
Simulation des Kryptonmodus der Tritiumquelle WGTS im KATRIN Experiment

Jiayu Hua

Simulation des Kryptonmodus der Tritiumquelle WGTS im KATRIN Experiment

Diplomarbeit

vorgelegt

von

Jiayu Hua

Institut für Experimentelle Kernphysik

Karlsruher Institut für Technologie

November 2010

Inhaltsverzeichnis

1	Einführung	1
1.1	Neutrino-physik	2
1.2	Messung der Neutrinomasse	5
1.2.1	Neutrinomasse aus dem Tritiumbetazerfall	5
1.2.2	Neutrinomassenexperimente	6
2	Das KATRIN Experiment	9
2.1	Messprinzip	9
2.2	Überblick des Experiments	11
2.2.1	Tritiumquelle	12
2.2.2	Transportsektion	15
2.2.3	Spektrometer	16
2.2.4	Detektor und Rearsektion	20
3	Physik des Kryptonmodus der WGTS	21
3.1	Grundlagen	21
3.1.1	Innere Konversionselektronen	21
3.1.2	^{83m}Kr -Konversionselektronen	22
3.1.3	^{83m}Kr -Konversionselektronen Spektrum	24
3.2	Theoretische und experimentelle Bestimmung der ^{83m}Kr -Linien	26
3.2.1	Die Linienlage	26
3.2.2	Der Konversionskoeffizient	27
3.2.3	Die Linienbreite	29
3.3	Shake Off/Up Effekt	32

3.4	Verwendung von Krypton im Mainz und Troitsk Experiment	35
3.4.1	Bestimmung der ^{83m}Kr -Konversionseigenschaft im Mainzer Experiment	35
3.4.2	Untersuchung des Quellpotentials im Troitsk-Experiment	37
3.5	Verwendung von Krypton im KATRIN Experiment	41
4	Modellierung des Krypton Modus der WGTS	45
4.1	Bestehende Simulationen	45
4.1.1	Gasdynamik in der WGTS	46
4.1.1.1	Tritium-Dichteprofil bei $T = 120\text{ K}$	46
4.1.1.2	Entmischung von T_2 und Kr	47
4.1.1.3	Dopplerverbreiterung	48
4.1.2	Integriertes Spektrum	49
4.1.2.1	Modifikationen des differentiellen Spektrums und Quellparameter	49
4.1.2.2	Räumliche Unterteilung der Quelle	51
4.1.2.3	Antwortfunktion und integriertes Spektrum	52
4.2	Implementierung der Gasdynamik	55
4.3	Implementierung des Krypton-Spektrums	57
4.4	Berechnung des integrierten Spektrums für verschiedene Quellpotentiale .	62
4.5	Analyse mit Quellpotential $q(x)$	65
4.5.1	Grundlage zur Bestimmung des Potentials	69
4.5.2	Analyseergebnisse	72
5	Zusammenfassung und Ausblick	75
	Literaturverzeichnis	79

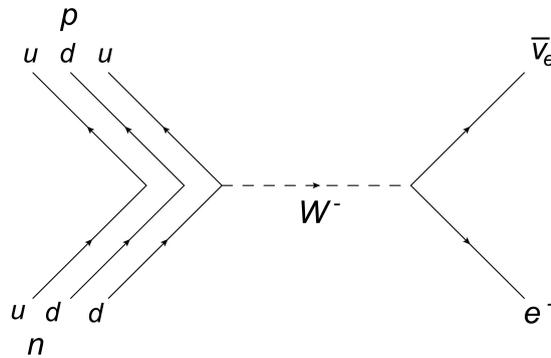
1. Einführung

Die Neutrinomasse spielt eine wichtige Rolle in Kosmologie, Teilchen- und Astrophysik. Deshalb wurde seit längerem durch verschiedene experimentelle Methoden versucht, die absolute Größe der Neutrinomasse zu bestimmen. Allerdings konnte bis heute trotz zahlreicher Austreibungen nur eine Obergrenze von $m_\nu < 2,3 \text{ eV}/c^2$ ermittelt werden. Das Karlsruhe Tritium Neutrino Experiment (KATRIN) hat die Bestimmung der Neutrinomasse anhand des β -Spektrums einer gasförmigen Tritiumquelle mit einer bisher unerreichten Sensitivität von $0,2 \text{ eV}/c^2$ (90% C. L.) zum Ziel. In der geplanten dreijährigen Messphase sind sowohl die Genauigkeit als auch Stabilität der Quell- und Spektrometerparameter von entscheidender Bedeutung, da ihre Fluktuation σ zu einer Verschiebung Δm_ν^2 des Messergebnisses der Neutrinomasse mit $\Delta m_\nu^2 = -2\sigma^2$ führt. Somit müssen solche Unsicherheiten durch umfangreiche Kalibrationen und permanentes Monitoring von Schlüsselparametern eingeschränkt werden. Obwohl strenge Anforderungen an die systematischen Fehler bestehen, gibt es im KATRIN Experiment unvermeidbare Effekte, die die Messwerte verändern können. Für diese Arbeit von besonderer Bedeutung ist der Einfluss des elektrischen Potentials, welches von der unbekannt räumlichen Ladungsverteilung der Tritiumionen in der Quelle verursacht wird. Um die gewünschte Design-Sensitivität zu erreichen, muss das Quellpotential und sein Einfluss auf das β -Spektrum genau bestimmt werden. Dadurch kann das theoretisch erwartete β -Spektrum in entsprechender Weise modifiziert werden.

Zu diesem Zweck wird ein sogenannter 'Kryptonmodus' bei KATRIN verwendet. Hierbei wird für die Messung der möglichen Fluktuation des Quellpotentials ein geringer Anteil von ^{83m}Kr in die Quelle injiziert. Durch die genaue Messung des Krypton-Spektrums kann dann die Potentialverteilung entlang der Quelle ermittelt werden.

Das Ziel der Arbeit bestand in der Entwicklung von Algorithmen, die unter Berücksichtigung aller Aspekte der Quelle sowie einer präzisen Beschreibung des Zerfallsprozesses das zu erwartende Krypton-Spektrum berechnen. Zur Bestimmung der Potentialverteilung wurde schwerpunktmäßig eine neue Analyseverfahren entwickelt, und an einigen Beispielpotentialen getestet.

Nach einer allgemeinen Einführung in die Thematik der Neutrinomassenbestimmung in diesem Kapitel wird in Kap. 2 zunächst das KATRIN Experiment vorgestellt. In Kap. 3 werden die theoretischen und experimentellen Grundlagen zur Verwendung von Krypton als Quelle von wohldefinierten Konversionselektronen diskutiert. Die im Rahmen dieser Arbeit entwickelten Simulationen und Analysemethoden werden schließlich in Kap. 4 vorgestellt.

Abbildung 1.1: Feynman-Diagramm des β -Zerfalls.

1.1 Neutrinophysik

Wolfgang Pauli hat im Jahre 1930 das Neutrino postuliert, um die kinematischen und spinstatistischen Widersprüche beim radioaktiven β -Zerfall aufzuheben [1]. Bevor das Neutrino als hypothetisches Teilchen eingeführt wurde, wurde der β^- -Zerfall als einfacher Zwei-Körper-Prozess

$$B(A, Z) \longrightarrow C(A, Z + 1) + e^-, \quad (1.1)$$

mit dem Mutterkern $B(A, Z)$ (A Nukleonen und Z Protonen) und Tochterkern (A Nukleonen und $Z + 1$ Protonen) angesehen. Bei ruhendem Mutterkern B ergibt sich aus der Energieerhaltung die kinetische Energie von Tochterkern A und e^- zu

$$E_{\text{kin}} = m_B - m_C - m_{e^-}, \quad (1.2)$$

wobei bei gleichem, entgegengesetztem Impuls p von C und e^- die kinetische Energie $E_{C\text{kin}} = p^2/2m_C$ gegenüber $E_{e^-\text{kin}} = p^2/2m_{e^-}$ vernachlässigt wurde. Die kinetische Energie des Elektrons sollte dementsprechend fest sein: $E_{e^-\text{kin}} = E_{\text{kin}}$. Dies impliziert ein monoenergetisches Spektrum, das im Widerspruch zur Beobachtung eines kontinuierlichen Energiespektrums im β -Zerfall stand. Pauli postuliert deshalb die Existenz eines nicht beobachteten elektrisch neutralen Teilchens, um die beim Zerfall freiwerdende Energie zu verteilen.

Der andere Widerspruch beruht auf der Spin-Statistik. Beim β -Zerfall haben Mutter- und Tochterkern beide ganzzahligen oder beide halbzahligen Spin. Aber aufgrund der Drehimpulserhaltung kann der Kernspin im Zerfall nur erhalten bleiben, wenn außer dem Elektron mit Spin $\frac{1}{2}$ noch ein weiteres Spin $\frac{1}{2}$ Fermion entsteht, nämlich das Neutrino, am β -Zerfall beteiligt ist. Dieses Problem wird durch ein zusätzliches Teilchen im β -Zerfall ebenfalls gelöst: Ein in B gebundenes Neutron zerfällt in ein Proton von C , ein Elektron und ein nicht beobachtetes Elektron-Antineutrino $\bar{\nu}_e$ (Abb. 1.1):

$$n \longrightarrow p + e^- + \bar{\nu}_e. \quad (1.3)$$

Neutrinos im Standardmodell

Das Standardmodell der Elementarteilchenphysik umfasst als Stützpfeiler die vereinheitlichte Theorie der elektroschwachen Wechselwirkung und die Quantenchromodynamik [2]. Dabei wird die elektromagnetische Wechselwirkung durch die Quantenelektrodynamik (QED) mit der abelschen Eichgruppe $U(1)$ beschrieben, während die schwache Wechselwirkung der Eichtheorie mit der nicht-abelschen Gruppe $SU(2)$ entspricht. Beide werden durch die $SU(2) \times U(1)$ Gruppe als elektroschwache Wechselwirkung gemeinsam beschrieben. Die Austauschteilchen der elektroschwachen Wechselwirkung sind die massiven W^{+-} , W^- und Z^0 -Bosonen, sowie das masselose Photon γ . Dazu kommt die starke Wechselwirkung im Rahmen der Quantenchromodynamik mit der Eichgruppe $SU(3)$, deren Austauschteilchen 8 verschiedenen Gluonen g umfassen. Deshalb wird das Standardmodell als das $SU(3) \times SU(2) \times U(1)$ -Modell bezeichnet, in dem die Elementarteilchen aus je drei Familien von Leptonen

$$\begin{pmatrix} \nu_e \\ e \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} \nu_\mu \\ \mu \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} \nu_\tau \\ \tau \end{pmatrix}$$

und drei Familien Quarks

$$\begin{pmatrix} u \\ d \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} c \\ s \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} t \\ b \end{pmatrix}.$$

bestehen.

Die drei Generationen an fundamentalen Quarks, die Eigenzustände der Eichgruppe $SU(3)$ darstellen, tragen als weitere Quantenzahl verschiedene Farbladungen: r (rot), b (blau) und g (grün). Gluonen tragen auch Farbladungen und wechselwirken daher untereinander. Die Bosonen der schwachen Wechselwirkung, die selbst schwache Ladung tragen, koppeln ebenfalls aneinander.

Die Quarks und Leptonen sind Fermionen mit Spin $1/2$. Diese 6 Quarks werden u (up), d (down), c (charm), s (strange), t (top) und b (bottom) genannt. Davon haben u , c und t die Ladungszahl $+2/3$, die drei anderen $-1/3$. Hingegen haben die drei Leptonen Elektron (e), Myon (μ) und Tau (τ) die Ladungszahl -1 , während das Elektron (ν_e), das Myon- (ν_μ) und das Tau-Neutrino (ν_τ) elektrisch neutral sind. Zu allen diesen Fermionen gibt es die entsprechenden Antifermionen mit gleicher Masse, aber entgegengesetzter elektrischer Ladung. Beispielsweise ist das Elektron-Antineutrino als $\bar{\nu}_e$ bezeichnet.

Bei allen drei Eichwechselwirkungen bleiben Energie, Impuls, Drehimpuls, Ladung, Baryonenzahl und die drei Familienleptonenzahlen (L_e, L_μ, L_τ)¹ erhalten. Aufgrund der Existenz des Elektron-Antineutrinos $\bar{\nu}_e$ genügt der β -Zerfall (siehe Gl. 1.3) diesen Erhaltungssätzen. Die Paritäten P und C bleiben bei der starken und der elektroma-

¹Die Leptonenzahl einer Familie ist definiert durch:

$$L_l = N(l) - N(\bar{l}) + N(\nu_l) - N(\bar{\nu}_l) \quad (1.4)$$

mit der Zahl der entsprechenden Lepton N für $l = e, \mu, \tau$. Bei der Propagation eines Neutrinos wird L_l durch Neutrino-Oszillationen verletzt.

gnetischen Wechselwirkung erhalten, aber bei der schwachen Wechselwirkung wurde zunächst die Paritäts- und später die CP -Verletzung experimentell nachgewiesen. Im Standardmodell wurde zunächst postuliert, dass ein Neutrino ν_l immer linkshändig mit einer Helizität $H = -1$ und ein Antineutrino $\bar{\nu}_l$ immer rechtshändig mit $H = +1$ ist. Nach der Entdeckung an Neutrino-Oszillationen mit einer nicht verschwindenden Neutrinomasse gilt diese Aussage nicht sehr streng.

Im Rahmen des Standardmodells sollten alle Leptonen und die Eichbosonen W^{+-} , W^{-} , Z^0 -Boson und Photon masselos sein, um die Eichsymmetrie zu behalten [3]. Dies stimmt offensichtlich nicht mit den Beobachtungen überein, da neben Photonen alle geladenen Fermionen und Eichbosonen endliche Massen besitzen. Ausgehend vom Konzept der spontanen Symmetriebrechung wurde im Standardmodell das skalare Higgs-Boson postuliert, mit dem die endliche Masse der Fermionen und Eichbosonen zugelassen werden, ohne die Eichsymmetrie aufzuheben. Die Masse z.B. eines geladenen Leptons könnte durch die Higgs-Lepton-Kopplungskonstante g_l bestimmt werden. Zum Beispiel ergibt sich für das Elektron e^- seine Masse zu

$$m_e = \frac{(G\sqrt{2})^{-1/2}}{\sqrt{2}} g_e, \quad (1.5)$$

mit der Fermi-Kopplungskonstanten $G = 1,166 \times 10^{-5} \text{ GeV}^{-2}$. Zunächst muss jedoch das Postulat des Higgs-Bosons experimentell bestätigt werden, um den freien Parameter g_l zu ermitteln.

Die geladenen Leptonen (e , μ , τ) können sowohl an der elektromagnetischen, als auch an der schwachen Wechselwirkung teilnehmen, während die Quarks an allen drei Wechselwirkungen beteiligt sind. Hingegen nehmen die Neutrinos als neutrale Lepton nur an der schwachen Wechselwirkung teil.

Neutrino-Oszillationen

Bei den atmosphärischen Neutrinos wurde ein von den theoretischen Vorhersagen abweichendes ν_e/ν_μ -Verhältnis als Funktion des Zenithwinkels θ nachgewiesen. Dies ist ein eindeutiger Hinweis auf Neutrino-Oszillationen, bei denen sich eine Neutrinoart in eine andere umwandelt. Die Existenz von Neutrino-Oszillationen muss folgenden Voraussetzungen genügen: Nicht alle drei Neutrinos haben die selbe Masse, und insbesondere ist mindestens ein Neutrino nicht masselos. Die Familienleptonenzahl L_l ist nicht streng erhalten, da die Neutrinoarten untereinander mischen. Dies widerspricht einem entsprechenden Erhaltungssatz im Standardmodell, ist aber nicht im Konflikt mit einem fundamentalen Eichprinzip.

Die in der schwachen Wechselwirkung entstehenden Neutrinoarten ν_α mit ihrer spezifischen Familienleptonenzahl L_α werden auch als Flavoureigenzustände $|\nu_\alpha\rangle$ (ν_e , ν_μ , ν_τ) bezeichnet. Im allgemeinen haben diese Zustände keine definierte Masse, da sie nicht die Eigenzustände des Massenoperators sind, sondern vielmehr Linearkombinationen sind von nicht-entarteten Masseneigenzuständen $|\nu_i\rangle$ mit Eigenwerten m_i . Diese Flavoureigenzustände $|\nu_\alpha\rangle$ sind über eine unitäre Mischungsmatrix U von den Masseneigenzuständen $|\nu_i\rangle$ verknüpft:

$$|\nu_\alpha\rangle = \sum_{i=1}^3 U_{\alpha i} |\nu_i\rangle \quad (1.6)$$

Die $|\nu_i\rangle$ -Zustände am Anfang entwickeln sich in der Zeit mit unterschiedlichen Phasen

$$|\nu_i(t)\rangle = \exp(-iE_it) |\nu_i\rangle \quad (1.7)$$

mit den Eigenwerten E_i des Hamiltonoperators. Ein ursprünglich reiner Flavourzustand $|\nu_\alpha\rangle$ kann aufgrund der zeitabhängigen Mischung in einen anderen Zustand übergehen, wenn die Eigenwerte aller Zustände nicht identisch sind

$$m_i - m_j \neq 0 \text{ für } i \neq j. \quad (1.8)$$

Dadurch wird im Experiment eine andere neue Neutrinoart $|\nu_\beta\rangle$ mit einer gewissen Wahrscheinlichkeit $P(\alpha \rightarrow \beta)$ zu einem Zeitpunkt t nachgewiesen. Es gilt

$$P(\alpha \rightarrow \beta, t) = \delta_{\alpha\beta} - 2\text{Re} \sum_{j>i} U_{\alpha i} U_{\alpha j}^* U_{\beta i}^* U_{\beta j} [1 - \exp(-i\Delta_{ij}t)] \quad (1.9)$$

mit der Phasendifferenz

$$\Delta_{ij} = (E_i - E_j)t = \frac{m_i^2 - m_j^2}{2} \cdot \frac{L}{E}, \quad (1.10)$$

wobei E die Neutrinoenergie und L der Abstand zwischen der Neutrinoquelle und dem Detektor ist.

Neutrino-Oszillationen wurden bereits mit unterschiedlichen Experimenten nachgewiesen. Von besonderem Interesse ist dabei neben der Bestimmung der Amplitude $\sin^2 2\theta_{ij}$ besonders der Parameter Δm_{ij}^2 , d.h. die Differenz der Massenquadrate zwischen den verschiedenen Massenzuständen. Aus der Untersuchung der Oszillation atmosphärischer Neutrinos $\nu_\mu \leftrightarrow \nu_\tau$ ergibt sich hierfür [4]

$$5 \cdot 10^{-4} \text{ eV}^2 < \Delta m_{\text{atmos}}^2 < 6 \cdot 10^{-3} \text{ eV}^2, \quad (1.11)$$

und aus den Messungen der Oszillation von solaren Neutrinos $\nu_e \leftrightarrow \nu_{\mu,\tau}$ [5]

$$5 \cdot 10^{-5} \text{ eV}^2 < \Delta m_{\text{solar}}^2 < 12 \cdot 10^{-5} \text{ eV}^2. \quad (1.12)$$

Durch Oszillationsexperimente können nur Massenunterschiede analysiert werden, die absolute Neutrinomasse lässt sich durch dieses Interferenzphänomen nicht bestimmen. Für die Bestimmung der absoluten Neutrinomasse, die für die Teilchenphysik und die Entwicklung von kosmologischen Modellen eine wichtige Rolle spielt, müssen methodisch andersgeartete Experimente zur direkten Messung durchgeführt werden.

1.2 Messung der Neutrinomasse

1.2.1 Neutrinomasse aus dem Tritiumbetazerfall

Die einzige Möglichkeit um die Neutrinomasse direkt und modellunabhängig zu bestimmen basiert auf Untersuchungen zur Kinematik des β -Zerfalls in Gl. 1.3. Ausgehend von der Energie- und Impulserhaltung ist das β -Spektrum gegeben durch [6]

$$\frac{dN}{dE} = C \cdot F(Z, E) \cdot p_e(E + m_e c^2) (E_0 - E) \sqrt{(E_0 - E)^2 - m_\nu^2 c^4} \Theta(E_0 - E - m_\nu c^2), \quad (1.13)$$

wobei

$$C = \frac{g_V^2}{2\pi^3 c^5 \hbar^7} |M|^2 = \frac{G_F^2 \cos^2 \theta_C}{2\pi^3 \hbar^7 c^5} (g_V^2 + 3g_A^2). \quad (1.14)$$

G_F ist hierbei die Fermi-Konstante und θ_C der Cabibbo-Winkel, g_V und g_A bezeichnen die Vektor- und Axialvektor-Kopplungskonstanten der schwachen Wechselwirkung mit $g_V = G_F \cdot \cos \theta_C$, während M das Übergangsmatrixelement des β -Zerfalls darstellt.

Der Parameter $F(E, Z)$ ist die bekannte Fermi-Funktion, durch die die Coulomb-Wechselwirkung zwischen auslaufendem e^- und Tochterkern einschließlich der Abschirmung der Kernladung durch die Hüllenelektronen berücksichtigt wird. Diese Fermi-Funktion bewirkt eine Korrektur des β -Spektrums, die umso stärker von eins abweicht, je größer Z ist. Für einen β^- -Zerfall ist $F(E, Z) > 1$, da mit der Coulombanziehung die Energie des Elektrons vergrößert wird, so dass der Phasenraum größer als der durch E berechnete Phasenraum ist. $F(E, Z)$ ergibt in guter Approximation zu [7]:

$$F(E, Z) = \frac{x}{1 - e^{-x}}, \quad x = \frac{2\pi Z\alpha}{\beta} \quad (1.15)$$

mit der Feinstrukturkonstanten α und $\beta = v_e/c$. Mit den empirischen Werten $a_0 = 1,002037$ und $a_1 = -0,001427$ [8] wird die Fermi-Funktion beschrieben durch

$$F(E, Z) = \frac{x}{1 - e^{-x}} \cdot (a_0 + a_1\beta). \quad (1.16)$$

Außer der Fermi-Funktion und der Heaviside-Funktion Θ , die die Energieerhaltung gewährleistet, sind die restlichen Größen wie der Impuls p_e und die kinetische Energie E des Elektrons wohldefinierte und experimentell genau bestimmbare kinetische Größen. Der Endpunkt E_0 und das Neutrinomassequadrat m_ν^2 bestimmen die Form des Spektrums nahe am Endpunkt E_0 . Das Maximum der kinetischen Energie des Elektrons im Fall $m_\nu = 0$ entspricht gerade E_0 , bei einer nicht verschwindenden Neutrinomasse befindet sich der Endpunkt des β -Spektrums unterhalb von E_0 , da die zur Generierung der Neutrinomasse erforderliche Energie nicht zur Verfügung steht. Im Experiment wird der Einfluss der Neutrinomasse auf die Form des Spektrums nahe des Endpunkts E_0 mit hoher Sensitivität gemessen und dadurch die Neutrinomasse ermittelt (siehe Abb. 1.2).

In allen bisherigen Experimenten wird der β -Zerfall von Tritium benutzt. Die Gründe dafür werden in Kap. 2.1 erläutert.

1.2.2 Neutrinomassenexperimente

Im letzten Abschnitt wurde gezeigt, dass die Masse des Elektron-Antineutrinos in Experimenten zum β -Zerfall gemessen werden kann. In einem solchen Experiment wird das Spektrum der β -Elektronen mit höchster experimenteller Präzision gemessen und anhand der Kinematik des Drei-Körper-Prozesses wird auf die Energie bzw. die Masse des Neutrinos zurückgeschlossen.

Seit längerer Zeit wird mit immer besserer experimenteller Genauigkeit versucht, die Neutrinomasse über den Tritium- β -Zerfall zu bestimmen. Exemplarisch werden im Folgenden die beiden Vorgängerexperimente vorgestellt. dies sind das Mainzer [10] und das Troitsker [11] Neutrinomassen-Experiment.

