_L = gamma * pressure
36
37     path_length_cm = path_length * 100
38
39     for wn, intensity in zip(wavenumbers, intensities):
40         lorentz = (gamma_L / np.pi) / ((wn_grid - wn) ** 2 + gamma_L ** 2)
41         alpha = intensity * number_density * lorentz
42         optical_depth += alpha * path_length_cm
43
44
45     transmission = np.exp(-optical_depth)
46
47     absorbance = 1 - transmission
48
49     return absorbance, optical_depth
```

Listing 6.2: Verschiedene Funktionen die in mehreren anderen Quellcodes benötigt werden.

```

1  import numpy as np
2  from simulationen.formeln import plancks_law, wiens_displacement_law_temperature
3  import matplotlib.pyplot as plt
4  from simulationen import ROOT_DIR
5
6
7  def main():
8      wavelengths = np.linspace(1e-7, 100e-6, 20000)
9      temperature_range = np.linspace(500, 5000, 5)
10
11     spectral_radiances = [plancks_law(wavelengths, T) for T in temperature_range]
12
13     radiances = plancks_law(wavelengths, wiens_displacement_law_temperature(wavelengths))
14
15     fig, ax = plt.subplots()
16
17     for i, s in enumerate(spectral_radiances):
18         ax.loglog(wavelengths * 1e6, s, label=f"$T={temperature_range[i]:.0f}\\$,\\text{{K}}$")
19
20     ax.plot(wavelengths * 1e6, radiances, 'k--', label=r"$E_{\b\lambda}(T = b/\lambda)$")
21
22     ax.set_xlabel(r'Wellenlänge [$\mu\text{m}$]', fontsize=12)
23     ax.set_ylabel(r"Spektrale Ausstrahlung $E_{\b\lambda}$ [$\text{W}\\$,\\text{m}^{-2}\\$,\\mu\text{m}^{-1}$]",
24 ↵      fontsize=12)
25
26     ax.set_ylim(1e2, 1e15)
27     ax.set_xlim(1e-1, 1e2)
28     ax.legend(loc='upper right')
29     plt.tight_layout()
30     plt.savefig(ROOT_DIR / "seminararbeit" / "assets" / "wien_plot.pdf", bbox_inches='tight')
31     plt.show()
32
33 if __name__ == "__main__":
34     main()

```

Listing 6.3: Planck Funktion für verschiedene Temperaturen mit Wienschem Verschiebungsgesetz. Benutzt Formeln aus 6.1.

```

1  import numpy as np
2  import matplotlib.pyplot as plt
3
4  from simulationen import ROOT_DIR
5  from simulationen.formeln import plancks_law, wiens_displacement_law
6
7
8
9  TEMPERATURE_EARTH = 288.0 # Kelvin
10 TEMPERATURE_SUN = 5772 # Kelvin
11
12 def main():
13
14     max_wavelength_sun = wiens_displacement_law(TEMPERATURE_SUN) # in Metern
15     max_wavelength_earth = wiens_displacement_law(TEMPERATURE_EARTH) # in Metern
16     print(max_wavelength_sun, max_wavelength_earth)
17
18     wavelengths = np.linspace(1e-7, 100e-6, 20000)
19     # anything under 1e-7 will just be shown as 0 because its too small and causes an overflow error.
20
21     spectral_radiance_earth, spectral_radiance_sun = [0.0], [0.0]
22     # we put 0.0 as the first value here so that in our data there will always be a point P(0 | 0)
23     # without having an overflow error as described above
24     for wavelength in wavelengths:
25         spectral_radiance_sun.append(plancks_law(wavelength, TEMPERATURE_SUN))
26         spectral_radiance_earth.append(plancks_law(wavelength, TEMPERATURE_EARTH))
27
28     wavelengths = np.insert(wavelengths, 0, 0.0)
29     # we put 0.0 as the first value here so that in our data there will always be a point P(0 | 0)
30     # without having an overflow error as described above
31
32
33     plt.figure(figsize=(14, 10))
34
35     ax1 = plt.subplot2grid((2, 2), (0, 0))
36     ax2 = plt.subplot2grid((2, 2), (0, 1))
37     ax3 = plt.subplot2grid((2, 2), (1, 0), colspan=2)
38
39     ax1.plot(wavelengths * 1e6, spectral_radiance_sun, linewidth=2.0, color='tab:orange', label=f'Sonne
↳ ({TEMPERATURE_SUN} K)')
40     ax1.set_xlabel(r'Wellenlänge [ $\mu\text{m}$ ]', fontsize=12)
41     ax1.set_ylabel(r'Spektrale Ausstrahlung  $E_{\text{b}}(\lambda)$ 
↳ [ $\text{W}\cdot\text{m}^{-2}\cdot\mu\text{m}^{-1}$ ]', fontsize=12)
42     ax1.set_title(f'Sonne ({TEMPERATURE_SUN} K)', fontsize=14)
43     ax1.grid(True, alpha=0.3)
44     ax1.set_xlim(0, 4)
45     ax1.axvspan(0.4, 0.78, alpha=0.1, color='yellow', label='Sichtbares Licht')
46     ax1.axvline(x=max_wavelength_sun*1e6, color='orange', linestyle='--', alpha=0.5,
47                 label=f'Max Sonne: {max_wavelength_sun*1e6:.2f} ' + r' $\mu\text{m}$ ')]
48     ax1.legend(loc='upper right')
49
50     ax2.plot(wavelengths * 1e6, spectral_radiance_earth, linewidth=2.0, color='tab:blue', label=f'Erde
↳ ({TEMPERATURE_EARTH} K)')
51     ax2.set_xlabel(r'Wellenlänge [ $\mu\text{m}$ ]', fontsize=12)
52     ax2.set_ylabel(r'Spektrale Ausstrahlung  $E_{\text{b}}(\lambda)$ 
↳ [ $\text{W}\cdot\text{m}^{-2}\cdot\mu\text{m}^{-1}$ ]', fontsize=12)
53     ax2.set_title(f'Erde ({TEMPERATURE_EARTH} K)', fontsize=14)
54     ax2.grid(True, alpha=0.3)
55     ax2.set_xlim(0, 40)

```