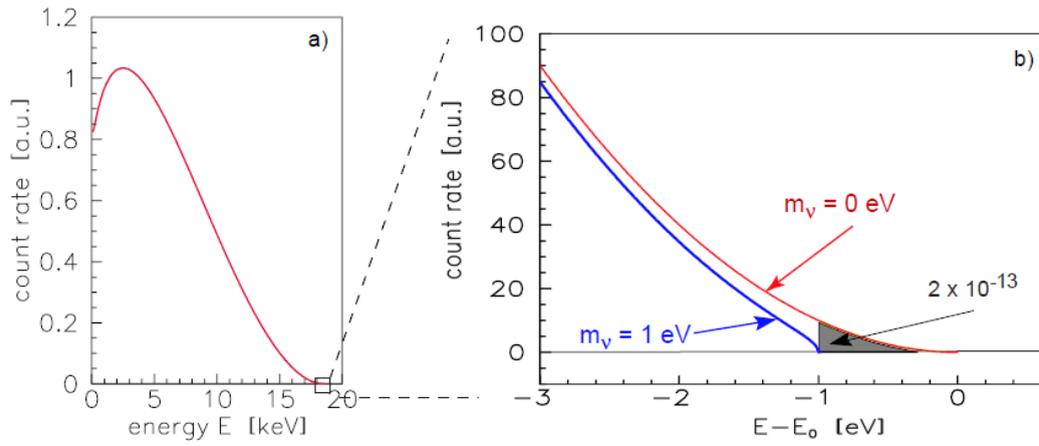


Abbildung 1.2: **Einfluss der Neutrinomasse auf das β -Spektrum nahe des Endpunkts [9].** a) das Tritium- β -Spektrum im kompletten Energiebereich und b) die Abweichung am Endpunkt aufgrund einer Masse des Antielektronneutrinos von $m_\nu = 1$ eV.

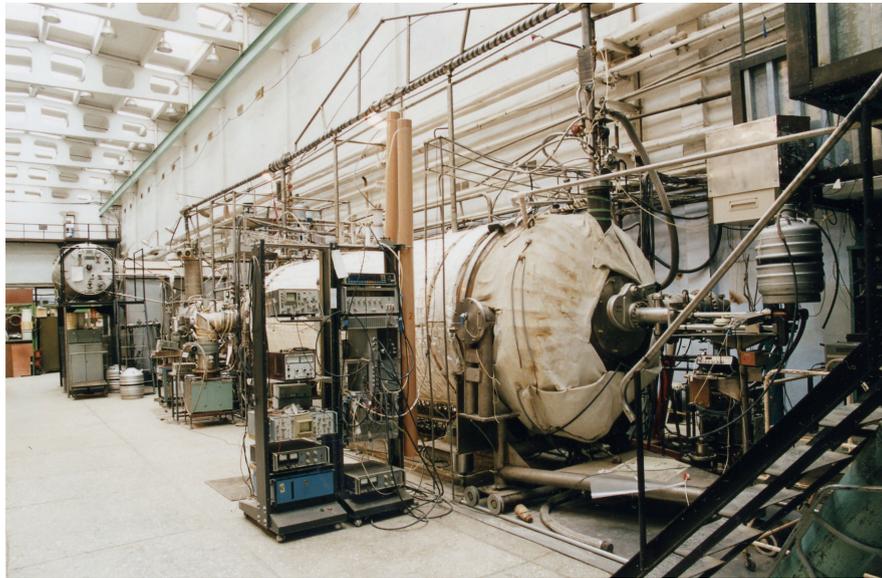


Abbildung 1.3: **Foto des Spektrometers im Troitsk Experiment.**

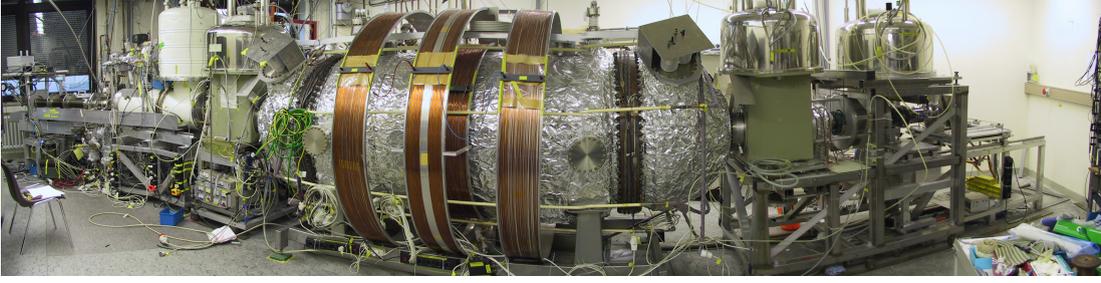


Abbildung 1.4: **Aufbau des Mainzer Neutrinomasse Experiment.**

Beide Experimente verwendeten einen MAC-E-Filter (siehe Kap. 2.1) zur Energieanalyse der β -Elektronen. Dabei sind die Ausmasse der Spektrometer kleiner und damit die experimentelle Präzision bei der β -Spektroskopie deutlich geringer als beim KATRIN Experiment. Das bis 2008 verwendete Spektrometer in Troitsk hatte einen Durchmesser von 1,5 m und eine Länge von 7 m, während es im Mainzer Experiment einen Durchmesser von 1 m und eine Länge von 4 m besitzt. Der Hauptunterschied zwischen beiden genannten Experimenten besteht in der Tritiumquelle. In Troitsk wurde eine fensterlose gasförmige Tritiumquelle verwendet, die zuvor in einem Experiment bei Los Alamos [12] entwickelt wurde. Diese Quelle befand sich in einem 3 m langen Strahlrohr mit einem Durchmesser von 50 mm. Die Quelle des Mainzer Experiments bestand aus quench kondensiertem molekularem Tritium T_2 , das in 40 Monoschichten auf ein 2,8 K kaltes Aluminiumsubstrat aufgefroren war.

Aus den Messdaten des Troitsker Experiments über eine insgesamt 200 Tage lange Messphase vom Jahr 1994 bis 2001 wurde als Ergebnis für das Quadrat der Elektron-Antineutrinomasse angegeben:

$$m^2(\bar{\nu}_e) = -2,3 \pm 2,5 \pm 2,0 \text{ eV}^2. \quad (1.17)$$

Damit ergibt sich die Obergrenze der Elektron-Neutrinomasse

$$m(\bar{\nu}_e) < 2,05 \text{ eV (95\% C.L.)}. \quad (1.18)$$

Das Mainzer Experiment hat eine vergleichbare Genauigkeit erreicht:

$$m^2(\bar{\nu}_e) = -0,6 \pm 2,2 \pm 2,1 \text{ eV}^2 \quad (1.19)$$

$$m(\nu_e) < 2,3 \text{ eV (95\% C.L.)}. \quad (1.20)$$

Die beiden Experimente haben damit das weltweit bisher beste Ergebnis für die direkte Messung der Elektron-Neutrinomasse geliefert. Ihre Sensitivität für die Neutrinomasse ist aber aufgrund der gewählten Quellstärke des Tritium und der erzielten Spektrometerraufauflösung beschränkt und erlaubt nicht, in den teilchenphysikalisch und kosmologisch besonders interessanten sub-eV Neutrinomassenbereich vorzustoßen.

²In dieser Arbeit werden Massen in eV angegeben mit der Konvention $c = 1$.

2. Das KATRIN Experiment

Das Karlsruhe Tritium Neutrino Experiment (KATRIN) [9] am Campus Nord des Karlsruher Instituts für Technologie (KIT) hat das Ziel, die Neutrinomasse mit einer bisher nicht erreichten Sensitivität von $m_\nu = 200$ meV zu bestimmen. Der Vorteil von KATRIN gegenüber anderen Experimenten ist die Modellunabhängigkeit: das Messprinzip beruht auf rein kinematischen Messgrößen sowie dem Grundsatz der Energie- und Impulserhaltung. Im Vergleich mit den Vorgängerexperimenten in Mainz und Troitsk ist die Sensitivität auf die experimentelle Observable m_ν^2 um einen Faktor 100 erhöht. Dies führt zu hohen Anforderungen an die Auslegung des Experimentes.

2.1 Messprinzip

Wie in Kap. 1.2.1 erklärt wurde, ermöglicht die Messung der Kinematik des β -Zerfalls eine modellunabhängige direkte Massenbestimmung des Elektronantineutrinos. Für das KATRIN Experiment wird das Wasserstoffisotop Tritium ${}^3\text{H}$ verwendet, wobei ein Tritiumkern in den Tochterkern He unter der Emission eines Elektrons und Elektronantineutrinos



übergeht.

Die Auswahl von Tritium als Quelle des β -Zerfall ist unter der Berücksichtigung der folgenden Gründe getroffen worden:

1. Tritium hat eine relativ geringe Halbwertszeit von $T_{1/2} = 12,3$ Jahre. Im Vergleich zum Element Rhenium-187, das den niedrigsten Endpunkt, aber eine Halbwertszeit von $T_{1/2} = 4,35 \cdot 10^{10}$ Jahre besitzt, genügt damit schon eine relativ geringe Menge Tritium, um eine ausreichende Zerfallsaktivität zu erreichen.
2. Der Endpunkt von Tritium $E_0 \approx 18,6$ keV ist der zweitniedrigste von allen Betastrahlern. Dies ist von Vorteil, da die Zählrate im Energiebereich nahe des Endpunkts nur sehr gering und proportional zu $1/E_0^3$ ist.
3. Tritium sowie der Tochterkern ${}^3\text{He}^+$ verfügen über einfache und damit präzise berechenbare Elektronenkonfigurationen. Tritium hat sehr ähnliche physikalische Eigenschaften wie das Isotop Wasserstoff, das bereits genau studiert wurde.

Da im KATRIN Experiment molekulares Tritium T_2 verwendet wird, muss die Berechnung des β -Spektrums für den Zerfall



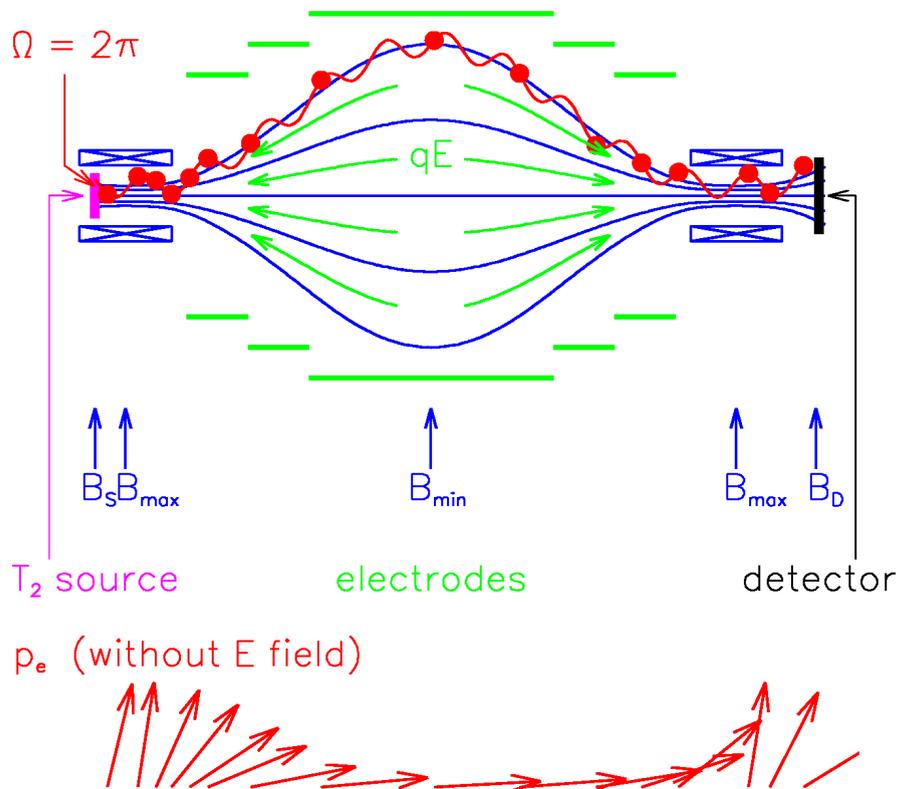


Abbildung 2.1: **Schematische Darstellung des MAC-E-Filters** [9]. Elektronen aus der Quelle werden auf Zyklotronbahnen entlang der Magnetfeldlinien von links in das Spektrometer geführt. Das Magnetfeld fällt vom Erzeugungsort der Elektronen $B_S = 3,6 \text{ T}$ zur Analysierebene $B_{\min} = 3 \cdot 10^{-4} \text{ T}$ hin über vier Größenordnungen ab. Unten wird gezeigt, wie die Orientierung des Elektronenimpuls durch den Magnetfeldgradienten variiert.

aufgrund der verschiedenen Endzustände des Tochtermoleküls ${}^3\text{HeT}^+$ geringfügig modifiziert werden (siehe Kap. 4.1.2).

Für die Vermessung des Endpunktes des Tritium β -Spektrums verwendet das KATRIN Experiment ein elektromagnetisches Spektrometer, einen sogenannten MAC-E-Filter (Magnetic Adiabatic Collimation combined with an Electrostatic Filter), der in Abb. 2.1 dargestellt ist. Der MAC-E-Filter besteht aus zwei supraleitenden Solenoiden, die ein inhomogenes Führungsfeld erzeugen, und zylindrischen Elektroden, an die eine Retardierungsspannung angelegt wird. Die durch β -Zerfälle in der Quelle emittierten Elektronen werden in Spiralbahnen um die Magnetfeldlinien geführt. Davon kann maximal die Hälfte der Elektronen den Detektor erreichen, da die andere Hälfte aufgrund der isotropen Winkelverteilung beim β -Zerfall in die entgegengesetzte Richtung emittiert wird. Die Elektronen besitzen verschiedene kinetische Energien $E = E_{\perp} + E_{\parallel}$, die sich

aus einem transversalen Anteil E_{\perp} , der sich in einer Zyklotronbewegung um die Feldlinien manifestiert, und einem longitudinalen Anteil E_{\parallel} , der die Elektronen entlang der Feldlinien bewegt, zusammensetzt. Bei einer adiabatischen Änderung der Magnetfeldstärke folgt der Erhaltungssatz des magnetischen Moments μ der Elektronen, das sich für eine Zyklotronbewegung im Magnetfeld B ergibt zu

$$\mu = \frac{e}{2m_e} |\vec{l}| = \frac{E_{\perp}}{B} = \text{const.} \quad (2.3)$$

Wird das magnetische Feld kleiner, so nimmt auch die transversale kinetische Energie E_{\perp} ab, während die zur Achse parallele Energie E_{\parallel} entsprechend zunehmen muss. Die Impulsrichtung der Elektronen, die am Anfang im starken Quellmagnetfeld isotrop verteilt ist, wird daher durch den großen Abfall zum schwachen Magnetfeld in der Analysierebene in ein quasi paralleles Impulsfeld transformiert.

Mit einer Gegenspannung U_0 an den Elektroden werden die in das Spektrometer eintretenden Elektronen abgebremst. Nur die Elektronen mit einer kinetischen Energie größer als die potentielle Energie des Spektrometers qU haben die Möglichkeit, dass sie die Retardierungsspannung überwinden und vom Detektor nachgewiesen werden. Ein MAC-E-Filter funktioniert daher als Hochpass. Dementsprechend kann das integrale Betaspektrum damit analysiert werden. Da das Magnetfeld in der Analysierebene nicht absolut verschwinden kann (Erhaltung des magnetischen Flusses), verbleibt ein gewisser Anteil der transversalen Energie. Dadurch ergibt sich die Energieauflösung ΔE eines solchen Spektrometers durch

$$\frac{\Delta E}{E} = \frac{B_{\min}}{B_{\max}}. \quad (2.4)$$

Für die gasförmige Tritiumquelle ist es vorteilhaft, wenn die Elektronen möglichst kurze Wege in der Quelle zurücklegen, um die Wahrscheinlichkeit von inelastischen Streuungen mit den Tritiummolekülen zu verringern. Durch geeignete Wahl des Magnetfelds B_S werden Elektronen mit einem großen Startwinkel relativ zur Achse (welche große radiale Impuls besitzen und damit langen spiralen Weg erfahren) durch den magnetischen Spiegeleffekt reflektiert. Der maximale Startwinkel θ_{\max} , mit dem die Elektronen in den Spektrometer eintreten können, ergibt sich zu

$$\sin \theta_{\max} = \sqrt{\frac{B_S}{B_{\max}}}. \quad (2.5)$$

2.2 Überblick des Experiments

Das theoretische Messprinzip eines MAC-E-Filters wurde im letzten Abschnitt vorgestellt. An dieser Stelle wird nun die experimentelle Umsetzung bei KATRIN erläutert. Der Aufbau des KATRIN Experiments besteht aus fünf Hauptkomponenten, die über eine Gesamtlänge von 70 m miteinander kombiniert werden (siehe Abb. 2.2). Das hochreine molekulare Tritium wird in der Mitte der Tritiumquelle injiziert und an den beiden Enden über die Pumpstrecken zum größten Teil abgepumpt. In der Transportstrecke werden die restliche Tritiummoleküle durch die DPS2-F und CPS weiter abgepumpt, so dass der Gasfluss um einen weiteren Faktor von 10^{12} reduziert wird. Außerdem werden die beim β -Zerfall entstehenden Elektronen magnetisch vollständig adiabatisch zum

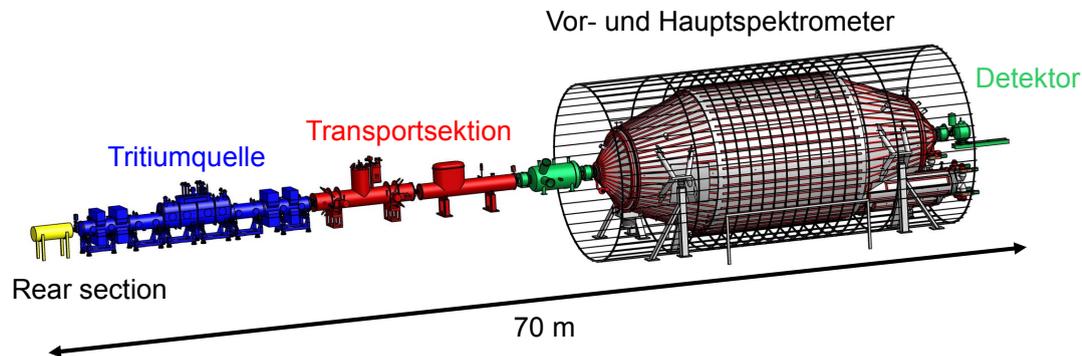


Abbildung 2.2: **Aufbau des KATRIN Experiments** [9]. Im KATRIN Experiment spielen die fünf Hauptkomponenten spezifische Rollen: die Tritiumquelle (WGTS) enthält das hochreine molekulare Tritium. Die Transportsektion leitet die aus der Quelle ausgetretenen Elektronen weiter, während die Tritiummoleküle durch Turbomolekularpumpen (DPS) und Kryosorption (CPS) entfernt werden. Wenn die Elektronen das Vor- und Hauptspektrometer passieren, werden sie schließlich vom Detektor nachgewiesen. Die Rearsection dient zur Überwachung der Quelle.

Vor- und Hauptspektrometer weitergeleitet. Die zwei Spektrometer arbeiten nach dem MAC-E-Filter Prinzip. Im Vorspektrometer werden alle niederenergetischen Elektronen herausgefiltert, so dass nur die für die Analyse interessanten Elektronen nahe dem Endpunkt das Hauptspektrometer erreichen können. Im Hauptspektrometer findet dann die präzise Energiemessung statt. Die Elektronen, die ausreichend Energie besitzen, um das Spektrometerpotential zu überwinden, werden im Detektor nachgewiesen. Im Folgenden werden die einzelnen Komponenten vorgestellt.

2.2.1 Tritiumquelle

Im KATRIN Experiment wird eine fensterlose gasförmige Tritiumquelle (WGTS) verwendet, die eine hohe Luminosität und geringe systematische Unsicherheiten ermöglicht. Solch eine Tritiumquelle wurde erstmals im LANL Experiment [13] eingeführt und später im Troitsk Experiment [14] weiter entwickelt.

Aufbau der WGTS

Der Vorteil der fensterlosen WGTS ist, dass die Elektronen beim Durchgang durch die WGTS neben den inelastischen und elastischen Stößen mit den Gasatomen und -molekülen keine Energieverluste erfahren, da die beiden Enden offen sind. Allerdings werden durch dieses Prinzip zusätzliche extrem effektive Reduktionsprozesse für die Tritiummoleküle benötigt, um den Untergrund aus den β -Zerfällen im Spektrometer zu



Abbildung 2.3: Der WGTS-Kryostat: Ansichtszeichnung der ACCEL Instrum. GmbH.

vermeiden. In Abb. 2.4 wird der Aufbau der WGTS schematisch gezeigt.

Die WGTS besteht aus einem 10 m langen Strahlrohr mit dem inneren Durchmesser von $d = 90$ mm und den an beiden Enden angeschlossenen differentiellen Pumpstrecken (DPS1-F/DPS1-R). In der Mitte der WGTS wird das Tritium in einer Injektionskammer durch mehr als 400 kleine Löcher bei niedrigem Druck ($p_{in} = 3,35 \cdot 10^{-3}$ mbar) eingeleitet. Von dort diffundieren die Tritiummoleküle in beide Richtungen und werden am Ende von den an die WGTS angeschlossenen Turbomolekularpumpen mit einem Gesamtreduktionsfaktor von 100 abgepumpt. Dieses abgepumpte Tritium wird durch einen inneren Tritiumkreislauf wieder in den Tritium-Behälter zugeführt, der für die unterbrechungsfreie Zuführung des Tritiums dient. Die nach der DPS1-F Einheit noch verbleibenden Tritiummoleküle bewegen sich weiter in die Transportsektion.

Die WGTS wird von mit Flüssig-Helium gekühlten supraleitenden Solenoiden umgeben (siehe Abb. 2.4), die ein Magnetfeld $B_S = 3,6$ T zur adiabatischen Führung der Elektronen zum Spektrometer erzeugen.

Eine niedrige kryogene Temperatur der Tritiumquelle von $T = 30$ K wird ausgewählt, damit auch bei niedrigem Druck die gewünschte Tritiumsäulendichte¹ erreicht werden kann. Bei niedriger Temperatur besitzt ein Molekül außerdem eine geringere thermische Geschwindigkeit und damit wird der Dopplereffekt verringert. Trotzdem kann die Temperatur der Quelle nicht noch weiter abgesenkt werden, da es sonst zur Clusterbildung

¹Die Säulendichte ρd ist eine Größe, die die entlang der Quellachse die integrierte Dichte an Quellmolekülen pro Einheitsfläche cm^2 beschreibt.

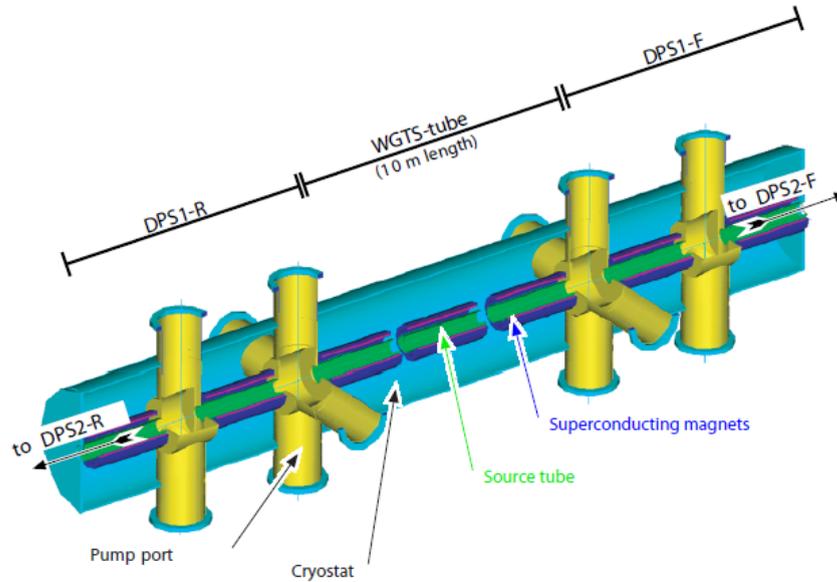


Abbildung 2.4: Schematischer Aufbau der WGTS [9].

der Tritiummoleküle (T_4 , T_6 , T_8 , ...) kommt oder Tritium an den kalten Wänden adsorbiert wird. Zur Temperaturstabilisierung der WGTS werden Kühlrohre, in denen ein Zwei-Phasen-Gemisch von Neon als Arbeitsmedium zirkuliert, auf beiden Seiten des Strahlrohrs angebracht (siehe Abb. 2.5).