```

56 ax2.axvspan(0.4, 0.78, alpha=0.1, color='yellow', label='Sichtbares Licht')
57 ax2.axvline(x=max_wavelength_sun*1e6, color='orange', linestyle='--', alpha=0.5,
58             label=f'Max Sonne: {max_wavelength_sun*1e6:.2f} ' + r'$\mu\text{m}$')
59 ax2.axvline(x=max_wavelength_earth*1e6, color='blue', linestyle='--', alpha=0.5,
60             label=f'Max Erde: {max_wavelength_earth*1e6:.2f} ' + r'$\mu\text{m}$')
61 ax2.legend(loc='upper right')
62
63 # Normalisierte Werte für bessere Vergleichbarkeit
64 spectral_radiance_sun_norm = np.array(spectral_radiance_sun) / np.max(spectral_radiance_sun)
65 spectral_radiance_earth_norm = np.array(spectral_radiance_earth) / np.max(spectral_radiance_earth)
66
67 ax3.semilogx(wavelengths * 1e6, spectral_radiance_sun_norm,
68              linewidth=2.0, color='tab:orange', label=f'Sonne ({TEMPERATURE_SUN} K) - normalisiert')
69 ax3.semilogx(wavelengths * 1e6, spectral_radiance_earth_norm,
70              linewidth=2.0, color='tab:blue', label=f'Erde ({TEMPERATURE_EARTH} K) - normalisiert')
71
72
73 ax3.axvspan(0.4, 0.78, alpha=0.1, color='yellow', label='Sichtbares Licht')
74 ax3.axvspan(0.78, 100, alpha=0.1, color='red', label='Infrarot')
75
76 ax3.axvspan(4.2, 4.4, alpha=0.3, color='green', label=r'$\mathrm{CO_2}$-Absorption (4.3
77 ↪ $\mu\text{m}$)')
78 ax3.axvspan(14, 16, alpha=0.3, color='green', label=r'$\mathrm{CO_2}$-Absorption (15
79 ↪ $\mu\text{m}$)')
80
81 ax3.set_xlabel(r'Wellenlänge [$\mu\text{m}$]', fontsize=12)
82 ax3.set_ylabel('Normalisierte spektrale Ausstrahlung', fontsize=12)
83 ax3.set_title(r'Vergleich: Planck-Strahlung und $\mathrm{CO_2}$-Absorptionsbänder', fontsize=14)
84 ax3.grid(True, alpha=0.3, which="both")
85 ax3.set_xlim(0.1, 100)
86 ax3.set_ylim(0, 1.1)
87 ax3.legend(loc='upper right')
88
89 ax3.annotate('Maximum\nSonnenstrahlung', xy=(max_wavelength_sun*1e6, 0.98), xytext=(1.2, 0.8),
90             arrowprops=dict(arrowstyle='->', color='orange', alpha=0.7),
91             fontsize=10, color='orange')
92 ax3.annotate('Maximum\nErdstrahlung', xy=(max_wavelength_earth*1e6, 0.98), xytext=(3.5, 0.7),
93             arrowprops=dict(arrowstyle='->', color='blue', alpha=0.7),
94             fontsize=10, color='blue')
95
96 plt.savefig(ROOT_DIR / "seminararbeit" / "assets" / "planck_plot.pdf", bbox_inches='tight')
97 plt.tight_layout()
98 plt.show()
99
100
101 if __name__ == "__main__":
102     main()

```

Listing 6.4: Planck Funktion für Sonne & Erde mit CO₂ Absorptionsbändern. Benutzt Formeln aus 6.1.

```

1  import numpy as np
2  from matplotlib import pyplot as plt
3
4  from simulationen import ROOT_DIR
5  from simulationen.utils import read_hitran_par, create_absorption_spectrum
6
7  FILENAME = ROOT_DIR / "data" / "hitran_co2_2025-11-04.par"
8
9
10 V3_CENTER = 2349.16
11 V2_CENTER = 667.38
12
13 df = read_hitran_par(FILENAME)
14
15 wn_min_filter = 555
16 wn_max_filter = 100000
17
18 df_filtered = df[(df['wavenumber'] >= wn_min_filter) &
19                  (df['wavenumber'] <= wn_max_filter)].copy()
20
21 wn_min = df_filtered['wavenumber'].min()
22 wn_max = df_filtered['wavenumber'].max()
23
24 gamma = 0.1
25 points_per_linewidth = 0.12
26 delta_wn = gamma / points_per_linewidth
27 n_points = int((wn_max - wn_min) / delta_wn)
28
29 print(n_points)
30 wn_grid = np.linspace(wn_min, wn_max, n_points)
31
32 absorbance, optical_depth = create_absorption_spectrum(
33     df_filtered['wavenumber'].values,
34     df_filtered['intensity'].values,
35     wn_grid,
36     path_length=100.0,
37     pressure=1.0,
38     temperature=296,
39     concentration=400e-6,
40     gamma=gamma
41 )
42
43 wl_grid = 10000.0 / wn_grid
44 V2_CENTER = 10000.0 / V2_CENTER
45 V3_CENTER = 10000.0 / V3_CENTER
46
47
48
49 fig, ax1 = plt.subplots(figsize=(14, 7))
50
51
52 ax1.plot(wl_grid, absorbance * 100, color='darkblue', linewidth=1.2, label=r"$\mathrm{CO_2}$")
53 ax1.set_xlabel(r'Wellenlänge [ $\mu\text{m}$ ]', fontsize=20)
54 ax1.set_ylabel('Absorption [%]', fontsize=20)
55 #ax1.set_title('CO2 Absorptionsspektrum', fontsize=14)
56 ax1.grid(True, alpha=0.3, linestyle='--')
57 ax1.set_ylim(0, 100)
58 ax1.set_xlim(wl_grid.min(), wl_grid.max())
59

```

```
60
61 ax1.fill_between(wl_grid, 0, absorbance * 100, color='darkblue', alpha=0.2)
62
63 ax1.axvline(V3_CENTER, color='red', linestyle='--', linewidth=2.5,
64             label=r'$\nu_3$-Bandzentrum')
65
66 ax1.axvline(V2_CENTER, color='orange', linestyle='--', linewidth=2.5,
67             label=r'$\nu_2$-Bandzentrum')
68
69 ax1.tick_params(axis='both', labelsize=18)
70 ax1.legend(loc='upper center', fontsize=18)
71
72 plt.tight_layout()
73 plt.savefig(ROOT_DIR / "seminararbeit" / "assets" / "co2_absorption.pdf", bbox_inches='tight')
74
75 plt.show()
```

Listing 6.5: Visualisierung des CO₂-Absorptionsspektrums mithilfe von HITRAN Daten [8]. Benutzt Funktionen aus 6.2.