Im für diese Arbeit besonders wichtigen Kryptonmodus (Kap. 3) wird gasförmiges Krypton als Kalibrationsquelle in die WGTS eingebracht. Um das Anfrieren der Kryptonatome zu vermeiden, muss die Temperatur der WGTS mit einer Tritium-Krypton-Quelle auf 120 K erhöht werden. In diesem Temperaturbereich wird das flüssige Neon als Arbeitsmedium des Kühlsystems durch flüssiges Argon ersetzt. Das gesamte System mit Strahlrohr, Kühlsystem und Tritiumzuleitung wird von einem inneren Wärmeschild eingeschlossen, mit dem die Wärmeübertragung und Wärmestrahlung abgeschirmt weitgehend werden können.

Eigenschaften der Tritiumquelle

Die spezifische Eigenschaften der Tritiumquelle im KATRIN Experiment sind ausgelegt für eine optimierte Sensitivität für die Neutrinomasse m_ν . Das vom Tritiumlabor Karlsruhe bereitgestellte Tritium hat die geforderte Tritiumreinheit von $\epsilon_{T_2} > 95\%$. Um die Anzahl der Tritiummoleküle in der WGTS während der Messzeit konstant zu halten, muss der Einlassdruck p_{in} sowie der Tritiumdurchsatz q über lange Zeiträume konstant gehalten werden. Für die gewünschte Säulendichte $\rho d = 5 \cdot 10^{17} \text{ cm}^{-2}$ ergeben sich $p_{in} = 3,35 \cdot 10^{-3} \text{ mbar}$ und $q = 1,9 \text{ mbar l/s}$.

Quellpotential in der WGTS

Die Quellaktivität von Tritium ergibt sich unter diesen Rahmenbedingungen zu rund 10^{11} Zerfällen pro Sekunde. Beim Durchgang durch die Tritiumquelle kann ein β -

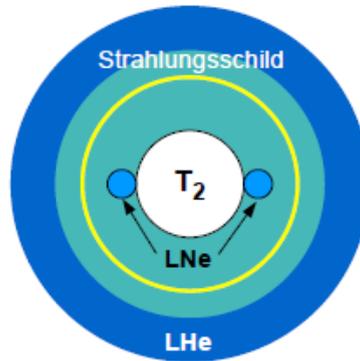


Abbildung 2.5: Schematischer Querschnitt der WGTS mit Strahlrohr, Kühlsystem und Wärmeschild [15].

Elektron durch Ionisation durchschnittlich 15 sekundäre Elektron-Ion-Paare erzeugen. Obwohl die meisten der positiven Ionen (T^+ , He^+ , $(^3HeT^+$, T_2^+ , ...) durch Rekombinationen mit Elektronen kompensiert werden, verbleiben dennoch Raumladungen innerhalb der WGTS, die ein unbekanntes elektrisches Quellpotential erzeugen. Mit der bestehenden KATRIN Simulation [9] wurde gezeigt, dass die von Raumladungen verursachte Potentialvariation in der WGTS nicht größer als 10 mV sein kann.

Zur Untersuchung des Quellpotentials ist eine direkte experimentelle Messung dieses essentiellen Parameters unerlässlich. Ein bereits in früheren Experimenten verfolgter Ansatz ist die Messung der Konversionselektronen aus ^{83m}Kr , die in dieser Arbeit detailliert betrachtet wird.

2.2.2 Transportsektion

An den beiden Enden des Strahlrohrs der WGTS wird die differentielle Pumpstrecke DPS1-F (vorne) und DPS1-R (hinten) angeschlossen. Auf der Rückseite schließt sich an die DPS1-R die Rear Section an, die zur Systemüberwachung zuständig ist. Auf der anderen Seite werden die aus der WGTS emittierten Zerfallselektronen durch das Magnetfeld adiabatisch zum Spektrometer weitergeleitet. Da zwischen der Quelle und dem Spektrometer kein trennendes Fenster vorhanden ist, wird die Anforderung des Ultrahochvakuums im Spektrometer nur durch das ständige Abpumpen von Tritium ermöglicht. Nur mit der DPS1-F kann der gewünschte Reduktionsfaktor von 10^{14} offensichtlich nicht erreicht werden. Somit wird eine Transportsektion, die für die weitere Verringerung des Tritiumflusses und die magnetische Führung der Elektronen dient, zwischen Quelle und Spektrometer installiert. Die Transportsektion besteht aus der differentielle Pumpstrecke DPS2-F und der kryogenen Pumpstrecke CPS, deren Aufbau in Abb. 2.6 schematisch dargestellt wird.

Differentielle Pumpstrecke

Das erste Pumpsystem nach den WGTS-Kryostate ist die differentielle Pumpstrecke DPS2-F mit einem System von vier in Serie geschalteten Turbomolekularpumpen, die je-

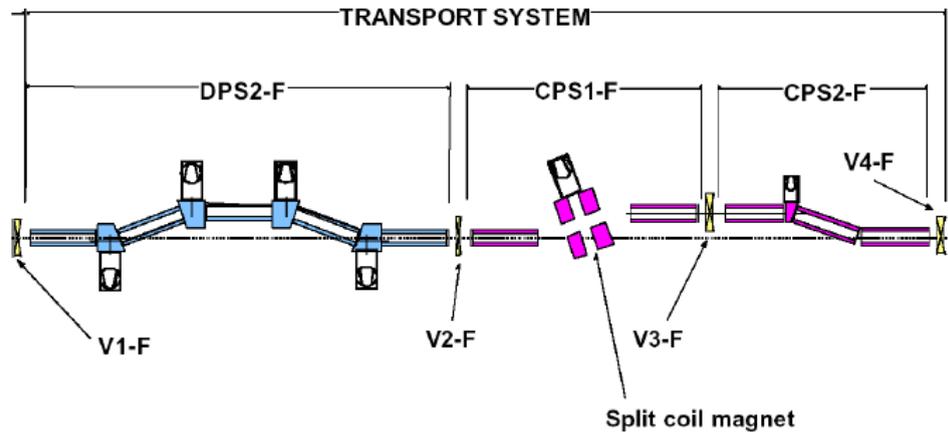


Abbildung 2.6: Der Aufbau der Transportsektion mit DPS2-F und CPS [9].

weils eine Saugleistung von 2000 l/s besitzen. Mit der DPS2-F wird der Tritium-Gasfluss um einen Faktor von 10^5 vermindert. Zusammen mit DPS1-F (Reduktionsfaktor von ca. 100) am Ende der WGTS beträgt der Reduktionsfaktor durch aktives Pumpen 10^7 . Für eine gute Effektivität sind die einzelnen Strahlrohre in der DPS2-F zueinander um einen Winkel von 20° geneigt (siehe Abb. 2.7), so dass die Tritiummoleküle nicht auf einem direkten Weg durch die DPS2-F hindurch gehen können. Für die Führung der Elektronen sind daher entsprechende geneigte Führungsmagnete notwendig. Die DPS befindet sich seit Mitte 2009 am KIT. Derzeit laufen Testmessungen um ihre Pump- und Transmissionseigenschaften zu charakterisieren.

Kryopumpstrecke

In Abb. 2.6 wird gezeigt, dass an die DPS2-F eine kryogene Pumpstrecke CPS geschaltet wird, die die aus der DPS austretenden Tritiummoleküle adsorbieren soll.

In der CPS werden die Tritiummoleküle auf der mit flüssigem Helium gekühlten Wandoberfläche bei 4 K absorbiert. Dazu wird eine Argonfrostschiicht auf die Innenseite des Strahlrohrs der CPS aufgebracht, um die auftreffenden Tritiummoleküle effektiv zu binden. Zusätzlich zum Argonfrost sind die einzelnen Strahlrohrelemente der CPS wiederum um einen Winkel von 20° gegeneinander geneigt, so dass alle Tritiummoleküle mindestens einmal auf der Oberfläche auftreffen können, wenn sie die CPS durchqueren (siehe Abb. 2.8). Der Gasfluss wird durch die CPS um einen weiteren Faktor von 10^7 reduziert, mit dem der letztendliche Reduktionsfaktor 10^{14} erreicht wird.

2.2.3 Spektrometer

Eine wichtige Komponente des KATRIN Experiments sind die elektrostatischen Spektrometer. Diese sind nach dem Prinzip des MAC-E-Filters ausgelegt und zuständig für die Energieanalyse der Elektronen. Die Elektronen gelangen zuerst in das Vorspektrometer, das bei einer festen Spannung von ca. 18 kV betrieben wird. Dort werden

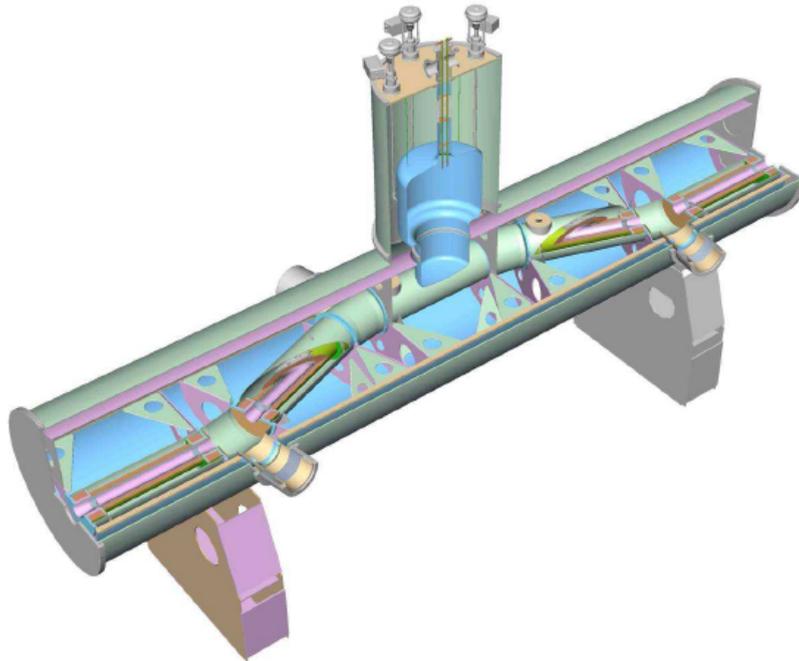


Abbildung 2.7: 3D-Modell der DPS2-F [9].

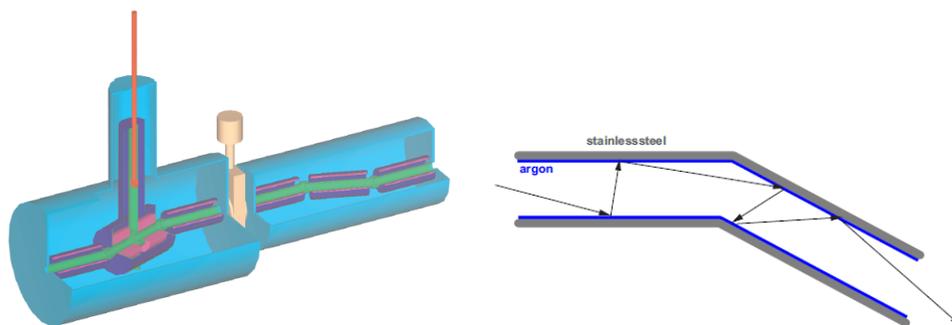


Abbildung 2.8: a) 3D-Modell der CPS System. Die CPS1-F und CPS2-F werden durch einem Sicherheitsventil geschaltet. b) Das Prinzip der CPS [9]. Aufgrund des Neigungswinkels von 20° treffen die Gasmoleküle auf die gekühlte Wände und werden absorbiert.

die niederenergetische Elektronen reflektiert, so dass lediglich etwa 10^4 Elektronen pro Sekunde das Hauptspektrometer erreichen. Danach gelangen die restlichen Elektronen in das Hauptspektrometer, in dem die Untersuchung des Energiebereichs nahe am Endpunkt des Tritium- β -Zerfalls durchgeführt wird. Parallel zum Hauptspektrometeraufbau wird das Monitorspektrometer betrieben, an dem dieselbe Hochspannung wie am Hauptspektrometer anliegt. Es verwendet eine monoenergetische Kalibrationsquelle z.B. ^{83m}Kr für die kontinuierliche Überwachung der Hochspannungsstabilität (siehe Kap. 3.4).

Vorspektrometer

Von der WGTS-Quelle treten mehr als 10^{11} Elektronen pro Sekunde aus, von denen nur ein winziger Bruchteil für die Neutrinomassenbestimmung interessant ist. Die übrigen Elektronen können bei ihrer Energieanalyse im Hauptspektrometer durch Stöße mit den Restgasmolekülen zusätzliche Untergründereignisse erzeugen. Zur Reduktion dieser störenden Elektronen wird das Vorspektrometer mit einer um einige 100 V niedrigeren Hochspannung als am Hauptspektrometer betrieben.

Das Vorspektrometer ist ein zylindrischer Tank mit der Länge von 3,38 m und dem inneren Durchmesser von 1,68 m, der mit Keramikisolatoren auf einer Tragkonstruktion aus Edelstahl befestigt ist (siehe Abb. 2.9). Zwei zylindrische Pumpstutzen für eine NEG-Getterpumpe und die UHV-Instrumentierung werden direkt an den Vakuumtank angebracht, damit eine Hochspannung von bis zu 35 kV angelegt werden kann. Zur Reduktion des Untergrunds und Feinregulierung des elektrischen Felds wird zusätzlich ein inneres Elektrodensystem montiert. An dieses Elektrodensystem kann ein niedrigeres Potential als die Tankwand gelegt werden, so dass aus der Tankwand austretende niederenergetische Elektronen² aufgrund der Potentialbarriere das Spektrometerinnere nicht erreichen können.

Das Vorspektrometer dient zudem als Prototyp für das Hauptspektrometer. Insbesondere die Funktion des inneren Drahtelektrodensystems und das Design der Erdelektroden wurde intensiv am Vorspektrometer getestet.

Hauptspektrometer

An das Vorspektrometer schließt sich das Hauptspektrometer an. An den Enden der beiden UHV-Rezipienten befinden sich supraleitenden Spule, die das Führungsmagnetfeld innerhalb der Spektrometer liefern. Das KATRIN Hauptspektrometer hat eine Länge von 23,3 m und einen Innendurchmesser von 9,8 m. In der Analysierebene beträgt die Magnetfeldstärke $B_A = 0,3$ mT. Dies ist der Grund für den großen Spektrometerradius, da er bei B_A den magnetischen Flussschlauch von 191 Tcm^2 transportieren muss. Die Energieauflösung ergibt sich nach dem MAC-E-Filter Prinzip zu $\Delta E = 0,93$ eV. Im Betrieb wird routinemässig ein Ultrahochvakuum mit einem Enddruck von 10^{-11} mbar realisiert.

Innerhalb des Hauptspektrometers wird derzeit ein Drahtelektrodensystem montiert, um die Elektronen aus der Tankwand abzuschirmen und eine präzise Feineinstellung

²Kosmische Strahlung wechselwirkt in der Tankwand und kann dabei niederenergetische Elektronen erzeugen, die in das Spektrometer gelangen können.

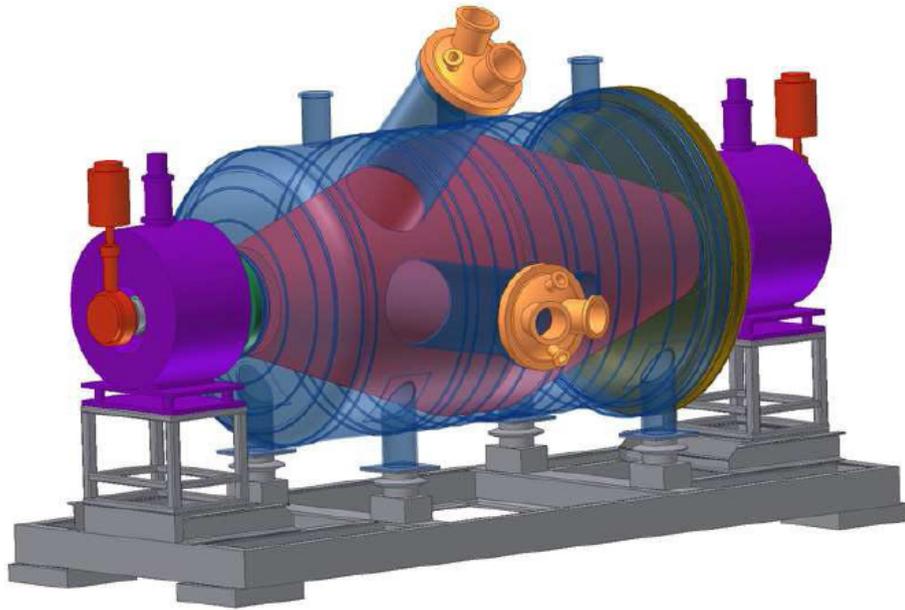


Abbildung 2.9: 3D-Modell des Vorspektrometers [9].



Abbildung 2.10: Foto des KATRIN Hauptspektrometers mit Luftspulensystem.

des elektrischen Felds zu ermöglichen. Um das Spektrometer wurde ein großes Luftspulensystem (EMCS) aufgebaut, um das Erdmagnetfeld zu kompensieren. Ein zweites Spulensystem (LFCS) ist zur Strahlachse koaxial für die Feinformung des Magnetfeldes installiert. Das Hauptspektrometer befindet sich momentan in der Vorbereitungsphase für die Testmessungen, die im Frühjahr 2011 beginnen werden.

Monitorspektrometer

Das Monitorspektrometer basiert auf dem modifizierten Spektrometer des Mainzer Neutrinomassenexperiments. Es kann die an der Analysierebene angelegte Hochspannung überwachen. Hierzu wird die gleiche Hochspannung an das Hauptspektrometer und das parallel geschaltete Monitorspektrometer gelegt. Durch die kontinuierliche Messung der monoenergetischen Zerfallselektronen aus einer Kalibrationsquelle im Monitorspektrometer, kann die Schwankung der Hochspannung registriert werden. Die Kalibration kann mit Photoelektronen aus einer $^{241}\text{Am}/\text{Co}$ -Quelle oder Konversionselektronen aus ^{83m}Kr durchgeführt werden. Das Monitorspektrometer befindet sich ebenfalls bereits am KIT.

2.2.4 Detektor und Rearsection

Detektor

Der Detektor des KATRIN Experiments schließt den Aufbau hinter dem Hauptspektrometer ab. Es handelt sich um eine kreisförmige, segmentierte, monolithische Silizium PIN-Diode mit einem Durchmesser von 9 cm. Die gleich großen Segmente sind in zwölf konzentrischen Ringen mit je zwölf Pixeln angeordnet. Zusammen mit dem in vier Pixel unterteilten Zentrum stehen 148 Pixel zum Nachweis der transmittierten Elektronen zur Verfügung. Durch diese symmetrische Aufteilung ist eine radiale und azimutale Auflösung möglich, wodurch mögliche Abweichungen von der axialen Symmetrie bzw. systematische Störeffekte entdeckt werden können. Die Energieauflösung des Detektors beträgt $\Delta E = 600 \text{ eV}$ für 18,6 keV Elektronen.

Rearsection

Am rückwärtigen Ende des KATRIN Strahlführungssystems befindet sich die Rearsection, die direkt an die WGTS angeschlossen wird. Sie beinhaltet mehrere spezifische Monitorsysteme, mit denen die Quellaktivität und die Transmissionsfunktion des Spektrometers überwacht werden können. Zudem wird mit der in ihm installierten „Rear plate“ das Potential der WGTS definiert.

3. Physik des Kryptonmodus der WGTS

Für die hochpräzise Messung der Neutrinomasse im KATRIN-Experiment ist ein genaues Verständnis der komplexen Systemparameter nötig. Insbesondere muss die Retardierungsspannung des Hauptspektrometers kalibriert, die Stabilität der Hochspannung überwacht und detaillierten Eigenschaften der WGTS ständig geprüft werden. Von besonderem Interesse ist in dieser Arbeit ein mögliches Quellpotential durch Raumladungseffekte in der WGTS, das eine nicht zu vernachlässigende systematische Verschiebung des Neutrinomassenquadrats verursachen kann. Für diese Ziele braucht man zusätzlich eine Elektronenquelle, die die Elektronen mit genau definierter Energie erzeugen kann. Als eine geeignete isotrop emittierende Elektronenquelle bietet sich ^{83m}Kr an. Es entsteht über Elektroneneinfang aus dem Isotop $^{83}_{37}\text{Rb}$ und zerfällt durch elektromagnetische Übergänge mit Halbwertzeiten von 1,83 Stunden ($E3$ -Übergang) und 154,4 ns ($M1 + E2$ Übergang), in dem außer γ -Quanten auch Elektronen durch einen Konversionsprozeß emittiert werden können. Sie werden als Konversionselektronen der ^{83m}Kr -Quelle bezeichnet. In Kap. 3.1 werden zunächst die physikalischen Grundlagen der Konversionselektronen erläutert. Die Eigenschaften der in den Neutrinomassenexperimenten verwendeten ^{83m}Kr -Konversion werden in Kap. 3.2 diskutiert.

Die Konversionselektronen erzeugen deutliche und einfach erkennbare Linienspektren, die aber unter dem Einfluss von Effekte in der Atomhülle, z.B. durch Shake Off/Up-Prozesse (Kap. 3.3) und den Auger-Effekt stehen. Diese Effekte lassen das gemessene Zerfallsspektrum komplizierter aussehen. Für eine genaue Simulation sind die Messergebnisse der ^{83m}Kr -Konversionselektronen aus anderen Experimente hilfreich, die in Kap. 3.4 erläutert werden. Am Schluss wird die Verwendung von Krypton als Kalibrationsquelle am KATRIN Experiment in Kap. 3.5 vorgestellt.

3.1 Grundlagen

3.1.1 Innere Konversionselektronen

Kerne können auf verschiedene Weise angeregt werden [16]. Wenn die Anregungsenergie unter der Schwelle für die Emission von geladenen Teilchen und Neutronen liegt, kann der Kern die Anregungsenergie nur durch die elektromagnetische Wechselwirkung abgeben, in dem er entweder ein γ -Quant aussendet oder alternativ die Energie auf ein Hüllenelektron überträgt. Der letztere Prozess, in dem Elektronen anstelle des Quants emittiert werden, heißt innere Konversion, die emittierten Elektronen heißen dementsprechend Konversionselektronen.

Die angeregten Kernzustände übertragen bei der inneren Konversion die Energie durch die Coulomb-Wechselwirkung direkt auf ein Hüllenelektron, wobei die kinetische Energie E_{kin} des emittierten Elektrons gleich der Anregungsenergie E_γ des Kernes abzüglich der Bindungsenergie E_B des Elektrons in der betreffenden Schale ist:

$$E_{\text{kin}} = E_\gamma - E_B \quad (3.1)$$

In Abhängigkeit von der Hauptquantenzahl n der Elektronenschale, in der die Emission erfolgt, werden die Konversionselektronen als K , L , M oder N -Konversion usw. bezeichnet. Als ein Alternativprozess zur Emission eines γ -Quants hat der Konversionsprozess eine Übergangswahrscheinlichkeit λ_e mit

$$\lambda_e = \alpha \lambda_\gamma \quad (3.2)$$

$$\alpha = \frac{\dot{N}_e}{\dot{N}_\gamma}, \quad (3.3)$$

mit der Emissionswahrscheinlichkeit des γ -Quants λ_γ und Zählraten der emittierten Elektronen \dot{N}_e bzw. γ -Quanten \dot{N}_γ . Die Größe α ist dabei der Konversionskoeffizient und kann jeden Wert ≥ 0 annehmen. Desweiteren werden α_K , α_L , α_M , α_N als die Verhältnisse der Zahl der Konversionselektronen aus der jeweiligen Elektronenschale zur Zahl der γ -Quanten bezeichnet. Konversionskoeffizienten sind eine wichtige experimentelle Beobachtungsgröße bei radioaktiven Zerfällen. Besonders anhand der relativen Verhältnisse von Konversionskoeffizienten können die Verhältnisse von Linienintensitäten im Elektronenspektrum bestimmt werden. Ferner kann mit der gesamten Zählrate der Konversionselektronen die einzelne Linienintensität bzw. die Zählraten der Emission aus speziellen Elektronenschalen theoretisch berechnet werden. Konversionskoeffizienten sind unabhängig von einem speziellen Kernmodell, aber stark abhängig vom Charakter des elektromagnetischen Übergangs. Daher muss für die Messung der Konversionskoeffizienten die jeweils Multipolarität des entsprechenden γ -Übergangs bestimmt werden.