```

1  import numpy as np
2  from matplotlib import pyplot as plt
3
4  from simulationen import ROOT_DIR
5  from simulationen.utils import read_hitran_par, create_absorption_spectrum
6
7  FILENAME = ROOT_DIR / "data" / "hitran_co2_2025-11-04.par"
8
9  df = read_hitran_par(FILENAME)
10
11  wn_min_filter = 6666
12  wn_max_filter = 1000000
13
14  df_filtered = df[(df['wavenumber'] >= wn_min_filter) &
15                  (df['wavenumber'] <= wn_max_filter)].copy()
16
17  wn_min = df_filtered['wavenumber'].min()
18  wn_max = df_filtered['wavenumber'].max()
19  wn_grid = np.linspace(wn_min, wn_max, 5000)
20
21  absorbance, optical_depth = create_absorption_spectrum(
22      df_filtered['wavenumber'].values,
23      df_filtered['intensity'].values,
24      wn_grid,
25      path_length=100.0,
26      pressure=1.0,
27      temperature=296,
28      concentration=400e-6,
29      gamma=0.1
30  )
31
32  wl_grid = 10000.0 / wn_grid
33
34
35  fig, ax1 = plt.subplots(figsize=(14, 7))
36
37  absorbance_percent = absorbance * 100
38
39  ax1.plot(wl_grid, absorbance_percent, color='darkblue', linewidth=1.5, label=r"$\mathrm{CO_2}$")
40  ax1.set_xlabel(r'Wellenlänge [ $\mu\text{m}$ ]', fontsize=20)
41  ax1.set_ylabel('Absorption [%]', fontsize=20)
42  ax1.grid(True, alpha=0.3, linestyle='--')
43  ax1.set_xlim(wl_grid.min(), wl_grid.max())
44
45  ax1.fill_between(wl_grid, 0, absorbance_percent, color='darkblue', alpha=0.2)
46
47  ax1.tick_params(axis='both', labelsize=18)
48  ax1.legend(loc='upper left', fontsize=18)
49
50  plt.tight_layout()
51  plt.savefig(ROOT_DIR / "seminararbeit" / "assets" / "co2_absorption_under_1_5.pdf", bbox_inches='tight')
52
53  plt.show()

```

Listing 6.6: Visualisierung des CO₂-Absorptionsspektrums unterhalb von 1.5 μm mithilfe von HITRAN Daten [8]. Benutzt Funktionen aus 6.2.


```

1  import numpy as np
2  from matplotlib import pyplot as plt
3
4  from simulationen import ROOT_DIR
5  from simulationen.utils import read_hitran_par, create_absorption_spectrum
6
7  FILENAME = ROOT_DIR / "data" / "hitran_co2_2025-11-04.par"
8
9  df = read_hitran_par(FILENAME)
10
11  wn_min_filter = 2300
12  wn_max_filter = 2390
13
14  df_filtered = df[(df['wavenumber'] >= wn_min_filter) &
15                  (df['wavenumber'] <= wn_max_filter)].copy()
16
17  wn_min = df_filtered['wavenumber'].min()
18  wn_max = df_filtered['wavenumber'].max()
19
20  gamma = 0.4
21  points_per_linewidth = 20
22  delta_wn = gamma / points_per_linewidth
23  n_points = int((wn_max - wn_min) / delta_wn)
24
25  wn_grid = np.linspace(wn_min, wn_max, n_points)
26
27  absorbance, optical_depth = create_absorption_spectrum(
28      df_filtered['wavenumber'].values,
29      df_filtered['intensity'].values,
30      wn_grid,
31      path_length=0.4,
32      pressure=0.1,
33      temperature=296,
34      concentration=400e-6,
35      gamma=gamma
36  )
37
38
39  fig, ax1 = plt.subplots(figsize=(14, 7))
40
41  absorbance_percent = absorbance * 100
42
43  V3_CENTER = 2349.16
44
45  ax1.axvspan(wn_grid.min(), V3_CENTER, alpha=0.15, color='orange', label='P-Zweig')
46  ax1.axvspan(V3_CENTER, wn_grid.max(), alpha=0.15, color='green', label='R-Zweig')
47
48  ax1.plot(wn_grid, absorbance_percent, color='darkblue', linewidth=1.5, label=r"$\mathrm{CO_2}$")
49  ax1.fill_between(wn_grid, 0, absorbance_percent, color='darkblue', alpha=0.2)
50
51  ax1.axvline(V3_CENTER, color='red', linestyle='--', linewidth=2,
52             label=r"$\nu_3$-Bandzentrum")
53
54  ax1.set_xlabel(r'Wellenzahl $\eta$ [$\mathrm{cm}^{-1}$]', fontsize=20)
55  ax1.set_ylabel('Absorption [%]', fontsize=20)
56  ax1.grid(True, alpha=0.3, linestyle='--')
57  ax1.set_xlim(wn_grid.min(), wn_grid.max())
58  ax1.set_ylim(0, 75)
59

```

```
60 ax1.tick_params(axis='both', labels=18)
61 ax1.legend(loc='upper left', font=18)
62
63 plt.tight_layout()
64 plt.savefig(ROOT_DIR / "seminararbeit" / "assets" / "co2_absorption_v3_band.pdf", bbox_inches='tight')
65 plt.show()
```

Listing 6.7: Visualisierung des CO₂-Absorptionsspektrums des ν_3 -Vibrationsbandes mit Hilfe von HITRAN Daten [8], Daten des Bandzentrums kommen aus [18, S. 39]. Benutzt Funktionen aus 6.2.