3.1.2 ^{83m}Kr -Konversionselektronen

Die Konversionselektronen aus Krypton entstehen beim Zerfall von ^{83m}Kr in den Grundzustand, worin ^{83m}Kr das Kernisomer ist (Kernisomere werden durch ein „m“ für „metastabil“ neben der Massenzahl bezeichnet), das aus dem Isotop $^{83}_{37}\text{Rb}$ durch den nachfolgenden Elektroneneinfangsprozess entsteht:



Abb 3.1 zeigt das Zerfallsschema. Nach dem Zerfall entsteht zuerst der isomere Zustand $I = \frac{1}{2}^-$ mit dem Energieniveau von 41,5 keV. Mit der Halbwertszeit von 1,83 h kann dieser angeregte Zustand in den Zwischenzustand $I = \frac{7}{2}^+$ durch die beiden zuvor beschriebenen elektromagnetischen Prozesse übergehen, in denen eine Zerfallsenergie von 32,1517 keV

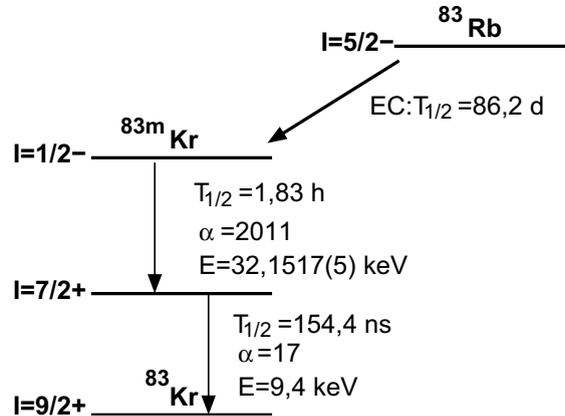


Abbildung 3.1: Das Zerfallsschema von $^{83}_{37}\text{Rb}$ und ^{83m}Kr [17]. Durch den Zerfall des Mutterisotops $^{83}_{37}\text{Rb}$ entsteht ^{83m}Kr . Die weiteren Zerfälle des isomeren Zustands und die entsprechende Halbwertzeiten T_i , Konversionskoeffizienten α_i und übertragende Energien E_i sind hier dargestellt.

übertragen wird. Weiterhin kann der neue Zwischenzustand mit der Halbwertzeit von 154,4 ns in den Grundzustand $I = \frac{9}{2}^+$ übergehen, wobei eine Energie von 9,4059 keV abgegeben wird [18].

Im ersten Übergang muss die elektromagnetische Multipolordnung l zur Erhaltung des Drehimpulses der Auswahlregel

$$|I_1 - I_2| \leq l \leq I_1 + I_2 \quad (3.5)$$

$$\rightarrow 3 \leq l \leq 4 \quad (3.6)$$

folgen.

Außer dem Drehimpuls muss beim Emissionsprozess die Parität erhalten bleiben. Für Übergänge von einem Kernzustand 1 mit Parität π_1 zu einem Kernzustand 2 mit Parität π_2 gilt

$$\pi_1 = (-1)^l \pi_2 \text{ für } El\text{-Strahlung} \quad (3.7)$$

$$\pi_1 = (-1)^{l+1} \pi_2 \text{ für } Ml\text{-Strahlung.} \quad (3.8)$$

Aufgrund der Paritätsregel kann E - und M -Strahlung gleicher Multipolordnung nicht zusammen in einem Übergang emittiert werden. Nach diesen Auswahlregeln können bei einem Übergang von $I = \frac{1}{2}^-$ zu $I = \frac{7}{2}^+$ gleichzeitig $E3$ - und $M4$ -Strahlung emittiert werden. Die Übergangswahrscheinlichkeit nimmt beim Schritt zur nächst höheren Multipolordnung jeweils mit einem Faktor $2,25 \cdot 10^{-4}$ ab [19]. Außerdem ist sie für magnetische Strahlung stets um einige Zehnerpotenzen kleiner als für elektrische Strahlung gleicher Multipolarität. Aus diesen Gründen hat die $M4$ -Strahlung gegenüber der $E3$ -Strahlung eine sehr kleine Übergangswahrscheinlichkeit. Im Fall von Konversionselektronen aus Krypton mit einer Energie von 32,15 keV braucht daher nur die $E3$ -Komponente betrachtet werden. Als Konversionskoeffizient ergibt sich dann $\alpha = \alpha(E3) \approx 2011$ [20]. Im

Übergang vom Zustand $I = \frac{7}{2}^+$ zu $I = \frac{9}{2}^+$ sind mehrere Multipolstrahlungen ohne Paritätsänderung erlaubt, z.B. $M1$, $M3$, $E2$, $E4 \dots$, in denen nur die Übergangswahrscheinlichkeiten der $M1$ - und $E2$ -Übergang in die gleiche Größenordnung kommen und mit hinreichender Statistik beobachtet werden können. Somit wird die innere Konversion mit Energie von 9,4 keV als $(M1+E2)$ Übergang bezeichnet. Als Konversionskoeffizient ergibt sich dann $\alpha = a_1\alpha(M1) + a_2\alpha(E2) \approx 17$ [20], wobei a_1 und a_2 die relativen Intensitäten bezeichnen. Nach den Auswahlregeln ist der Zerfall vom angeregten Zustand $I = \frac{1}{2}^-$ direkt in den Grundzustand $I = \frac{9}{2}^+$ durch den $E4$ -Übergang auch erlaubt, aber wegen der gegenüber anderen Übergänge geringen Übergangswahrscheinlichkeit ist er an dieser Stelle vernachlässigbar.

3.1.3 ^{83m}Kr -Konversionselektronen Spektrum

Konversionselektronen, die aus verschiedenen Schale emittiert werden, befinden sich aufgrund ihrer nicht identischen Bindungsenergie in unterschiedlichen Endzuständen. Deshalb entstehen verschiedene Spektrallinien. Diese Linien werden nach der Schale bezeichnet, die Elektronen aussendend, d.h. K -, L_I und L_{II} -Linie usw.

Nach der Energie-Zeit-Unschärferelation können die emittierten Elektronen nicht monoenergetisch sein, sondern besitzen eine Energie, die um einem zentralen Wert verteilt ist. Im Spektrum ergeben sich deshalb schmale Linien. Die Linienform folgt aus der Lösung der Schrödinger Gleichung [21]. Die Zeitabhängigkeit der Wellenfunktion eines Elektrons mit Energie E ist gegeben durch

$$\tilde{f}(E) \exp(-\frac{i}{\hbar}Et). \quad (3.9)$$

In der klassische Theorie ist die Zeitabhängigkeit $f(t)$ eines Wellenzuges, den ein schwingender Oszillator aussendet, durch

$$f(t) \propto \exp(-\frac{\gamma t}{2}) \cos(2\pi\nu_0 t) \quad (3.10)$$

gegeben. Dies kann gleicherweise als eine klassische Näherung der kohärenten Elektronen behandelt und in einzelne Wellenfunktionen mit unterschiedlicher Energie zerlegt werden,

$$f(t) = \int_{-\infty}^{+\infty} \tilde{f}(E) \exp(-\frac{i}{\hbar}Et) dE \quad (3.11)$$

so dass die Intensität $|\tilde{f}(E)|^2$ des Elektrons mit Energie E durch Fourier-Transformation als

$$|\tilde{f}(E)|^2 \propto \frac{1}{(E - 2\pi\hbar\nu_0)^2 + \gamma^2/4} \quad (3.12)$$

angegeben werden kann.

Unter Normierung wird eine Spektrallinie der Konversionselektronen mit der Linienlage E_e und Linienstärke A durch eine Lorentzkurve beschrieben:

$$L(E, E_e, \Gamma_e) = \frac{dN}{dE} = A \cdot \frac{\Gamma_e}{2\pi} \cdot \frac{1}{(E - E_e)^2 + \Gamma_e^2/4}. \quad (3.13)$$

Dabei wird die Größe γ durch die Linienbreite (FWHM) Γ_e ersetzt wird.

Der durch die thermische Bewegung entstehende Dopplereffekt und andere stochastische

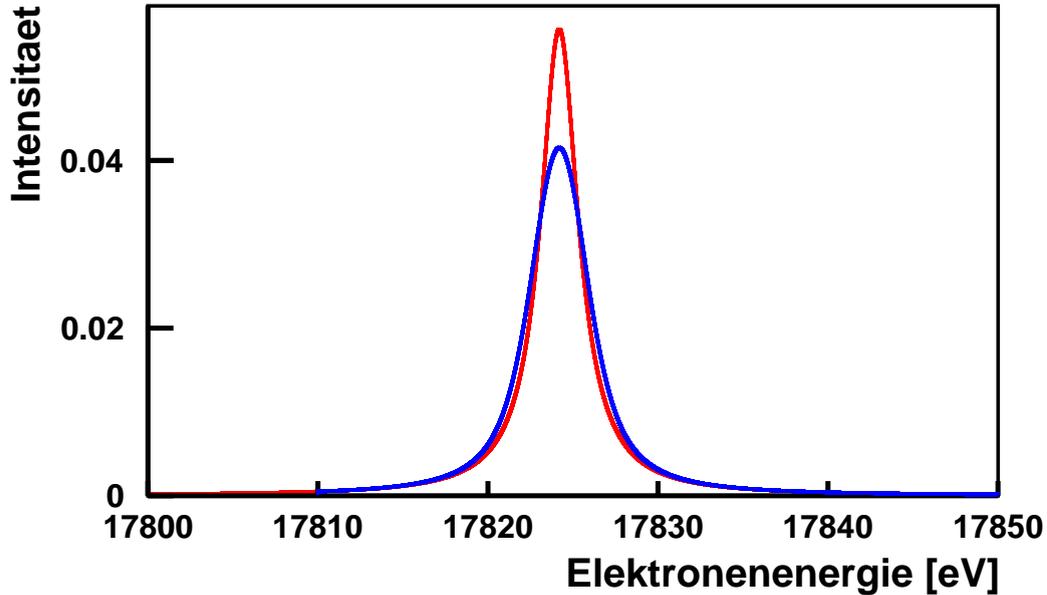


Abbildung 3.2: Lorentzprofil und Voigtprofil für $K32$ -Konversionslinie. Die rote Kurve zeigt die durch die Lorentzfunktion beschriebene $K32$ -Spektrallinie von ^{83m}Kr . Im Vergleich wird das entsprechende Voigtprofil mit einer Standardabweichung $\sigma = 1,0$ in blau dargestellt.

Effekte, die auf die gasförmigen Kryptonatome wirken, führen zu einer Verbreiterung der Spektrallinien, die durch eine Gaußkurve

$$G(E', \sigma^2) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} e^{-E'^2/2\sigma^2} \quad (3.14)$$

mit der Standardabweichung σ beschrieben werden kann. Eine Konversionslinie entsteht daher aus der Faltung einer Gaußkurve mit einem Lorentzprofil, die als Voigtprofil V bezeichnet wird [22].

$$V(E, \sigma, \Gamma_e) = \int_{-\infty}^{+\infty} G(E', \sigma) L(E - E', E_e, \Gamma_e) dE' \quad (3.15)$$

Für die genaue Darstellung einer Konversionslinie müssen alle Parameter gut bekannt sein. Sie können durch eine theoretische Berechnung oder experimentelle Messung festgelegt werden. Das gesamte ^{83m}Kr -Konversionsspektrum bildet sich durch eine Superposition der jeweiligen Konversionslinien. Zusätzlich treten aufgrund von Shake Off/Up Prozessen an der niederenergetischen Seite der normalen Konversionslinien einige diskrete oder kontinuierliche Satellitenlinien auf, deren detaillierte Analyse in Kap. 3.3 vorgestellt wird.

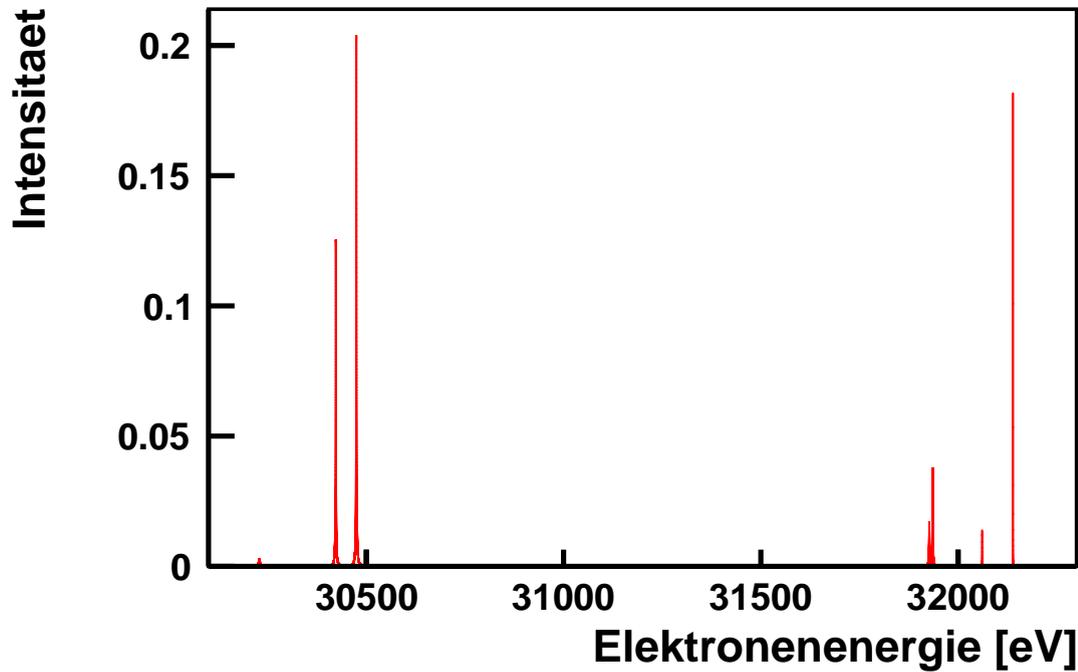


Abbildung 3.3: ^{83m}Kr -Konversionsspektrum mit relativen Linienintensitäten im Energiebereich um 30 keV.

3.2 Theoretische und experimentelle Bestimmung der ^{83m}Kr -Linien

3.2.1 Die Linienlage

Wenn man Gleichung 3.1 genauer betrachtet, ist die kinetische Energie E_{kin} eines Konversionselektrons gegeben durch

$$E_{\text{kin}} = E_{\gamma} + E_{\gamma,\text{rec}} - E_b^{\text{vac}} - E_{e,\text{rec}}, \quad (3.16)$$

mit der Energie der γ -Quanten E_{γ} , der Bindungsenergie E_b^{vac} bezüglich des Vakuums, der Rückstoßenergie des Atoms nach der Emission des γ -Quants $E_{\gamma,\text{rec}}$ und der Rückstoßenergie $E_{e,\text{rec}}$ nach der Emission des Elektrons. Für das ^{83m}Kr -Spektrum des $E3$ -Übergangs verwendet man folgende Referenzwerte: $E_{\gamma} = 32,1517\text{ keV}$, $E_{\gamma,\text{rec}} = 0,0067\text{ eV}$ und $E_{e,\text{rec}} = 0,120\text{ eV}$ [9]. Durch die Untersuchung der Bindungsenergie der Elektronen in den einzelnen Schalen kann man die kinetische Energie der Konversionselektronen bestimmen.

Hierfür stehen zwei Methoden zur Verfügung:

1. Direkte Messung des Photoelektronenspektrums mit der monoenergetischen Strahlung.

2. Messung der Übergangsenergie zwischen zwei Zuständen der Schalelektronen mit Hilfe der Röntgenemissionspektroskopie und zur Bindungsenergie des Elektrons auf der äußeren Schale, welche präzise gemessen werden kann. Alternativ kann die Energiedifferenz zwischen angeregten Außenschalen- und Innenschalen-Elektronen mit Röntgenabsorptionsspektroskopie vermessen werden. Beispielsweise gelten folgende Beziehungen für die K - und L -Schale

$$E_b(K) = E_X(KL_{\text{III}}) + E_b(L_{\text{III}}) \quad (3.17)$$

$$E_b(L_{\text{II}}) = E_X(L_{\text{II}}M_{\text{IV}}) + E_b(M_{\text{IV}}) \quad (3.18)$$

$$E_b(L_{\text{III}}) = E_X(L_{\text{III}}M_{\text{V}}) + E_b(M_{\text{V}}). \quad (3.19)$$

Hierbei ist $E_b(K)$ die Bindungsenergie der K -Schale, $E_X(KL_{\text{III}})$ ist die Übergangsenergie zwischen K - und L_{III} -Schale¹. Mit dem letzteren Verfahren hat man die genaue Bindungsenergien festgelegt: $E_b(K) = 14327,26(4)$ eV, $E_b(L_{\text{II}}) = 1731,91(3)$ eV und $E_b(L_{\text{III}}) = 1679,21(3)$ eV [23]. Damit ergeben sich die kinetischen Energien der Konversionselektronen aus diesen zwei Schalen

$$E_{\text{kin}}(K) = 17824,33 \text{ eV}, \quad (3.20)$$

$$E_{\text{kin}}(L_{\text{II}}) = 30419,68 \text{ eV}, \quad (3.21)$$

$$E_{\text{kin}}(L_{\text{III}}) = 30472,38 \text{ eV}. \quad (3.22)$$

In dieser Arbeit wurden die kinetischen Energien aller Linien auf der Basis der Gl. 3.1 und den Daten aus [18] ($E_\gamma(E3) = 32151,7$ eV, $E_\gamma(M1 + E2) = 9405,9$ eV) abgeschätzt. Die im Rahmen der Arbeit verwendeten Zahlenwerte sind Tab. 3.1 dargestellt.

3.2.2 Der Konversionskoeffizient

Die Linienstärke einer Konversionslinie N_i bezeichnet die Zählrate bzw. die Wahrscheinlichkeit, mit der der entsprechende Konversionsprozess geschieht. Als eine charakteristische Größe unterscheidet sich die Linienstärke einer speziellen Konversionslinie normalerweise von den anderen. Die Summe aller emittierten Elektronen aus allen Schalen ist gleich der Gesamtzählrate $N_{\text{ges}} = \sum_i N_i$. Nach Gleichung 3.3 ist die Zählrate der emittierten Elektronen eines Konversionsprozesses proportional zu seinem Konversionskoeffizienten $N_i \propto \alpha_i$. Mit der Normierungsbedingung kann die Linienstärke berechnet werden durch

$$N_i = N_{\text{ges}} \cdot \frac{\alpha_i}{\sum_i \alpha_i}. \quad (3.23)$$

Die Gesamtzählrate der Konversionselektronen in einem elektromagnetischen Übergang kann experimentell gemessen oder mit der Halbwertszeit des angeregten Zustands abgeschätzt werden. Der ^{83m}Kr -Kernzustand $I = \frac{1}{2}^-$ hat eine Halbwertszeit von

¹ $L_{\text{I}}, L_{\text{II}}, L_{\text{III}}$ bedeuten die Zustände $2s_{1/2}, 2p_{1/2}$ und $2p_{3/2}$ mit einer Energieaufspaltung bzw. verschiedenen Bindungsenergien.

$T_{1/2} = 1,83$ h. Der gesamte Konversionskoeffizient des $E3$ -Übergangs beträgt 2011 [20]. In einem Mol ^{83m}Kr -Moleküle ($I = \frac{1}{2}^-$) ist die Zählrate des $E3$ -Übergangs damit

$$N(E3) = 1\text{Mol} \cdot \frac{\ln 2}{T_{1/2}} = 6,02 \cdot 10^{23} \cdot \frac{\ln 2}{6588\text{ s}} = 6,33 \cdot 10^{19} \text{ Zerfälle/s.} \quad (3.24)$$

Darin beträgt die Zählrate der Konversionselektronen N_e mit der Energie 32 keV und die Linienstärke der Einzellinie N_i

$$N_e = N(E3) \cdot \frac{\alpha}{\alpha + 1} \quad (3.25)$$

$$N_i = N(E3) \cdot \frac{\alpha_i}{\alpha + 1}. \quad (3.26)$$

Zusammenfassend lässt sich festhalten, dass man für die Bestimmung der Linienstärke einer Konversionslinie alternativ ihren Konversionskoeffizienten α ermitteln kann.

Die präzise theoretische Berechnung von α wurde im Rahmen der Quantenelektrodynamik mit guter Genauigkeit durchgeführt. Der Energieübertrag vom Kern auf das Elektron basiert auf der elektromagnetischen Wechselwirkung zwischen beiden. Der Hauptbeitrag kommt dabei von der elektrostatischen Coulomb-Kraft. Als Beispiel wird hier die Berechnung für die K -Konversion behandelt, in der eine Reihe von vereinfachenden Annahmen gesetzt werden: Zum einen wird nur die elektrostatische Wechselwirkung berücksichtigt und zum anderen wird die nichtrelativistische Wellengleichung für das Elektron verwendet. Das emittierte Elektron wird durch eine ebene Welle beschrieben. Die Übergangswahrscheinlichkeit W zwischen dem Anfangszustand φ_a und dem Endzustand φ_b (Kombinationen von Kernwellenfunktionen und Elektronenwellenfunktionen) ist damit

$$W_{\varphi_a \rightarrow \varphi_b} = \frac{2\pi}{\hbar} |H_{ab}|^2 z(k) d\Omega. \quad (3.27)$$

Hierbei bedeuten H_{ab} das Matrixelement der Wechselwirkungsenergie H (die als elektrostatische Wechselwirkung zwischen Kern und Elektron angenommen wurde) und $z(k)d\Omega$ bezeichnet die Anzahl der Zustände des abgestoßenen Elektrons pro Einheits-Energieintervall für in das Raumwinkelelement $d\Omega$ fallende Elektronenrichtungen. Schließlich ergibt sich als Näherungswert für α_K für K -Schalen-Konversion bei elektrischen Übergängen

$$\alpha_K \approx Z^3 \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\hbar c} \right)^4 \frac{l}{l+1} \left(\frac{2m_e c^2}{E_\gamma} \right)^{l+5/2} \quad (3.28)$$

Hierbei ist $Ze^2/4\pi\epsilon_0\hbar c \ll 1$ und $\hbar\omega \gg E_B$ vorausgesetzt [24]. Beispielsweise ergibt sich für den Koeffizienten α_K ($Z = 30$) bei $E_\gamma = 460$ keV, $\alpha_K(E3) = 4,61 \cdot 10^{-3}$. Dieser Wert weicht erheblich vom in [20] gerechneten α_K ($7,28 \cdot 10^{-3}$) ab. Für die allgemeine Berechnung müssen demzufolge die vereinfachenden Beschränkungen aufgehoben werden. In der Berechnung mit einem verbesserten Modell wurde die relativistische Hartree-Fock-Slater Wellenfunktion verwendet und Terme höher als 2. Ordnung in der Störungstheorie vernachlässigt [20].

Z = 36		K : 14325,6		L1 : 1921,0 eV					
EG (KEV)	E1	E2	E3	E4	M1	M2	M3	M4	
K	17	1.21+01	1.36+02	7.59+02	3.66+03	1.93+01	9.67+02	1.22+04	8.93+04
	18	1.04+01	1.32+02	9.43+02	6.04+03	1.63+01	7.75+02	1.09+04	1.02+05
	19	9.04+00	1.24+02	1.05+03	8.05+03	1.39+01	6.28+02	9.55+03	1.04+05
	20	7.89+00	1.15+02	1.09+03	9.52+03	1.19+01	5.15+02	8.27+03	1.01+05
	22	6.11+00	9.66+01	1.06+03	1.09+04	9.00+00	3.56+02	6.11+03	8.55+04
	24	4.83+00	7.97+01	9.47+02	1.07+04	6.96+00	2.54+02	4.50+03	6.80+04
	26	3.88+00	6.55+01	8.17+02	9.74+03	5.49+00	1.86+02	3.34+03	5.26+04
	32	2.18+00	3.70+01	4.83+02	6.07+03	2.98+00	8.34+01	1.47+03	2.37+04
	38	1.35+00	2.20+01	2.82+02	3.49+03	1.80+00	4.31+01	7.15+02	1.12+04
	46	7.80-01	1.19+01	1.44+02	1.69+03	1.03+00	2.08+01	3.15+02	4.58+03
	68	2.50-01	3.13+00	3.17+01	3.09+02	3.38-01	4.79+00	5.70+01	6.67+02
	100	8.03-02	7.88-01	6.36+00	4.92+01	1.15-01	1.17+00	1.06+01	9.54+01
	220	7.92-03	4.48-02	2.16+01	9.92-01	1.42-02	7.75-02	3.92-01	1.97+00
	320	2.77-03	1.20-02	4.55-02	1.65-01	5.57-03	2.35-02	9.14-02	3.53-01
	460	1.07-03	3.67-03	1.12-02	3.26-02	2.34-03	7.89-03	2.44-02	7.43-02
	680	4.24-04	1.17-03	2.89-03	6.88-03	9.58-04	2.64-03	6.60-03	1.60-02
	1000	1.91-04	4.43-04	9.20-04	1.84-03	4.18-04	9.70-04	2.03-03	4.08-03
	1500	9.29-05	1.84-04	3.32-04	5.74-04	1.84-04	3.69-04	6.63-04	1.14-03
	2500	4.26-05	7.15-05	1.12-04	1.68-04	7.13-05	1.22-04	1.90-04	2.84-04
	5000	1.72-05	2.38-05	3.21-05	4.20-05	2.31-05	3.32-05	4.49-05	5.85-05

Abbildung 3.4: Die Tabelle der inneren Konversionskoeffizienten für $Z = 36$, K -Schale [20]. EG: γ -Quantenenergie in keV. E1-M4: Multipolarität der elektromagnetischen Übergänge. Der Wert 14325,6(eV) ist die Bindungsenergie der K -Schale. Als Notation: 1,21 + 01 bedeutet $1,21 \times 10^1 = 12,1$. Aus dieser Tabelle kann man die Konversionskoeffizienten für beliebige γ -Energie erhalten. Für die Werte zwischen zwei berechneten Werten kann das Spline-Interpolationsverfahren benutzt werden. Mit diesem Verfahren wird der Fehler von 5% für einen interpolierten Zwischenwert nicht übertroffen.

Die komplette Berechnung ist wesentlich komplizierter und wird hier nicht referiert. Die numerische Ergebnisse solcher Rechnungen sind tabelliert oder graphisch dargestellt. Die im Rahmen dieser Berechnungen ermittelten Koeffizienten sind abhängig von vier Parametern: der Kernladungszahl Z , der Elektronenschale (K, L_I, L_{II}, L_{III} usw.), der Übergangsenergie E_γ und der elektrischen bzw. magnetischen Multipolordnung l . In der Tabelle in Abb. 3.4 ergibt sich beispielsweise für den Konversionskoeffizienten α_K von Krypton ($Z = 36$) beim E3-Übergang mit $E_\gamma = 32,1$ keV: $\alpha_K \approx 475,99$. Der gesamte E3-Koeffizient von Krypton $\alpha(E3)$ beträgt 2029,7. Dies stimmt gut mit dem experimentellen Wert $\alpha(E3) = 2035$ [18] überein (0,26% relative Abweichung).

3.2.3 Die Linienbreite

Die Linienbreite Γ_e bezeichnet hier die Breite des vom nahezu monoenergetischen Konversionsspektrum umfassten Energieintervalls. Gemäß der Heisenberg-Unschärferelation gilt für die Linienbreite eines angeregten Zu

$$\Gamma = \frac{\hbar}{\tau}. \quad (3.29)$$

Dabei ist \hbar das reduzierte Plancksche Wirkungsquantum, τ ist die Lebensdauer des angeregten Zustands. Zuerst verursacht die endliche Lebensdauer angeregter Kernzu-

stände eine Linienbreite des emittierten γ -Lichtspektrums. Beispielweise für den kurzlebigen Kernzustand $I = \frac{7}{2}^+$ beträgt die Lebensdauer $\tau = \frac{154,4}{\ln 2} = 222,8$ ns, wodurch für die Linienbreite

$$\Gamma_\gamma = \frac{6,58 \cdot 10^{-16} \text{ eVs}}{222,8 \cdot 10^{-9} \text{ s}} = 2,95 \cdot 10^{-9} \text{ eV} \quad (3.30)$$

folgt.

Im Allgemein betragen die Linienbreiten von Atomzuständen mindestens 0,03 eV. Daher leisten die Linienbreiten der γ -Quanten nur geringe Beiträge zur totalen Konversionslinienbreite, d.h. man kann die natürliche Linienbreite der Atomzustände als gute Approximation betrachten. Nach der Emission eines Elektrons aus einer Schale entsteht an der ursprünglichen Stelle ein Loch. Das Atom befindet sich in einem angeregten Zustand und kann durch Röntgenemission, den Auger-Effekt oder durch Coster-Kronig Übergänge in sehr kurzen Zeitintervallen das Loch wieder auffüllen [25]. Die Zerfallswahrscheinlichkeit eines Atomzustands i ist deshalb die Summe der Zerfallswahrscheinlichkeiten von Strahlungsemission $\Gamma_R(i)/\hbar$, dem Auger-Effekt $\Gamma_A(i)/\hbar$ und dem Coster-Kronig-Effekt $\Gamma_{CK}(i)/\hbar$. Für die gesamte Linienbreite gilt:

$$\Gamma(i) = \Gamma_R(i) + \Gamma_A(i) + \Gamma_{CK}(i). \quad (3.31)$$

Für das Spektrum des Übergangs zwischen dem Anfangsatomzustand A und dem Endzustand B ergibt sich demzufolge

$$I(E) \propto \frac{\Gamma(A) + \Gamma(B)}{2\pi} \cdot \frac{1}{[E - (E_A - E_B)]^2 + [\Gamma(A) + \Gamma(B)]^2/4}, \quad (3.32)$$

wobei die effektive natürliche Linienbreite eines Übergangs nicht nur die Linienbreite des Anfangszustands ist, sondern die Kombination der Linienbreiten von Anfang- und Endzustand [21]. Beim Konversionsprozess geht der stabile Anfangszustand ($\tau = \infty$ und $\Gamma = 0$) durch die Emission eines Elektrons in einen angeregten Endzustand über. Die Konversionslinienbreite ist damit gerade gleich der natürlichen Linienbreite dieses Endzustands, die durch die Gl. 3.31 ermittelt wird. Aufgrund der vernachlässigbaren Linienbreite der γ -Quanten sind die Linienbreiten unabhängig von der Natur des elektromagnetischen Übergangs beim Konversionsprozess.

Für ein Element $Z > 40$ kann die K -Linienbreite gut dargestellt werden durch folgende empirische Relation [25]

$$\Gamma(K) = 1,73 \times Z^{3,93} \times 10^{-6} \text{ eV}. \quad (3.33)$$

Für ^{83m}Kr kann damit die K -Linienbreite abgeschätzt werden auf $\Gamma(K) = 2,26$ eV. Die ausführlichen Berechnungen für alle Schalen werden hier nicht erwähnt, die Werte aller Linienbreiten [26] werden in der Tab. 3.1 mit den Parametern Linienlage und Konversionskoeffizient gezeigt.

Tabelle 3.1: Linienlagen, Linienbreiten und Konversionskoeffizienten von ^{83m}Kr [18, 25, 20].

Niveau	Symbol	E_e [eV]	Γ [eV]	α
$1s_{1/2}$	$K32$	17824,2	2,71	475,99
$2s_{1/2}$	L_132	30228,8	3,75	31,68
	$L_19,4$	7484,1		11,91
$2p_{1/2}$	$L_{II}32$	30422,6	1,25	494,16
	$L_{II}9,4$	7677,9		1,34
$2p_{3/2}$	$L_{III}32$	30474,9	1,19	764,94
	$L_{III}9,4$	7730,2		1,02
$3s_{1/2}$	M_I32	31871,5	3,50	5,20
	$M_I9,4$	9126,8		1,97
$3p_{1/2}$	$M_{II}32$	31927,1	1,60	84,19
	$M_{II}9,4$	9182,4		0,22
$3p_{3/2}$	$M_{III}32$	31936,0	1,10	130,15
	$M_{III}9,4$	9191,3		0,17
$3d_{3/2}$	$M_{IV}32$	32060,9	0,07	1,31
	$M_{IV}9,4$	9316,2		0,0032
$3d_{5/2}$	M_V32	32060,9	0,072	1,84
	$M_V9,4$	9316,2		0,0029
$4s_{1/2}$	N_I32	32125,8	0,40	0,64
	$N_I9,4$	9381,1		0,24

3.3 Shake Off/Up Effekt

In diesem Abschnitt werden den Konversionsprozess begleitende Effekte wie den Shake Off/Up Prozess vorgestellt. Diese spielen für die Bestimmung des Elektronenspektrums eine wichtige Rolle. Bei einem Konversionsprozess verursacht die Emission eines Elektrons eine plötzliche Änderung des Zentralpotentials ('sudden approximation'). Als Konsequenz dessen entsteht ein Anregungsphänomen, das Shake Off/Up der Hüllenelektronen. Beim Shake Up Prozess geht ein Hüllenelektron in einen höheren Zustand über, während beim Shake Off Prozess ein Elektron aus einer Atomschale ins Kontinuum emittiert wird. Im Spektrum erwartet man daher neben den Konversionslinien aufgrund des Shake Up Prozesses noch einige diskrete Satellitenlinien, die um die jeweilige Anregungsenergie zur niederenergetischen Seite der Konversionslinien hin verschoben sind, sowie einen kontinuierlichen Hintergrund aufgrund des Shake Off Prozesses. Außerdem wurden die Amplituden der Konversionslinien (Hauptlinien) mehr oder weniger reduziert, je nachdem, wie groß die Wahrscheinlichkeit der Shake Off/Up Prozesse ist.

Für die Linienform eines Shake Up Satelliten wird angenommen, dass sie als Faltung einer Lorentzkurve mit einer zur niederenergetischen Seite abfallenden Exponentialfunktion beschrieben werden können. Dies entspricht gerade der Vorstellung, dass es sich bei den Satelliten um einzelne Anregungen von Elektronen in höhere Zustände handelt, die jede für sich ein Lorentzprofil wie die eigentliche Konversionslinie haben und deren Intensität mit wachsender Anregungsenergie exponentiell abnimmt [27]. Der analytische Ausdruck dafür lautet

$$\frac{dN}{dE} = \frac{N_{\text{amp}}}{2} \cdot \exp\left(\frac{\lambda^2 \sigma^2}{2} - \lambda(E_0 - E)\right) \cdot \operatorname{erfc}\left(\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\lambda\sigma - \frac{E_0 - E}{\sigma}\right)\right). \quad (3.34)$$

Hier ist N_{amp} die Amplitude des Satelliten, λ der exponentielle Dämpfungsparameter, σ die Standardabweichung der Gaußkurve und E_0 die Position des Satelliten. Die Funktion erfc bezeichnet die konjugiert Gaußsche Fehlerfunktion. Dieser Ausdruck ist nur eine Näherungsformel und die realen Satellitenprofile sind komplizierter, da man dafür die Shakeprozesse aller möglichen Anregungen genau untersuchen muss. Jedoch konnten die einzelnen diskreten Anregungen in bisherigen Experimenten aufgrund der endlichen Spektrometerauflösung nicht getrennt werden. Es ist wichtig festzuhalten, dass derartige Untersuchungen für ein exaktes Satellitenspektrum im KATRIN Experiment nicht notwendig sind. Hier interessiert man sich nur für die „lokalen Eigenschaften“ des $^{83\text{m}}\text{Kr}$ -Spektrums, z.B. die Linie im Bereich von $K32$, $L_{\text{II}}32$ und $L_{\text{III}}32$. Da es in solchen kleinen Umgebungen nur um die diskreten Konversionslinien geht und außer der Intensität alle Parameter nicht korrigiert werden müssen, kann man einfach nur die Reduktion der Linienamplituden in Betracht ziehen. Die Satelliten und das Kontinuum werden in dieser Arbeit durch diskrete Lorentzkurven mit durchschnittlicher Energie zusammengefasst.

Beim Konversionsprozess emittiert wie oben erwähnt ein Atom ein Hüllenelektron. Danach besitzt dieses Atom die Nettoladung von $+1$ und das Zentralpotential verändert sich 'instantan'. Der Hamiltonoperator geht von H_1 plötzlich in H_2 über. Die für die Umstrukturierung der Elektronenhülle charakteristische Zeitskala ist wesentlich größer

als die Dauer der Emission des Elektrons, d.h. die restlichen Elektronen befinden sich unmittelbar nach dem Emissionsprozess noch im selben Zustand wie zuvor (aber nicht mehr im Eigenzustand des Hamiltonoperators H_1). Die Wahrscheinlichkeit, mit der ein Anfangszustand ψ_i eines Elektrons in einen Endzustand ψ_f übergeht, ist quantenmechanisch gegeben durch

$$P_{i \rightarrow f} = \left| \int \psi_f^* \psi_i d\tau \right|^2. \quad (3.35)$$

Bevor die Berechnung mit der 'sudden approximation' für die Shake Off/Up-Prozesse durchgeführt werden kann, muss man noch die Gültigkeit dieser Näherungsmethode bestätigen. Im Rahmen der 'sudden approximation' sind die von der Emission des Elektrons verursachten Anregungen unabhängig davon, durch welchen Mechanismus (z.B. durch Photoeffekt oder interne Konversion) und mit welcher Energie diese Elektronenmission entsteht². Im Rahmen einer Vergleichsuntersuchung, bei der die Spektren der Konversionselektronen und Photoionisation mit verschiedenen Röntgenstrahlungsenergien (15225 eV und 17025 eV) bei Krypton gemessen wurde, konnte gezeigt werden, dass zwei unterschiedliche Mechanismen identische Satellitenspektren erzeugen, die zudem unabhängig von der kinetischen Energie des emittierten Elektrons sind [28]. Durch dieses Experiment wurde die Anwendbarkeit der 'plötzlichen Approximation' bei Shake Off/Up-Prozesse nachgewiesen, so dass die in dieser Arbeit verwendeten Berechnungen nach dieser Methode durchgeführt wurden.

Shake Off/Up Wahrscheinlichkeit

Das Hüllenelektron wird wegen der plötzlichen Änderung des Zentralpotentials in einen höheren Zustand angeregt oder ins Kontinuum emittiert. Die Wahrscheinlichkeit eines Übergangs vom Anfangszustand ψ_i in den Endzustand ψ_f kann mit der Gl. 3.35 berechnet werden. Die Auswahlregel dafür lautet $\Delta S = \Delta L = \Delta J = 0$, daher ist in diesem Übergang nur die Änderung der Hauptquantenzahl n erlaubt. Das angeregte Elektron kann im eigenen Orbital bleiben oder in andere unbesetzte Orbitale übergehen, der Spin S und der Drehimpuls L müssen dabei erhalten bleiben. In der Rechnung wird die Ein-Elektron-Wellenfunktion als die Lösung der Hartree-Fock-Methode für neutrale Atome (Anfangszustand) und für Ionen mit einem Defektelektron (Endzustand) verwendet. Im Vergleich mit den Grundzuständen sind die Wellenfunktionen der angeregten Zustände eines Ions viel schweriger zu erhalten. Deshalb wird für die Wahrscheinlichkeit P_{nlj} , mit der ein oder mehr Elektronen den ursprünglichen Zustand $|n, l, j\rangle$ verlassen, über eine indirekte Berechnung angenommen

$$P_{nlj} = 1 - \left(\left| \int \psi_{nlj}^*(z+1) \psi_{nlj}(z) dr \right|^2 \right)^N - P_F. \quad (3.36)$$

Das Betragsquadrat der Integration ist die Wahrscheinlichkeit P_s dafür, dass ein Elektron im ursprünglichen Zustand $|n, l, j\rangle$ bleibt. N ist dabei die Anzahl der Elektronen im Zustand $|n, l, j\rangle$. Dann gibt $1 - p_s^N$ die Wahrscheinlichkeit an, mit der mindestens ein

²Dies ist ein Unterschied zu einem direkten Kollisionsprozess.

Tabelle 3.2: **Shake Off/Up Wahrscheinlichkeit verschiedener Krypton-Schalen n_s , bei Konversionselektronen aus Schalen n_0 [30].**

$n_0 \setminus n_s$	1s	2s	2p _{1/2}	2p _{3/2}	3s	3p _{1/2}	3p _{3/2}
1s (<i>K</i>)	0,002	0,060	0,089	0,18	0,22	0,38	0,75
2p _{1/2} (<i>L</i> _{II})	0,000	0,008	0,006	0,026	0,099	0,18	0,36
2p _{3/2} (<i>L</i> _{III})	0,000	0,008	0,011	0,018	0,097	0,17	0,36
	3d _{3/2}	3d _{5/2}	4s	4p _{1/2}	4p _{3/2}	ΣP	
1s (<i>K</i>)	1,43	2,13	1,80	4,39	9,06	20,5	
2p _{1/2} (<i>L</i> _{II})	1,42	2,14	1,53	3,86	8,13	17,8	
2p _{3/2} (<i>L</i> _{III})	1,41	2,12	1,52	3,84	8,10	17,7	

Elektron das Orbital $|n, l, j\rangle$ verlässt. Davon muss die Beteiligung von Übergängen in die bereits besetzten Zustände P_F infolge des Pauli'schen Ausschlussprinzips abgezogen werden

$$P_F = \sum N \frac{N'}{2j+1} \left| \int \psi_{n'lj}^*(z+1) \psi_{nlj}(z) dr \right|^2. \quad (3.37)$$

Hier ist N' die Anzahl der Elektronen im Zustand $|n', l, j\rangle$. Die Summe wird für alle möglichen voll oder teilweise besetzten Schalen $n' \neq n$ ausgeführt [29]. In Tabelle 3.2 ist die Shake Off/Up-Wahrscheinlichkeit der verschiedenen Krypton-Elektronenschalen dargestellt, die von *K*-, *L*_{II}- und *L*_{III}-Konversionselektronen verursacht werden. Die Werte stammen aus den theoretischen Ergebnissen für den Photoeffekt, und werden hier direkt für den Fall der inneren Konversion verwendet, da die beiden Mechanismen beim Shakespektrum identisch sind.

Der durchschnittliche Energieverlust

Die emittierten Konversionselektronen, geben bei Shake Off/Up-Prozesse einen Teil ihrer Energie ab. Wenn die genauen Profile der Nebenlinien nicht betrachtet werden müssen, kann man mit dem durchschnittlichen Energieverlust die Shakespektren beschreiben, ohne die Messungsergebnisse mit der Hauptlinie zu verschmieren. Mit den oben tabellierten Shake-Wahrscheinlichkeiten für verschiedene Schalen und der der Schale entsprechenden Bindungsenergie wurde der durchschnittliche Energieverlust \bar{E} durch eine Multiplikation mit einem Korrekturfaktor [31] abgeschätzt

$$\bar{E} = 1,8 \sum_{n_s} P_{n_s} E_{B,n_s}, \quad (3.38)$$

Hierbei sind P_{n_s} die Shake-Wahrscheinlichkeit und E_{B,n_s} die Bindungsenergie der Schale n_s . Für die Positionierung der Einzellinien wurde der gleiche Korrekturfaktor 1,8 verwendet, wodurch sich die Linienlage der Satelliten zu

$$\bar{E}_{e,n_s} = E_e - 1,8 E_{B,n_s} \quad (3.39)$$

Tabelle 3.3: **Der durchschnittliche Energieverlust bei Shake Off/Up-Prozesse [30] und die Positionen der Satelliten in eV.** Die nicht in der Tabelle aufgelistete Satelliten befinden sich im Spektrum so weit von der Hauptlinien, dass sie in dieser Arbeit nicht berücksichtigt werden müssen.

	$3d_{3/2}$	$3d_{5/2}$	$4s$	$4p_{1/2}$	$4p_{3/2}$	\bar{E}
$K32$	17664,18	17664,18	17781,0	17805,12	17805,12	33,4
$L_{II}32$	30262,58	30262,58	30379,4	30403,52	30403,52	19,2
$L_{III}32$	30314,88	30314,88	30431,7	30455,82	30455,82	19,3

ergibt. E_e ist hierbei die ungestreute kinetische Energie der Konversionselektronen. In Tabelle. 3.3 ist die Satellitenlage teilweise dargestellt. Mit den ebenfalls aufgelisteten Wahrscheinlichkeiten kann man das komplette Spektrum näherungsweise beschreiben.

3.4 Verwendung von Krypton im Mainz und Troitsk Experiment

In den bisher durchgeführten Tritium- β -Zerfallsexperimenten in Troitsk und in Mainz dienten die Konversionselektronen aus ^{83m}Kr als wichtige Elektronenquelle für die Kalibration und spezifische Testmessungen.

3.4.1 Bestimmung der ^{83m}Kr -Konversionseigenschaft im Mainzer Experiment

Beim Mainzer Neutrinomassenexperiment ist die Energieauflösung des Solenoid-Retardierungs-Spektrometers mit Konversionselektronen einer ^{83m}Kr -Quelle getestet worden [32]. Das Krypton wurde aus einer in Kupferfolie implantierten $^{83}_{37}\text{Rb}$ -Quelle gewonnen. Bei dieser Technik diffundiert das Gas aus der Folie in einen kleinen Rezipienten und wird dann über ein Kapillarsystem auf eine gekühlte Fläche geleitet. Mit einem Durchflußkryostat ist eine Temperatur von etwa 10 K erreicht worden, bei der die Kryptonatome auf dem Substrat auffrieren. Die systematische Vermessung des gesamten Kryptonkonversion-Spektrums ist vorgenommen worden und einige ausgewählte Konversionslinien werden hier vorgestellt [32].

Für die Anpassung der Messwerte musste zunächst die allgemeine Form des differentiellen Spektrums vorgegeben werden. In der Analyse beim Mainzer Experiment wurde die Hauptlinie durch die Summe einiger verschiedener Lorentzprofile beschrieben. Wegen der Beschränkung der Spektrometerauflösung konnten die Shake Off/Up Linien nicht aufgelöst werden. Vereinfachend werden daher alle Prozesse unterhalb der Energie der Hauptlinie, inklusive Shake Off/Up Satelliten und Rückstreuelektronen³, zusammengefasst und ebenfalls in Form von 1 bis 3 Lorentzkurven behandelt. Auf der hochenergetischen Seite wurde das Satellitenspektrum ab der Energie der Hauptlinie auf Null

³Die Rückstreuung von Elektronen am verwendeten Substrat und die inelastische Streuungen der Elektronen in der kondensierten Quelle wurden in Mainzer Experiment detailliert untersucht [27].

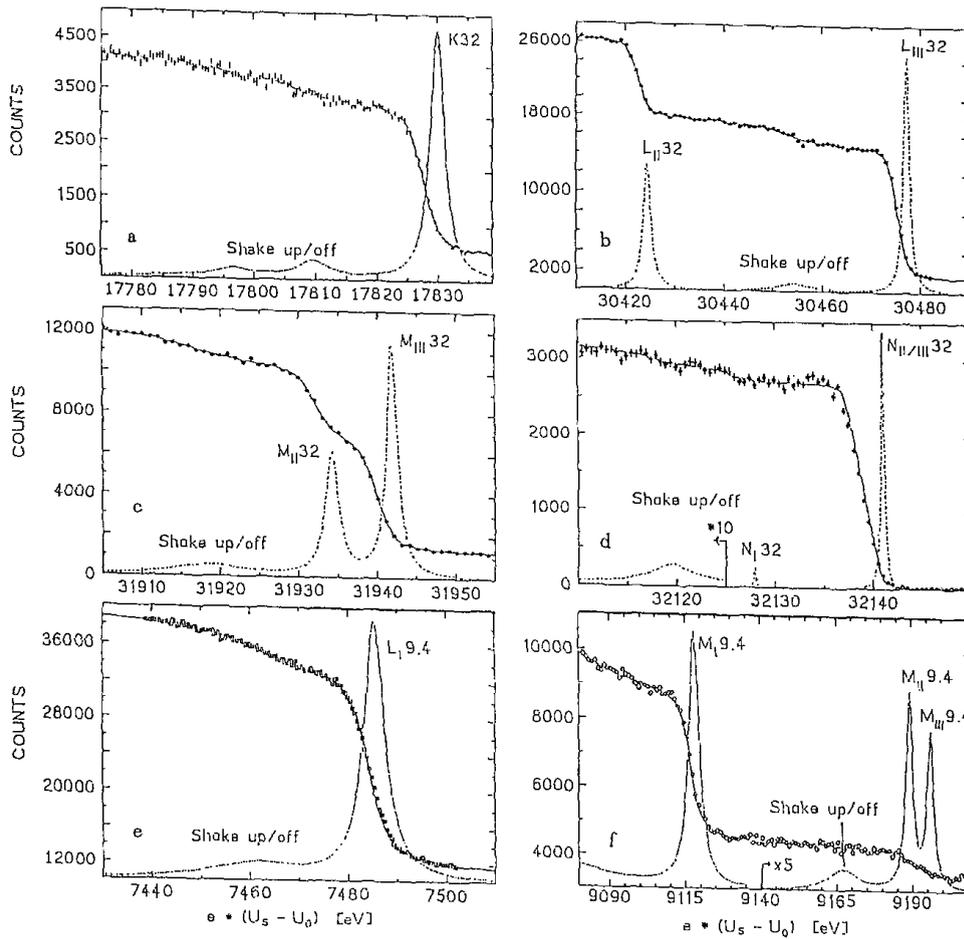


Abbildung 3.5: Die ^{83m}Kr -Konversionsspektren mit der Energie 32,1 keV und 9,4 keV [33]: (a) $K32$, (b) $L_{II}, L_{III}32$, (c) $M_{II}, M_{III}32$, (d) $N_I, N_{II}, N_{III}32$, (e) $L_{I9,4}$, (f) $M_I, M_{II}, M_{III}9,4$. Die durchgezogenen Kurven zeigen die an die Messwerte angepassten Fitkurven, die das jeweilige Konversionsspektrum beschreiben. Die gepunkteten Kurven ergeben sich aus den Anpassungen von errechneten Konversionsspektren. Für die Anpassungen der Kurve wurde das Programmpaket MINUIT verwendet. **$K32$ Konversion.** Das $K32$ -Konversionsspektrum ist in (a) gezeigt. Die Halbwertsbreite der Hauptlinie beträgt $\Gamma = (2,83 \pm 0,12)$ eV. Neben der Hauptlinie wurden hier 3 Satelliten $S1, S2, S3$, für die Anpassung angenommen. Die Satelliten $S1$ und $S2$ liegen 20,3 eV bzw. 33,3 eV unterhalb der Hauptlinie, ihre Halbwertsbreite beträgt ca. 5,8 eV. Die Intensität beider Linien zusammen ergibt 18,5% der Hauptlinie. Der Satellit $S3$ liegt 35 eV unterhalb der Hauptlinie mit einer Halbwertsbreite von ca. 38 eV und seine Intensität beträgt 13,2% der Hauptlinie. **$L_{II}/L_{III}32$ Konversion.** Das Intensitätsverhältnis der beiden Hauptlinien (in (b)) $L_{II}/L_{III}32 = (67,5 \pm 2,3)\%$ und ihre jeweiligen Halbwertsbreiten betragen 1,84 eV und 1,40 eV. Die Anpassung an die Messwerte zwischen den beiden Hauptlinien erfolgt mit nur einer einzigen Satelliten-Lorentzkurve, die 23 eV unterhalb der L_{III} -Hauptlinie mit der Intensität 19,3% der L_{III} liegt.

Tabelle 3.4: **Die Lage und die Breite der Konversionslinien von adsorbierten Krypton [33]**

Niveau	Symbol	Γ [eV]	U [V]
$1s_{1/2}$	$K32$	$2,83 \pm 0,12$	$17830,0 \pm 0,5$
$2s_{1/2}$	$L_I9,4$	$5,30 \pm 0,04$	$7485,4 \pm 0,4$
$2p_{1/2}$	$L_{II}9,4$	$1,84 \pm 0,05$	$7679,1 \pm 0,4$
	$L_{II}32$	$1,84 \pm 0,05$	$30424,4 \pm 1,0$
$2p_{3/2}$	$L_{III}9,4$	$1,40 \pm 0,02$	$7731,8 \pm 0,4$
	$L_{III}32$	$1,40 \pm 0,02$	$30477,2 \pm 1,0$
$3s_{1/2}$	$M_I9,4$	$4,27 \pm 0,05$	$9118,2 \pm 0,5$
$3p_{1/2}$	$M_{II}9,4$	$1,99 \pm 0,32$	$9188,1 \pm 0,5$
	$M_{II}32$	$1,99 \pm 0,32$	$31934,2 \pm 1,0$
$3p_{3/2}$	$M_{III}9,4$	$1,66 \pm 0,08$	$9196,1 \pm 0,5$
	$M_{III}32$	$1,66 \pm 0,08$	$31941,9 \pm 1,0$
$4s_{1/2}$	$N_I9,4$	$0,19 \pm 0,04$	$9383,5 \pm 0,5$
	N_I32	$0,19 \pm 0,04$	$32127,8 \pm 1,0$
$4p_{1/2}/4p_{3/2}$	$N_{II}/N_{II}32$	$0,59 \pm 0,04$	$32140,9 \pm 1,0$

gesetzt. Durch diese Zusammenfassung wird das differentielle Satellitenspektrum zwar nur unzureichend erfaßt, aber der Trend der Messkurve auf der niederenergetischen Seite der Hauptlinien kann gut beschrieben werden. Die Lage, Breite und Höhe der Hauptlinie konnten durch die Anpassung jedoch sehr genau festgelegt werden.

Die Ergebnisse des Mainzer Experiments sind in Tab. 3.4 zusammengefasst, wobei die Potentialdifferenzen U den Linienmitten und Γ den Halbwertsbreiten der jeweiligen Lorentzprofile entsprechen. Für eine adsorbierte Kryptonquelle wie in Mainz müssen die Verschiebungen der Energieniveaus gegenüber einer gasförmigen Quelle berücksichtigt werden. Diese sind abhängig vom betrachteten Niveau, der adsorbierten Schichtdicke und der Position, in der sich die Quelle innerhalb der Schicht befindet. Um die Effekte für die gasförmige Kryptonquelle, die in KATRIN verwendet wird, abschätzen zu können, müssen die Oberflächeneffekte näher untersucht und eine Korrektur vorgenommen werden. Mit der Zusammenfassung aller Korrekturgrößen wurden die Übergangsennergien statistisch festgelegt: $E_{\gamma 9,4} = (9405,9 \pm 0,8)$ eV, $E_{\gamma 32} = (32151,5 \pm 1,1)$ eV.

3.4.2 Untersuchung des Quellpotentials im Troitsk-Experiment

Zeitgleich zum Mainzer Experiment wurde das auch heute noch laufende Troitsk-Experiment mit einem sehr ähnlichen Spektrometer (MAC-E-Filter) durchgeführt. Der Hauptunterschied ist, dass in Troitsk eine fensterlose gasförmige Tritiumquelle (WGTS) verwendet wurde, während in Mainz eine quench-kondensierte Tritiumquelle auf einem Aluminiumsubstrat zum Einsatz kam. In Troitsk wurde der Einfluss des elektrischen Potentials in der WGTS auf den gemessenen Endpunkt des β -Spektrums berücksichtigt,

der eine systematische Verschiebung der Neutrinomasse Δm_ν^2 verursachen könnte [13]. Für Neutrinomassenexperimente gilt im Allgemeinen:

$$\Delta m_\nu^2 = -2(\sigma_1^2 + \sigma_2^2 + \sigma_3^2 + \dots), \quad (3.40)$$

wobei σ_i^2 die Verschmierungskomponenten (bzw. systematischen Effekte) am Endpunkt sind. Um eine systematische Beeinflussung, die z.B. zu einer negativen Neutrinomasse führen kann, zu vermeiden, müssen alle Störparameter, insbesondere eine nicht berücksichtigte räumliche bzw. zeitliche Fluktuation des elektrischen Potentials, berücksichtigt werden. In Troitsk wurde die gasförmige Kryptonquelle für die Untersuchung des Potentials mit bzw. ohne Tritiumgas in der WGTS betrieben. Durch die Messdaten aus dem Mainzer Experiment (Tab. 3.4) sind die Eigenschaften der Krypton-Konversionselektronen festgelegt: Die Konversionslinien sind deutlich voneinander unterscheidbar; die Linien sind fast monoenergetisch bzw. mit schmalen Halbwertsbreiten; und die Energie einiger Linien liegt nahe anderen den für das Experiment wichtigen Energien (Endpunkt des Tritiumspektrums). Die aus Kryptonatomen emittierten Elektronen sind daher ideale Sondenteilchen, die beim Durchgang durch ein elektrisches Feld in der WGTS beschleunigt oder abgebremst werden können (falls Potentialinhomogenität auftreten). Daher wäre eine Linienverbreiterung und eine Verschiebung der Linienposition ein starkes Indiz für ein zusätzliches (oft plasmainduziertes) elektrisches Potential. Bei den Troitskes Untersuchungen wurde angenommen, dass die Verteilung des Kryptongases und der Tritiumgases im Quellraum identisch sei. Auf der Basis dieser Annahme können die Potentialeffekte in der WGTS mit der Kryptonquelle sehr präzise erfasst werden, da sich bei systematischen Effekten die sehr schmalen, nahezu monoenergetischen Linien einerseits in ihrer Lage verschieben und andererseits verbreitern werden.

Die $K32$ -Konversionslinie (ca. 17,8 keV) liegt sehr nahe am Endpunkt des Tritium- β -Spektrums mit 18,6 keV, aber aufgrund der geringen Konzentration von Krypton kann das $K32$ -Signal nicht mit beliebiger Genauigkeit vom „Untergrund“ des Tritiumspektrums unterschieden werden. Deswegen wurden die L_2 und L_3 -Konversionslinien statt der K -Linie verwendet, die energetisch weit oberhalb (ca. 30,5 keV) des β^- Endpunkt liegen. Die Messungen für die L_3 -Linie wurden in einem wohl definierten Intervall um die L_3 -Region⁴ durchgeführt. Eine Messung wird exemplarisch im Bild. 3.6 dargestellt. Dabei wurden 45 Messpunkte im Abstand von 1 V aufeinander folgend gemessen. Diese Messung ist zuerst nur mit der 'reinen' Kryptonquelle ohne weitere Elektronenemitter gelaufen, dann wurde sie mit der gemischten Quelle (Krypton + Tritium) unter gleichen experimentellen Bedingungen wiederholt. Um an der Strahlrohrwand angefrorenes Krypton zu vermeiden, wurde die Temperatur auf 110 K erhöht. Die Tritiumdichte in der gemischten Quelle wurde von $2,0 \times 10^{14}$ bis $3,0 \times 10^{14}$ Moleküle/cm³ variiert. Die beobachtbare Linienverschiebung zwischen dem Quellspektrum mit und ohne Tritiumgas kann die Vermutung bestätigen, dass durch den Tritium-Zerfallsprozess Raumladungen in der WGTS erzeugt werden bzw. eine elektrische Potentialverteilung entstehen

⁴In diesem Intervall von 30465-30490 eV konnte eine scharfe Stufe, die durch die L_3 -Linie verursacht wird, deutlich beobachtet werden. Andere Linien sind ausgeschlossen.

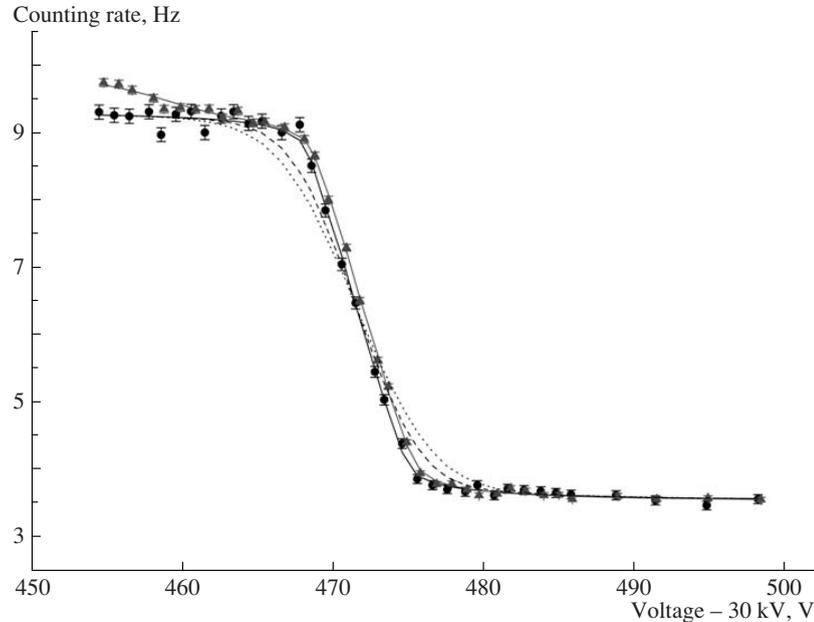


Abbildung 3.6: Die Messwerte integriertes Spektrums der ^{83m}Kr L_3 -Linie [34]. (\blacktriangle): Krypton + Tritium Gemisch (\bullet): reines Kryptongas. Die gestrichelte und punktierte Kurve bezeichnen die theoretisch berechneten Kurven mit Linienbreiterungen von 5 eV^2 und 10 eV^2 , die durch das Quellpotential verursacht werden.

kann [9]. Der komplette Potential-Effekt auf das Kryptonspektrum wurden mit zwei Parametern zusammengefasst: einer Linienverbreiterung σ^2 und einer Linienverschiebung δE . Der Krypton-Konversionsprozess unter Einfluss eines nicht homogenen Potentials wurde durch die Kombination von Lorentzprofil (3.13) und Gaußprofil (3.14) beschrieben, worin σ^2 und δE dem Quadrat der Standardabweichung⁵ und der Verschiebung der Linienlage entsprechen. Für weiter führende Untersuchungen wurden mehrere Messungen mit verschiedenen Variablen durchgeführt, deren Messergebnisse in Abb. 3.7 dargestellt werden.

Die Quellstärke X wird dabei so definiert:

$$X = \sigma_{\text{inel}} \int n(x) dx. \quad (3.41)$$

Der Parameter σ_{inel} bezeichnet den Wirkungsquerschnitt der inelastischen Streuung, und $n(x)$ ist die Molekülanzahl pro Kubikzentimeter. In diesem Experiment hängt die Quellstärke hauptsächlich von der Tritiumdichte ab, bei reiner Kryptonquelle beträgt sie annähernd 0.

Die Variation der experimentelle Auflösung führt zu Verschiebungen zwischen den Messwerten verschiedener Gruppen, die ähnlich bzw. gleichmäßig für jede Messungen

⁵ σ^2 beschreibt nicht nur den Potential-Effekt, sondern auch andere zufällige Effekte inklusive Dopplerverbreiterung.

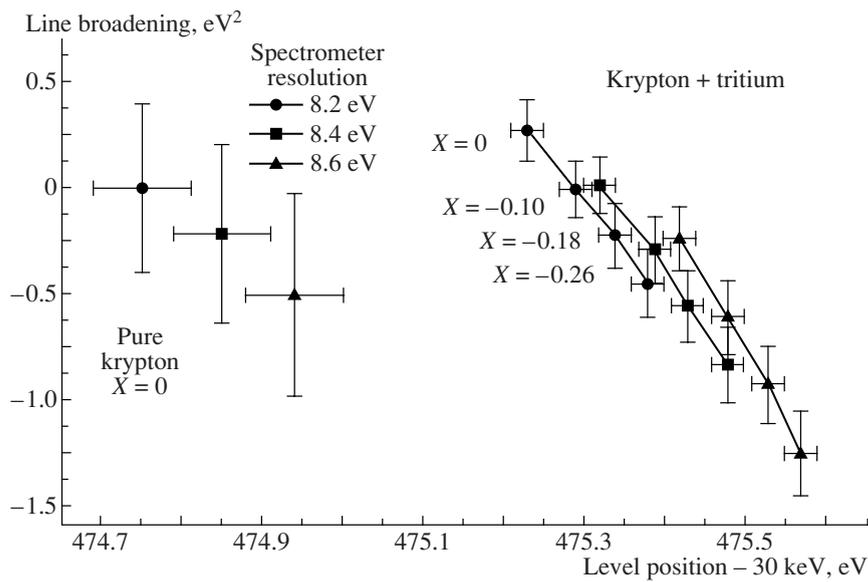


Abbildung 3.7: **Messung der Linienverbreiterungen und Linienlagen im Troitsk Experiment [34]**. Dargestellt sind drei Gruppen von Messungen mit unterschiedlichen Spektrometerrauflösungen. Diese wurden eingruppiert in Abhängigkeit der Konfiguration: reine Kryptonquelle bzw. eine gemischte Quelle und sind auch nach ihrer Quellstärke X sortiert.

Tabelle 3.5: Die Ergebnisse aus der Analyse der Troitsk-Quellpotential-Messungen [34]

Messung	Verbreiterung $\Delta\sigma^2$ in eV^2	Linienverschiebung ΔE_0 in eV
Run 40 (100A/15A) ¹	$-0,28 \pm 0,30$	$0,193 \pm 0,051$
Run 39 (100A/25A)	$-0,24 \pm 0,45$	$0,59 \pm 0,065$
Run 39 (100A/15A)	$+0,32 \pm 0,30$	$0,42 \pm 0,060$

¹ Run 39, Run 40 sind separate Messungen, die unter verschiedenen experimentellen Bedingungen durchgeführt wurden.

(mit dem Parameter $X = 0-0,26$) sind und als eine Gesamtverschiebung behandelt werden können. In der Analyse hat sich nicht gezeigt, dass die Anwesenheit von Tritium zu einer beträchtlichen Linienverbreiterung führt. Hingegen sind Linienverschiebungen zwischen Kryptonquelle und gemischten Quelle deutlich beobachtbar, die aber nur geringfügig von der Quellstärke abhängen.

In der Tab.3.4.2 wurde der Potential-Effekt auf der ^{83m}Kr $L3$ -Linie dargestellt. Weitere Untersuchungen haben gezeigt, dass die Verschmierung aus dem Effekt des elektrischen Potentials in der WGTS von Troitsk einen Wert von $0,4 \text{ eV}^2$ nicht überschreiten kann. Die negative Verschiebung des Neutrinomassenquadrats kann daher innerhalb des Intervalls von $-0,8 < \Delta m_\nu^2 \leq 0 \text{ eV}^2$ eingeschränkt werden [34].

3.5 Verwendung von Krypton im KATRIN Experiment

Um die in [9] detailliert beschriebene Design-Sensitivität des KATRIN Experiments zu erreichen, müssen alle Beiträge zur systematischen Unsicherheit genau bekannt sein, da nach der Beziehung 3.40 jede unbekannte Fluktuation σ zu einer Verschiebung der Messgröße Neutrinomassenquadrat führt. Die genaue elektrische Potentialdifferenz zwischen Quell- und Analyseort und deren Stabilität ist in diesem Zusammenhang eine maßgebliche systematische Unsicherheit. Dafür wird ein Präzisionsspannungsteiler verwendet und außerdem eine Kalibrationsquelle aus kondensiertem ^{83m}Kr aufgebaut [17].

Die Forderung von $\Delta m_{\text{sys}}^2 < 0,0075 \text{ eV}^2/c^4$ [9] impliziert z.B. eine Genauigkeit der Spannungskontrolle auf 3,3 ppm bei 18,6 keV. Daher erfolgt die HV-Stabilitätskontrolle nicht nur durch eine präzise elektronische Spannungsmessung, sondern ergänzend mit einer ^{83m}Kr -Kalibrationsquelle als natürlichem Standard. Tritt eine monoenergetische Kalibrationsquelle zur Stabilitätskontrolle hinzu, so bewirkt das hochfrequente Rauschen eine Störung in der Breite der Linie und wird damit nachweisbar. Die Kontrolle wird mit einer Reihe von Messungen mit unterschiedlichen Kalibrationsquellen an mehreren Einsatzorten innerhalb des KATRIN Experiments durchgeführt.

In der WGTS von KATRIN kann beigemischt ^{83m}Kr -Gas bei einer erhöhten Betriebstemperatur des Strahlrohrs bei $T = 120 \text{ K}$ verwendet werden. Messungen mit einer solchen Kalibrationsquelle im Hauptstrahlengang bedeuten eine erhebliche Störung des regulären Tritiummessbetriebs. Daher ist eine permanente synchrone Überwachung nicht möglich. Eine exakte Überprüfung der Potentialbedingung in der WGTS bleibt

daher auf Messpausen beschränkt.

Als Kalibrationsquelle in der CPS hat ^{83m}Kr eine monoenergetische Konversionslinie mit der Energie im Endpunktsbereich des Tritium- β -Spektrums und einer bekannten Winkelverteilung außerhalb der WGTS. Damit lässt sich die Transmissionsfunktion des Hauptspektrometers inklusive ihrer Ortsabhängigkeit für Elektronen in einem weiten Winkelbereich vermessen. Um eine langfristige 'Kontamination' des Hauptspektrometers mit einem β -Emitter zu vermeiden, muss die Kalibrationsquelle in der Hauptstrahlführung kurze Halbwertszeiten aufweisen. Diese Bedingung ist nur mit einer kondensierten ^{83m}Kr -Quelle erfüllt.

Außerhalb der Hauptstrahlführung wird eine Kalibrationsquelle in einem zweiten Spektrometer (Monitorspektrometer) vermessen. Die angelegte Hochspannung wird dadurch permanent überprüft. Da eine Kalibrationsquelle im Monitorspektrometer energetisch stabil sein muss, besteht hier wieder die Möglichkeit, eine kondensierte ^{83m}Kr -Quelle einzusetzen.

Zur Kontrolle von ortsabhängigen Abweichungen des Potentials kann eine Kombination aus ^{83m}Kr -Gasquelle in der WGTS und einer beweglichen Kalibrationsquelle in der CPS dienen. Die ^{83m}Kr -Gasquelle ist sensitiv auf räumliche Abweichungen des Quellpotentials und gleichzeitig abhängig von räumlichen Abweichungen im Hauptspektrometer. Eine Kalibrationsquelle in der CPS ist hingegen nur auf die Abweichungen am Hauptspektrometer empfindlich. Ist diese Quelle justierbar, so entfällt jede weitere Abhängigkeit von den lokalen Quelleigenschaften. Sowohl Abweichungen in der WGTS als auch im Hauptspektrometer können mittels der Ortsauflösung des Detektors und einer entsprechenden Modifikation der Transmissionsfunktion anhand der Daten von den Kalibrationsquellen registriert werden. Diese Kontrolle ist nur in Tritiummesspausen möglich. Der detaillierter Prozess ist in Abb. 3.8 dargestellt.

Zur Minimierung des störenden Einflusses einer zeitlichen Drift (Abb. 3.9) zwischen den Tritiummessphasen müssen alle Kalibrationsquellen in hohem Mass stabil bleiben. Wenn das aus der WGTS stammende Konversionselektronensignal stabil ist, so wird davon ausgegangen, dass keine zusätzlichen Fluktuationen die Tritiummessdaten beeinflussen. Ist dies nicht der Fall, dient die Kalibrationsquelle in der CPS der Identifikation der Ursache der Instabilität. Ist hierbei das Signal aus der CPS stabil, kann die Instabilität auf die WGTS zurückgeführt werden. Wenn es ebenfalls stabil ist, besteht ein Problem im Hauptspektrometer. Trotzdem kann eine Störung in der WGTS noch nicht ausgeschlossen werden und nur bei stabilem Spektrometer untersucht werden. In einem letzten Schritt kann schließlich ein Problem am Hauptspektrometer mit einer Kalibrationsquelle am Monitorspektrometer analysiert werden.

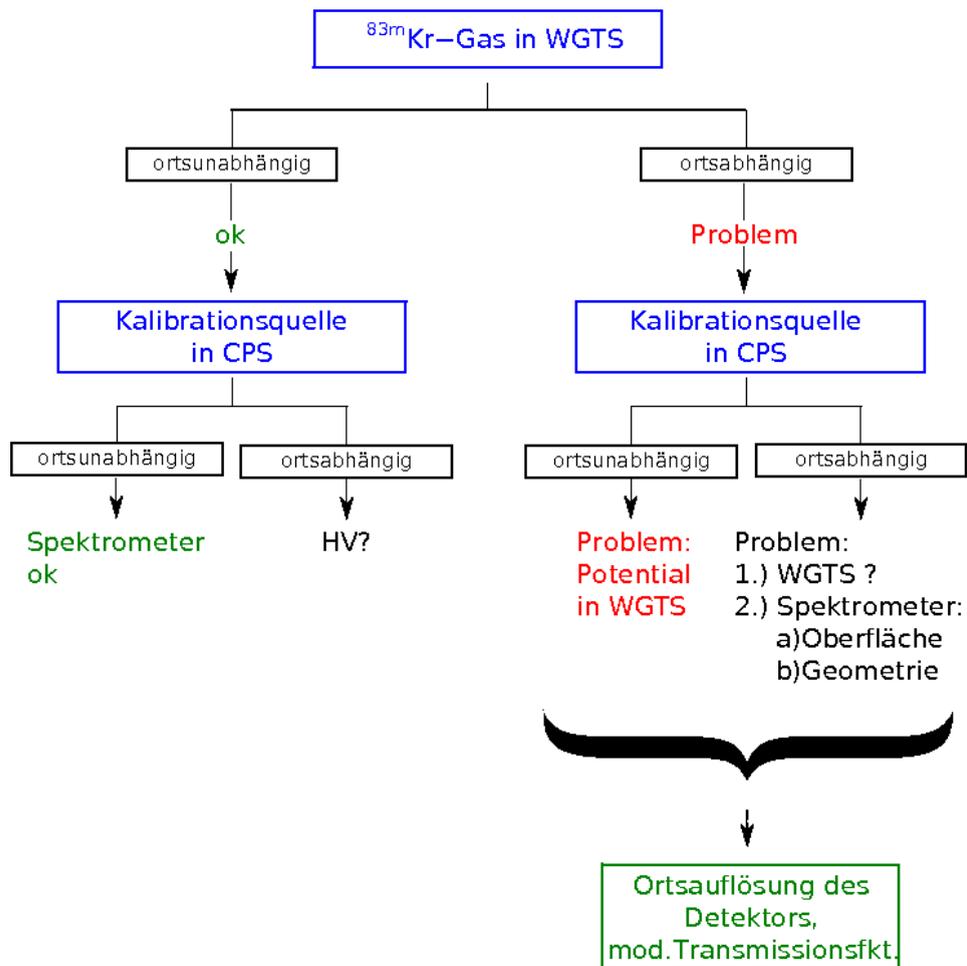


Abbildung 3.8: Ein Flussdiagramm zur Kontrolle der räumlichen Stabilität bzw. der Transmissionsfunktion des KATRIN-Aufbaus [17] Auf der linken Seite wird eine Instabilität der Tritiumdaten angenommen. Mittels der Kalibrationsquellen können dann die ortsabhängigen Potentialverhältnisse bestimmt werden und die Transmissionsfunktion angepasst werden.

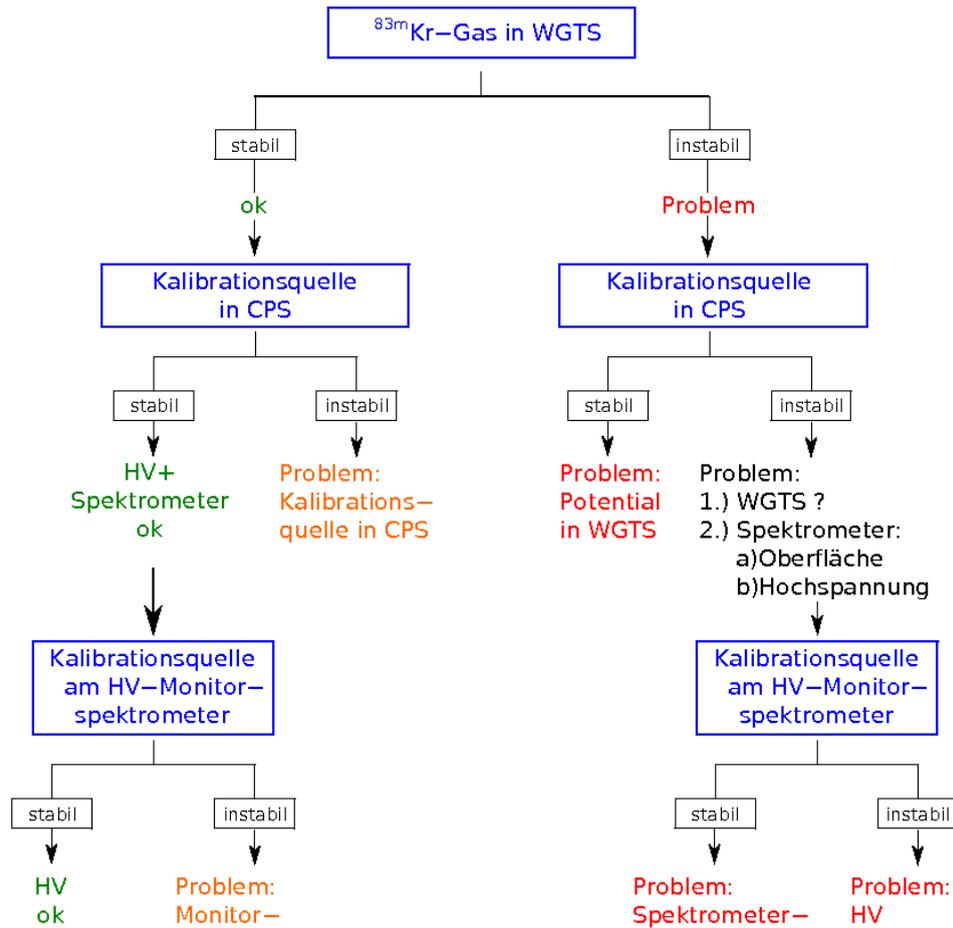


Abbildung 3.9: Ein Flussdiagramm zur Kontrolle der zeitlichen Stabilität des KATRIN-Aufbaus [17]. Auf der linken Seite ist folgender Sachverhalt dargestellt: wenn das Signal der gasförmigen ^{83m}Kr -Quelle in der WGTS stabil ist, kann zusätzlich mit einer Kalibrationsquelle in der CPS gemessen werden. Zeigt diese Instabilitäten, bedeutet dies zunächst kein primäres Problem für die Tritiumdaten, zieht aber die Kalibrationsquelle in Zweifel. Ist die Kalibrationsquelle in der CPS ebenfalls stabil, kann eine weitere Quelle im Monitorspektrometer auf ihre Stabilität überprüft werden. Ist sie stabil, so liegt kein Problem mit der Hochspannung vor, zeigt diese Linie eine Verschiebung, so liegt 'lediglich' ein Problem am Monitorspektrometer vor.

4. Modellierung des Krypton Modus der WGTS

In Kapitel 3 wurden die bisher berücksichtigten Konzepte des Kryptonmodus vorgestellt, die nun in die Simulation implementiert werden müssen. Die Simulation in dieser Arbeit wurde als Erweiterung des im Rahmen des KATRIN Experiments entwickelten Programmpakets Source Spectrum Calculations (SSC) [15] durchgeführt, in dem alle bisher für die Berechnung des Quellspektrums entwickelten Funktionen zusammengefasst wurden. In Kap. 4.1 wird die bisherige Struktur bzw. der Status von SSC kurz vorgestellt.

Neben den schon bestehenden ProgrammROUTINEN sind einige neue Methoden, die speziell für die Krypton Simulationen dienen, in SSC eingebaut worden. Damit kann das longitudinale Dichteprofil des Kryptongases durch numerische Lösung der gasdynamischen Differentialgleichungen beschrieben werden (Kap. 4.2).

Unter Berücksichtigung der eingestellten Quellparameter wird das erwartete Spektrum im Rahmen von SSC berechnet. Zusätzlich wird in Kap. 4.3 das Krypton-Spektrum bei verschwindendem Quellpotential berechnet, bevor in Kap. 4.4 das Spektrum für verschiedene angenommene Potentiale berechnet wird.

Abschließend werden die Ergebnisse der Simulation analysiert und damit das Messverfahren für WGTS-Potentiale getestet.

4.1 Bestehende Simulationen

Für die früheren Simulationen der Tritiumquelle wurden vorwiegend integrale Größen der gesamten Quelle verwendet. Zur Beschreibung der dynamischen Eigenschaften in der WGTS wurden beispielsweise nur die Säulendichte der Tritiummoleküle ρd oder mittlere i -fache Streuwahrscheinlichkeiten P_i der gesamten Quelle für ein konstantes Quellmagnetfeld $B_S = 3.6$ T berechnet [35]:

$$\rho d = 5 \cdot 10^{17} \text{ cm}^{-2}, \quad (4.1)$$

$$\begin{aligned} P_0 &= 0,413339 \\ P_1 &= 0,292658 \\ P_2 &= 0,167331 \\ P_3 &= 0,079129 \\ P_4 &= 0,031776. \end{aligned} \quad (4.2)$$

Allerdings werden Elektronen, die in unterschiedlichen Bereichen der Quelle entstehen, nicht mit gleichen Wahrscheinlichkeiten gestreut. Eine differenziertere Analyse

auf der Basis von mittleren Parametern ist naturgemäß nicht möglich, so dass Beiträge der deutlichen Abweichungen der Streuwahrscheinlichkeiten zum integrierten Spektrum nicht berücksichtigt wurden.

In SSC wurden erstmals alle zu berücksichtigenden Effekte eingebaut. Mit dieser Funktionalität können die Eigenschaften der WGTS gut beschrieben werden. Als eine Zusammenstellung aller Funktionen entwickelt sich der SSC Code durch die Optimierung bestehender Programmteile und die Einführung weiterer Funktionen aktuell immer weiter.

Der Code SSC (Kap. 4.1.2) hat die detaillierte Beschreibung und Modellierung der WGTS zum Ziel. Dafür ist eine 3D-Unterteilung der WGTS in genügend kleine Volumina erforderlich. In einem Schritt wurde eine longitudinal äquidistante Unterteilung für das 10 m-Strahlrohr ausgewählt. Unter Berücksichtigung der Inhomogenitäten auf dem Querschnitt ist eine Unterteilung in radiale und azimutale Richtung zwingend notwendig. Ausgehend davon, wie der zu untersuchende Quellparameter sich räumlich verändert, kann der Grad der Unterteilung angepasst werden. Dafür wurden genaue Beschreibungen aller Quellparameter in SSC miteinbezogen. Ein wichtiger Parameter hierbei ist die Gasdynamik in der Quelle, die im folgenden Abschnitt erläutert wird.

4.1.1 Gasdynamik in der WGTS

Eine grundlegende Anforderung an die Quelle im KATRIN Experiment ist erforderliche Stabilisierung der Säulendichte ρd der Tritiummoleküle auf dem 10^{-3} Level. Für eine genaue Beschreibung der WGTS spielt die Dichteverteilung der Tritiummoleküle eine zentrale Rolle. Im Rahmen der Gasdynamik kann die longitudinale Tritium-Dichteverteilung aus der Geometrie des Strahlrohrs, dem Einlassdruck p_{in} und dem Tritiumdurchsatz q bei konstanter WGTS-Temperatur berechnet werden. Dies gilt auch für ein longitudinales Temperaturprofil und auch die radiale/azimutale Temperaturvariation, die in Kombination zu einem 3D-Dichteprofil führen [36]. Gleichfalls muss die Dichteverteilung der Kryptonmatome entlang des Strahlrohrs bekannt sein. Aufgrund des höheren Siedepunkts von Krypton (bei Standarddruck $p = 1$ bar erfolgt dies bei $T_s = 119,79$ K) muss die Temperatur der WGTS erhöht werden. Für die Berechnungen dieser Arbeit wird eine überall in der WGTS konstante Temperatur $T = 120$ K angenommen. Dies wird experimentell durch den Austausch des Strahlrohrkühlmediums Neon durch Argon erreicht.

4.1.1.1 Tritium-Dichteprofil bei $T = 120$ K

Die T2-Kr-Gasmischung wird in der Mitte der WGTS in einer Injektionskammer ($x = 0$) in das Strahlrohr eingebracht. Die Kryptonkonzentration ist im Vergleich zu Tritium sehr gering (in der Größenordnung $10^{-4} \sim 10^{-5}$) [37]. Daher kann der Einfluss von Krypton auf das Tritium vernachlässigt werden. Untersuchungen von Kalempa und Sharipov in [37] basieren auf den nachfolgenden theoretischen Rechenmethoden: Für eine Gasmischung aus s Komponenten wird der dimensionslose Durchsatz J_α des Gases α definiert durch

$$J_\alpha = -\frac{L}{n_{in}} \left(\frac{m_{in}}{m} \right)^{1/2} \sum_{\beta=1}^s G_{\alpha\beta} \frac{n_\alpha}{n_\beta} \frac{dn_\beta}{dx}, \quad (4.3)$$

wobei L die Länge des Strahlrohrs ist und n_{in} , n_α und n_β die Injektionsdichte bzw. die Anzahldichte der Gasmischung der Gasanteile α und β bezeichnen. Die Parameter m_{in} und m sind dabei die Molmassen der Gasmischung. Der Massenstrom $G_{\alpha\beta}$ kann im Fall des reinen Tritiumgases durch folgende Beziehung beschrieben werden [36]

$$G_{11}(\delta_1) = \frac{8}{3\sqrt{\pi}} \frac{1 + 0,04\delta_1^{0,7} \ln \delta_1}{1 + 0,78\delta_1^{0,8}} + \left(\frac{\delta_1}{4} + 1,018 \right) \frac{\delta_1}{1 + \delta_1}, \quad (4.4)$$

$$\text{mit } \delta_1(x) = \frac{n_1(x)}{n_{1in}} \delta_{in},$$

$$\delta_{in} = \frac{rp_{in}}{\mu v_m} : \text{'Rarefaction' Parameter der Gasmischung am Injektionspunkt,}$$

$$v_m = \left(\frac{2R_g T}{m} \right)^{1/2} : \text{wahrscheinlichste Geschwindigkeit der Gasmoleküle,}$$

p_{in} : Gasdruck im Injektionspunkt,

$T = 120 \text{ K}$: WGTS-Temperatur im Kryptonmodus

μ : Gasviskosität bei 120 K

r : Radius des Strahlrohrs,

$R_g = 8,31441 \text{ J}/(\text{K} \cdot \text{mol})$: universelle Gaskonstante.

Damit ergibt sich der Durchsatz von gasförmigen Tritium zu

$$J_1 = -G_{11}(\delta_1) \frac{L}{n_{in}} \frac{dn_1}{dx}. \quad (4.5)$$

Durch Integration wird diese Gleichung umgeformt in

$$J_1 \cdot \left(\frac{L}{2} - x \right) = \frac{L}{\delta_{in}} \int_0^{\delta_1} G_{11}(\delta'_1) d\delta'_1. \quad (4.6)$$

Man kann nun die beiden Gleichungen 4.5 und 4.6 kombinieren. Mit bekannten Randbedingungen

$$n_1 = n_{1in}, \text{ bei } x = 0, \quad (4.7)$$

$$n_1 = 0, \text{ bei } x = \frac{L}{2}, \quad (4.8)$$

kann der 'Rarefaction' Parameter als eine Funktion der Strahlrohrachsen $\delta_1 = \delta_1(x)$ numerisch gelöst werden. Mit der Beziehung $\delta_1(x) = n_1(x)\delta_{in}/n_{1in}$ wird das Tritium-Dichteprofil entlang des Strahlrohrs bei 120 K ermittelt.

4.1.1.2 Entmischung von T₂ und Kr

Aufgrund des Unterschieds der mittleren Geschwindigkeit zwischen Komponenten der Gasmischung tritt in der WGTS ein Entmischungsphänomen auf. Im Vergleich mit Tritium hat Krypton eine so große Masse, dass die Entmischung aus dem Hintergrund nicht vernachlässigbar ist. Die Dichteverteilung der Kryptonmoleküle wird gleichfalls durch Formel 4.3 berechnet. Es muss hier noch die Auswirkung des Dichtegradienten auf den

Krypton-Durchsatz berücksichtigt werden. Die Koeffizienten $G_{\alpha\beta}$ werden ausgedrückt durch [36]

$$G_{21}(\delta_1) = \frac{0,037\delta_1^2}{1 + 0,193\delta_1^{1,93}} + \left(\frac{\delta_1}{4} + 1,018\right) \frac{\delta_1}{1 + \delta_1}, \quad (4.9)$$

$$G_{22}(\delta_1) = \frac{0,40365(1 + 9,4\delta_1 + 1,25\delta_1^2)}{1 + 12\delta_1 + 8,75\delta_1^2 + 1,2\delta_1^3}. \quad (4.10)$$

mit bekanntem $\delta_1 = \delta_1(x)$ aus Gl. 4.6. Ähnlich wie bei Gl. 4.5 erhält man für das Kryptongas die differentielle Gleichung

$$J_2 \frac{n_{1in}}{L} = -G_{21}(x) \frac{n_2}{n_1} \frac{dn_1}{dx} - G_{22}(x) \frac{dn_2}{dx}. \quad (4.11)$$

Um die unbekannte Konstante zu eliminieren, wird eine neue Variable $n_2^*(x) = \frac{n_2(x)}{J_2 n_{1in}}$ eingeführt, damit erhält man eine numerisch lösbare Gleichung

$$G_{21}(x) \frac{n_2^*}{n_1} \frac{dn_1}{dx} + G_{22}(x) \frac{dn_2^*}{dx} = -\frac{1}{L}, \quad (4.12)$$

mit der Randbedingung

$$n_2^* = 0, \text{ bei } x = \frac{L}{2}. \quad (4.13)$$

Gleichung 4.12 ist unabhängig von der Kryptongasdichte am Injektionspunkt, da für die Konzentration von Kr $C_2(x) = n_2/n$ die Bedingung

$$C_{2in} \ll 1 \quad (4.14)$$

vorausgesetzt wird.

Auf diese Weise erhält man die relative Konzentration $C_2(x)/C_{2in}$, die als eine charakteristische Größe des Kryptongases angegeben wird, durch eine Beziehung

$$C_2(x) = C_{2in} \frac{n_2^*(x)n_{1in}}{n_2^*(0)n_1(x)}. \quad (4.15)$$

Bisher wurden alle Rechenschritte im Rahmen der Gasdynamik vorgestellt. Die entsprechende Implementierung und die Ergebnisse werden in Kap. 4.2 gezeigt.

4.1.1.3 Dopplerverbreiterung

In Kap. 3.1.2 wurde bereits erwähnt, dass der Dopplereffekt eine Verbreiterung der Spektrallinien verursacht. In der WGTS besitzt ein Molekül aufgrund der thermischen Bewegung eine Geschwindigkeit, die immer eine in oder entgegen der Emissionsrichtung des Elektrons gerichtete Komponente besitzt. Ein mit dem Muttermolekül mitbewegtes Elektron besitzt eine erhöhte kinetische Energie, umgekehrt erniedrigt sich die Energie, wenn das Elektron entgegen der Molekülbewegungsrichtung emittiert wird. Bei Gasen folgen die Geschwindigkeiten der Moleküle einer Maxwell-Boltzmann-Verteilung. Die

daraus resultierende Verbreiterung des Elektronenspektrums kann durch eine Gaußkurve beschrieben werden. Ihre Standardabweichung hängt von der Temperatur T und der Molekülmasse M in atomaren Einheiten ab [38]

$$\sigma = 4(\ln 2)^{1/2} \left(\frac{m_e}{M} kT E_{kin} \right)^{1/2} = 0,078 \left(\frac{kT E_{kin}}{M} \right)^{1/2}, \quad (4.16)$$

mit der Boltzmann-Konstanten k und der kinetischen Energie E_{kin} des Elektrons. Für die Konversionselektronen aus ^{83m}Kr mit der Energie 17,8 keV erhält man bei 120 K die Standardabweichung $\sigma = 116,2 \text{ meV}$.

Bei den folgenden Berechnungen wird die von der Temperatur abhängige Dopplerverbreiterung für alle Stellen in der WGTS gleichermaßen behandelt, da der reelle Temperaturgradient und die entsprechende Geschwindigkeitsverteilung der Moleküle in dieser Arbeit nicht berücksichtigt wurden.

4.1.2 Integriertes Spektrum

Im KATRIN Experiment wird die Rate der durch das Spektrometer transmittierten Elektronen vom Detektor gemessen. Das von der Energie abhängige differentielle Spektrum kann daher nicht direkt ermittelt werden. Das Messprinzip eines MAC-E-Filters basiert auf der Messung des integrierten Spektrums. Durch Variation des Spektrometerpotentials qU kann man die Untergrenze der Elektronenenergien verändern, da nur der hochenergetische Teil mit $E > qU$ des differentiellen Spektrums passieren kann. Durch präzise Kalibration der Quellparameter sei nachfolgend das differentielle Spektrum absolut bekannt. Die am Detektor registrierte Ereignisanzahl N hängt dann ausschließlich vom angelegten Spektrometerpotential qU ab:

$$N(qU) = N t_U \int_0^\infty \frac{dN}{dE} \cdot R(E, qU) dE \quad (4.17)$$

mit der Anzahl der Tritiummoleküle bzw. Kryptonatome N in der WGTS und der Messzeit t_U ¹. Die differentielle Zählrate dN/dE ist durch Gl. 1.13 für Tritium oder durch Gl. 3.15 für Krypton ausgedrückt. Zur Berechnung des integrierten Betaspektrums und des Konversionsspektrums werden im Folgenden die notwendigen Modifikationen des differentiellen Spektrums und die Quellparameter mit Ausnahme des zuvor ausführlich diskutierten Dichteprofiles kurz vorgestellt. Ergänzende Details finden sich in der Diplomarbeit von M. Hötzel [15].

4.1.2.1 Modifikationen des differentiellen Spektrums und Quellparameter

Um eine exakte Beschreibung des differentiellen Spektrums zu erreichen, müssen noch einige zerfallsspezifische Korrekturen und experimentelle Effekte berücksichtigt werden:

- Der Einfluss der Emission der virtuellen und reellen Photonen auf die Energie des Elektrons lässt sich durch die Strahlungskorrekturen beschreiben, die bei der Berechnung als zusätzlicher energieabhängiger Faktor im differentiellen Spektrum verwendet werden.

¹Für alle Berechnungen sei $t_U = 1 \text{ s}$.

- Zu jedem Zeitpunkt muss bekannt sein, wie viele Moleküle sich in der WGTS befinden. Daher ist die Tritiumreinheit bei bekannter Säulendichte der Quelle ein wichtiger Parameter.
- Beim Betazerfall der Tritiummoleküle entstehen zweiatomige Tochtermoleküle ${}^3\text{HeT}^+$, die sowohl elektronische Anregungszustände als auch Rotations- und Vibrationsanregungen besitzen. Für Kryptonatome hingegen spielen nur elektronische Anregungszustände eine Rolle. Ein derartiger Anregungszustand beansprucht einen gewissen Teil der Zerfallsenergie, so dass die kinetische Energie des Elektrons und des Neutrinos entsprechend reduziert wird. Im Rahmen von genauen Berechnungen für die Energie E_f und P_f aller angeregten Endzustände kann eine sogenannte Final State Distribution (FSD) angegeben werden, die gemeinsam mit der Strahlungskorrektur $f_{\text{rad}}(E)$ das differentielle Spektrum wesentlich modifiziert.
- Bei der niedrigen Temperatur $T = 30\text{ K}$ besitzen die Moleküle in der WGTS noch nicht vernachlässigbare thermische Geschwindigkeiten². Unter Berücksichtigung des davon verursachten Dopplereffekt lässt sich eine Verbreiterung des differentielle Spektrums berechnen, die vom Temperaturprofil der Quelle bzw. dem Geschwindigkeitsprofil der Moleküle abhängt.

Magnetfeld

Das Profil der Magnetfeldstärke B_S in der WGTS ist im Zusammenhang mit der Magnetfeldkonfiguration des gesamten Experiments wichtig, da dies bei einem MAC-E-Filter einen entscheidenden Einfluss auf die Messungen hat. Zur Berechnung dieses Magnetfeldes wurden alle beim KATRIN Experiment verwendeten supraleitenden Solenoide und ihre Geometrie berücksichtigt.

Temperaturprofil

Die Temperatur der WGTS und die davon abhängigen Geschwindigkeiten der Quellmoleküle beeinflusst über die Dopplerverbreiterung die Messung der Neutrinomasse. Außerdem hängt die Dichteverteilung in der Quelle stark von der Temperatur des Strahlrohrs ab. Die durch spezielle Zwei-Phasenmechanismen gekühlte WGTS (siehe Kap. 2.2.1) verfügt mit dem 'inner radiation shield' eine gute Abschirmung der externen Wärmeeinträge. Von besonderer Relevanz ist dabei die störende Wärmestrahlung durch die Pumpstutzen, die zu einem longitudinalen Temperaturprofil führt. Das beidseitig am Strahlrohr angelötete Kühlsystem auf der Basis von Zwei-Phasenkryofluiden führt darüber hinaus zu einem schwächeren Temperaturgradienten in radialer und azimuthaler Richtung. Das dafür zuständige Programm kombiniert die beiden zuvor genannten Effekte zu einem 3D-Temperaturprofil der WGTS.

Geschwindigkeitsprofil der Tritiummoleküle

Die Geschwindigkeiten der Tritiummoleküle in der WGTS folgen einer wohlbekanntem

²Die mittlere Geschwindigkeit beträgt $\bar{v} \approx 350\text{ m/s}$.

Maxwell-Boltzmann-Verteilung. Diese Geschwindigkeitsverteilung muss aufgrund der durch ständige Injektion und Abpumpen entstehenden Tritiumzirkulation noch modifiziert werden. Durch eine numerische Berechnung lässt sich das Geschwindigkeitsprofil in der WGTS berechnen und verwenden.

4.1.2.2 Räumliche Unterteilung der Quelle

Für eine detaillierte Simulation muss man zur Implementierung der auftretenden Variationen die Ortsabhängigkeit der Quellparameter berücksichtigen, wie die Anzahldichte der Moleküle, Streuwahrscheinlichkeiten und Elektronen-Energieverluste in der Antwortfunktion. Durch eine Unterteilung der Quelle in kleine Volumenelemente V_i kann man für jedes V_i mit den in ihm näherungsweise homogenen physikalischen Quellparametern ein Subset des integrierten Spektrums berechnen. Schließlich lässt sich durch Summation der Subsets das integrierte Spektrum der gesamten WGTS berechnen, das von KATRIN gemessen wird. Dieses Prinzip ist für den Tritium Modus bei 30 K im Programmpaket SSC implementiert, welches im folgenden beschrieben wird.

Longitudinale Unterteilung

Aufgrund der in der longitudinalen Richtung stark variierenden Dichteverteilung und damit auch Streuwahrscheinlichkeiten (Kap. 4.1.2.3) ist primär eine longitudinale Unterteilung des 10 m-Strahlrohrs notwendig. Diese Unterteilung der WGTS in genügend kleine Volumina V_i ermöglicht die detaillierte Beschreibung und Modellierung einzelner Quellbereiche als dünne Scheiben, in denen die Quellparameter homogen behandelt werden können. Diesen Scheiben sollen den dort herrschenden physikalischen Größen zugeordnet und daraus der Beitrag zum Quellspektrum berechnet werden. Der Grad der Aufteilung wird nach der erforderlichen Genauigkeit ausgewählt. Gleichzeitig muss der von der feinen Aufteilung verursachte Rechenaufwand berücksichtigt werden. Bei der Betrachtung spezieller Quellparameter kann dabei eine nicht äquidistante Unterteilung sinnvoll sein. Zur Untersuchung des Krypton-Dichteprofiles sollte die Unterteilung nahe des Mittelpunkts sehr fein, im Bereich nahe an den Pumpstützen eher grob sein, da die Dichte in der Mitte der WGTS um bis zu 2 Ordnungen größer als im Bereich des 1. Pumpports ist. In dieser Arbeit wurde als erster Ansatz zur exploratorischen Untersuchung der Effekte eine longitudinal äquidistante Unterteilung ausgewählt.

Radiale und azimutale Unterteilung

Um eine vollständige Beschreibung der WGTS zu ermöglichen, muss eine dreidimensionale Unterteilung der Quelle implementiert werden. Da auch radiale und azimutale Inhomogenitäten der Quellparameter nicht vernachlässigbar sind, ist eine Unterteilung in diese orthogonalen Richtungen sinnvoll. Der Querschnitt der WGTS wird daher in kleine Segmente aufgeteilt, in der die physikalischen Parameter als konstant angenommen und einzelne Berechnungen durchgeführt werden. Da die radialen und azimutalen

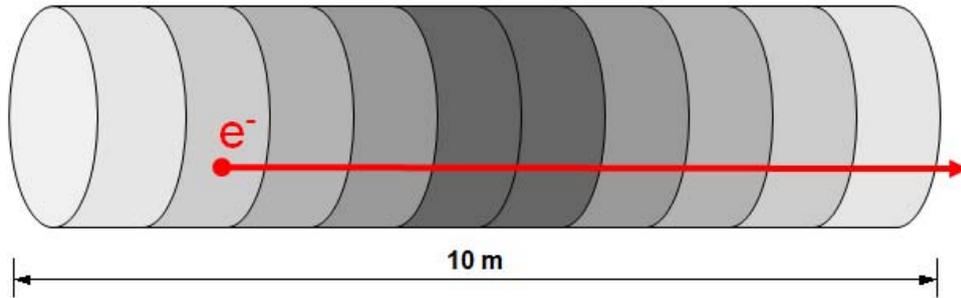


Abbildung 4.1: **Schematische longitudinale Unterteilung der WGTS in 10 äquidistante Bereiche** [15]. Die Graustufen bezeichnen das Dichteprofil in der WGTS. Ein im rückwärtigen Teil der Quelle emittiertes Elektron muss eine längere Weglänge durchlaufen und erfährt mit höherer Wahrscheinlichkeit eine Streuung als ein Elektron aus dem spektrometernahen Ende der Quelle. Die einzelnen Bereiche der Quelle werden daher separat betrachtet.

Abhängigkeiten der Quellparameter noch nicht komplett bekannt sind, wurde im Rahmen dieser Arbeit nur eine longitudinale Unterteilung verwendet.

4.1.2.3 Antwortfunktion und integriertes Spektrum

Emittierte Konversionselektronen können trotz einer ausreichender Startenergie den Detektor nicht erreichen, wenn sie auf ihrem Weg durch die Quelle mit Quellmolekülen inelastisch streuen. Außerdem modifiziert die Transmissionsfunktion (siehe unten) als fundamentale Spektrometereigenschaft den Anteil transmittierter Elektronen. Der Einfluss solcher Quell- und Spektrometereffekte auf das integrierte Spektrum wird durch die Antwortfunktion

$$R(E, qU) = \int_0^{E/2} T(E - \epsilon, qU) \cdot (P_0 \delta(\epsilon) + P_1 f(\epsilon) + P_2 (f \otimes f)(\epsilon) + \dots) d\epsilon \quad (4.18)$$

beschrieben. Sie ist eine Faltung der Transmissionsfunktion T mit den gewichteten Energieverlusten $f(\epsilon)$ (siehe unten). Die Grundlagen finden sich in [15] und werden hier nur kurz vorgestellt.

Transmissionsfunktion

Mit der Endpunktsenergie des Betaspektrums $E_0 = 18575 \text{ eV}$, der Magnetfeldstärke

in der Analysierebene des Spektrometers $B_A = 3 \cdot 10^{-4} \text{ T}$ und dem maximalen Magnetfeld $B_{\max} = 6,0 \text{ T}$ ergibt sich die Energieauflösung eines MAC-E-Filters [9] zu:

$$\Delta E = E \cdot \frac{B_A}{B_{\max}} = 0,93 \text{ eV}. \quad (4.19)$$

Damit wird die Transmissionswahrscheinlichkeit des Elektrons im Spektrometer durch die folgende Transmissionsfunktion beschrieben

$$T(E, qU) = \begin{cases} 0 & E - qU \leq 0 \\ \frac{1 - \sqrt{1 - \frac{E - qU}{E} \frac{B_S}{B_A}}}{1 - \sqrt{1 - \frac{\Delta E}{E} \frac{B_S}{B_A}}} & 0 < E - qU \leq \Delta E \\ 1 & E - qU > \Delta E \end{cases} \quad (4.20)$$

mit dem bekannten Magnetfeld $B_S = 3,6 \text{ T}$, dem Spektrometerpotential qU und der Energie des Elektrons E . Elektronen mit zu kleiner Longitudinalenergie können das Spektrometerpotential nicht überwinden, die Transmission ist in diesem Fall Null. Die endliche Energieauflösung bedingt durch die isotrope Winkelverteilung des β -Emitters eine partielle Transmission von Elektronen mit einer Energie nahe an der Potentialbarriere, wohingegen Elektronen mit einer Energie größer als $qU + \Delta E$ ungehindert passieren können.

Inelastische Streuung und Energieverluste

Die Elektronen können an den Molekülen in der Quelle inelastisch streuen. Die Wahrscheinlichkeit des Energieverlusts ϵ durch eine inelastische Streuung lässt sich durch eine charakteristische Energieverlustfunktion

$$f(\epsilon) = \begin{cases} A_1 \exp\left(-\frac{2(\epsilon - \epsilon_1)^2}{\omega_1^2}\right) & \text{für } \epsilon < \epsilon_c \\ A_2 \frac{\omega_2^2}{\omega_2^2 + 4(\epsilon - \epsilon_2)^2} & \text{für } \epsilon \geq \epsilon_c \end{cases} \quad (4.21)$$

beschreiben [39] mit den Parametern $A_1 = 0,204 \pm 0,001$, $\omega_1 = 1,85 \pm 0,02$, $A_2 = 0,0556 \pm 0,0003$, $\omega_2 = 12,5 \pm 0,1$, $\epsilon_2 = 14,30 \pm 0,02$, $\epsilon_1 = 12,6$ und $\epsilon_c = 14,09$. Sie wurde durch die Untersuchung der Streuung von $18,6 \text{ keV}$ Elektronen an Tritium- und Deuteriummolekülen mit dem Troitsk-Spektrometer ermittelt. Vor der Diskussion und weiteren Untersuchungen für Elektronen in anderen Energiebereichen (Krypton-Konversionselektronen bei 30 keV) werden diese Parameter als Näherungswerte übernommen.

Streuwahrscheinlichkeiten

Die Energieverlustfunktion der 1-, 2-, und vielfach Streuung kann durch die Formel 4.21 und ihre Faltungen $(f \otimes f \otimes \dots)(\epsilon)$ festgelegt werden. Für eine vollständige Beschreibung der Energieverluste müssen noch die Streuwahrscheinlichkeiten P_i bekannt sein, mit der eine 1-fache oder mehrfache Streuung in der Quelle erfolgen kann.

Die Wahrscheinlichkeit P_i einer i -fachen Streuung eines Elektrons, das an der longitudinalen Position z und unter dem Winkel θ emittiert wird, ist gegeben durch eine Poissonverteilung

$$P_i(z, \theta) = \exp(-\lambda\sigma_{tot}) \frac{(\lambda\sigma_{tot})^i}{i!}, \quad (4.22)$$

mit der effektiven Säulendichte

$$\lambda(z, \theta) = \frac{1}{\cos\theta} \int_z^l \rho(z') dz' \quad (4.23)$$

Dabei beträgt der totale Wirkungsquerschnitt der Streuung an Tritiummolekülen $\sigma_{tot} = 3,40 \cdot 10^{-18} \text{ cm}^2$ bei 18,6 keV Elektronen [39]. Der Parameter $\rho(z)$ bezeichnet dabei die Dichte der Tritiummoleküle an der Position z .

Integriertes Spektrum der gesamten WGTS

Für die Berechnung des integrierten Spektrums muss noch der Effekt des Magnetfeldes beim Elektronen-Transport berücksichtigt werden. Mit der Magnetfeldkonfiguration von KATRIN werden Elektronen, die unter einem Winkel größer als dem Grenzwert θ_{\max} emittiert werden, durch den magnetischen Spiegeleffekt reflektiert und gelangen nicht zum Detektor. Dieser Grenzwert ergibt sich zu

$$\theta_{\max} = \arcsin\left(\frac{B_S}{B_{\max}}\right) \approx 50,7^\circ \quad (4.24)$$

für ein Quellmagnetfeld $B_S = 3,6 \text{ T}$ und ein maximales Magnetfeld $B_{\max} = 6,0 \text{ T}$. Dementsprechend dürfen nur die Elektronen mit Emissionswinkeln $\theta < \theta_{\max}$ in der Berechnung des integrierten Spektrums berücksichtigt werden. Ihr Verhältnis zur Gesamtzahl der isotrop emittierten Elektronen kann durch eine Raumwinkelbetrachtung festgelegt werden

$$\Omega = \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{\theta_{\max}} \sin\theta d\theta = 2\pi(1 - \cos\theta_{\max}) \quad (4.25)$$

$$\frac{\Omega}{4\pi} = \frac{1 - \cos\theta_{\max}}{2}. \quad (4.26)$$

Das integrierte Spektrum muss demzufolge mit $\frac{1 - \cos\theta_{\max}}{2}$ multipliziert werden. Im Unterteilungselement s mit der Querschnittsfläche A und Länge d ergibt sich für die mittlere i -fache Streuwahrscheinlichkeit P_i

$$P_i = \frac{1}{d(1 - \cos\theta_{\max})} \int_0^d dz \int_0^{\theta_{\max}} P_i(z, \theta) \sin\theta d\theta \quad (4.27)$$

mit $P_i(z, \theta)$ aus Gl. 4.22.

Die integrierte Rate der Zerfallselektronen bei einer lokal konstanten Kryptondichte oder Tritiumdichte ρ_s beträgt nach Gl. 4.17

$$N_s(qU) = \frac{1 - \cos\theta_{\max}}{2} \cdot \rho_s A d t_U \int_0^\infty \frac{dN_V}{dE} \cdot R_s(E, qU) dE \quad (4.28)$$

Tabelle 4.1: **Quellparameter und ihre Standardwerte [15].**

Länge des Strahlrohrs	$L = 10 \text{ m}$
innerer Radius des Strahlrohrs	$R = 4,5 \text{ cm}$
Säulendichte von Tritium	$\rho d = 5 \cdot 10^{17} \text{ cm}^{-2}$
Temperatur	$T = 30/120 \text{ K}$
longitudinaler Temperaturgradient	$\Delta T = 0,0 \text{ K}$
Tritiumreinheit	$\epsilon_{\text{T}_2} = 0,95$
Magnetfeld in der Analysierebene	$B_{\text{A}} = 3 \cdot 10^{-4} \text{ T}$
maximales Magnetfeld	$B_{\text{max}} = 6,0 \text{ T}$
Endpunkt des Tritium- β -Spektrum	$E_0 = 18575 \text{ eV}$
Neutrinomasse	$m_{\nu} = 0,0 \text{ eV}$
Untergrundrate	$\Gamma_{\text{b}} = 10 \text{ mHz}$
Detektoreffizienz	$\epsilon_{\text{Det}} = 0,9$

Schließlich wird das integrierte Spektrum der gesamten WGTS ermittelt durch

$$N(qU) = \sum_s N_s(qU). \quad (4.29)$$

Das Ziel dieser Arbeit ist die Beschreibung und Modellierung der WGTS im Kryptonmodus, die auf der bestehenden Implementierung für den Tritiumbetriebsmodus basiert. Die meisten Funktionen in SSC, die für die Beschreibung des Quellsystems und der Spektrometerparameter (Magnetfeld, Temperaturprofil) dienen, können für die Simulation dieser Arbeit leicht angepasst oder ohne Korrektur verwendet werden. Die in dieser Arbeit verwendete Quellparameter und ihre Standardwerte sind in Tab. 4.1 aufgelistet. Für die physikalischen Größen, die spezifisch die Eigenschaft der Kryptonatome und ihres Konversionsprozesses beschreiben, wurden spezifische Modellierungen konstruiert. In den folgenden Kapiteln werden die im Rahmen dieser Arbeit durchgeführten Simulationen für die Dichteverteilung der Kryptonatome in der WGTS und das integrierte Konversionsspektrum vorgestellt.

4.2 Implementierung der Gasdynamik

Mit den vorgegebenen Eingabeparametern in Tab. 4.2 und Tab. 4.1 können die in Kapitel 4.1.1 vorgestellten gasdynamischen Gleichungen numerisch gelöst werden. Im ersten Schritt wurde eine Berechnung für das Dichteprofil von Tritium bei $T = 120 \text{ K}$ basierend auf [36] implementiert.

Ausgehend von der Kopplung von Gl. 4.5 und 4.6 lässt sich der Rarefaction Parameter

Tabelle 4.2: Eingabeparameter der Quelle [37].

Temperatur	$T = 120 \text{ K}$
gesamter Injektionsdruck	$p_{in} = 13,80 \mu\text{bar}$
Injektionsdruck von T ₂	$p_{1in} = 13,79 \mu\text{bar}$
Injektionsdruck von Kr	$p_{2in} = 13,80 \times 10^{-3} \mu\text{bar}$
Rarefaction Parameter im Injektionspunkt	$\delta_{in} = 13,8$

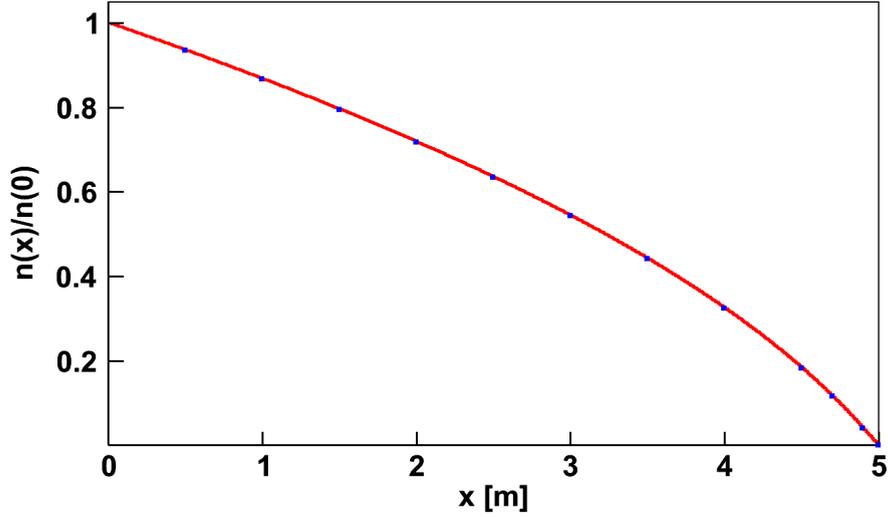


Abbildung 4.2: **Relative Dichteverteilung von Tritium bei $T = 120 \text{ K}$.** Die rote Kurve bezeichnet die im Rahmen dieser Arbeit numerisch berechnete relative Dichteverteilung des Tritium $n(x)/n_{in}$. Zum Vergleich werden die Literaturwerte aus den numerischen Rechnung in [36] als blaue Punkte dargestellt.

mit Anfangswert $\delta_1(0) = \delta_{in}$ iterativ ermitteln

$$\begin{aligned}
 -G_{11}(\delta_1) \frac{L}{n_{in}} \frac{dn_1}{dx} \cdot \left(\frac{L}{2} - x\right) &= \frac{L}{\delta_{in}} \int_0^{\delta_1} G_{11}(\delta'_1) d\delta'_1 \\
 -G_{11}(\delta_1) \frac{\delta_1(x + \Delta x) - \delta_1(x)}{\Delta x} \left(\frac{L}{2} - x\right) &= \int_0^{\delta_1} G_{11}(\delta'_1) d\delta'_1. \quad (4.30)
 \end{aligned}$$

Das Ergebnis dieser Berechnung wird in Abb. 4.2 mit der relativen Anzahldichte $n(x)/n_{in}$ gezeigt.

Im zweiten Schritt wurde für die Berechnung mit Krypton eine analoge Behandlung durchgeführt, die auf dem Ergebnis der Tritiumberechnung basiert. Der Ausgangs-

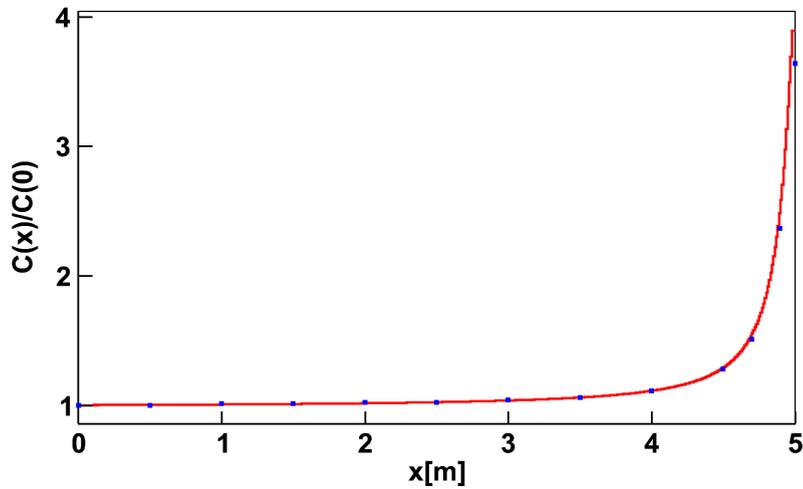


Abbildung 4.3: **Relative Konzentration von Krypton.** Die im Rahmen dieser Arbeit berechnete relative Konzentration des Krypton C_2/C_{2in} wird als rote Kurve aufgetragen. Die Literaturwerte aus numerischen Rechnungen in [36] sind als blaue Punkte aufgetragen.

punkt dafür ist die numerische Lösung der Gleichung 4.12 mit der Randbedingung $n_2(L/2) = 0$.

$$G_{21}(x) \frac{n_2^*(x) n_1(x + \Delta x) - n_1(x)}{\Delta x} + G_{22}(x) \frac{n_2^*(x + \Delta x) - n_2^*(x)}{\Delta x} = -\frac{1}{L} \quad (4.31)$$

Durch eine angemessene Auswahl des Intervalls Δx erfolgt eine komplette Berechnung für die T₂-Kr Quelle. Ihr Ergebnis für die relative Konzentration des Krypton C_2/C_{2in} wird in Abb. 4.3 dargestellt.

In beiden Abbildungen wird deutlich, dass die für diese Arbeit berechneten Dichteprofile die Werte von Kalempa und Sharipov [37] sehr gut reproduzieren. Damit lässt sich nun die Krypton-Konzentration an die im Experiment herrschenden Bedingungen anpassen. Für die folgende Simulation wird die Kr-Anzahldichte beliebiger Position in der Quelle $n_2(x)$ durch die Beziehung $n_2 = \frac{C_2}{C_{2in}} \cdot n_1 C_{2in}$ und eine angemessene Interpolation angegeben. Die Anzahldichte der Tritium-Moleküle n_1 lässt sich nach der in KATRIN gewünschten Säulendichte $\rho d = 5 \times 10^{17} \text{ cm}^{-2}$ festlegen, während die Konzentration im Injektionspunkt C_{2in} durch die experimentell herrschenden Bedingungen bestimmt wird.

4.3 Implementierung des Krypton-Spektrums

Differentielles Krypton Spektrum

In Kap. 4.1 wurden physikalischen Größen vorgestellt, die für die Beschreibung der Konversionsspektren erforderlich sind. Mit den in Tab. 3.1 aufgelisteten Größen (Linienlage,

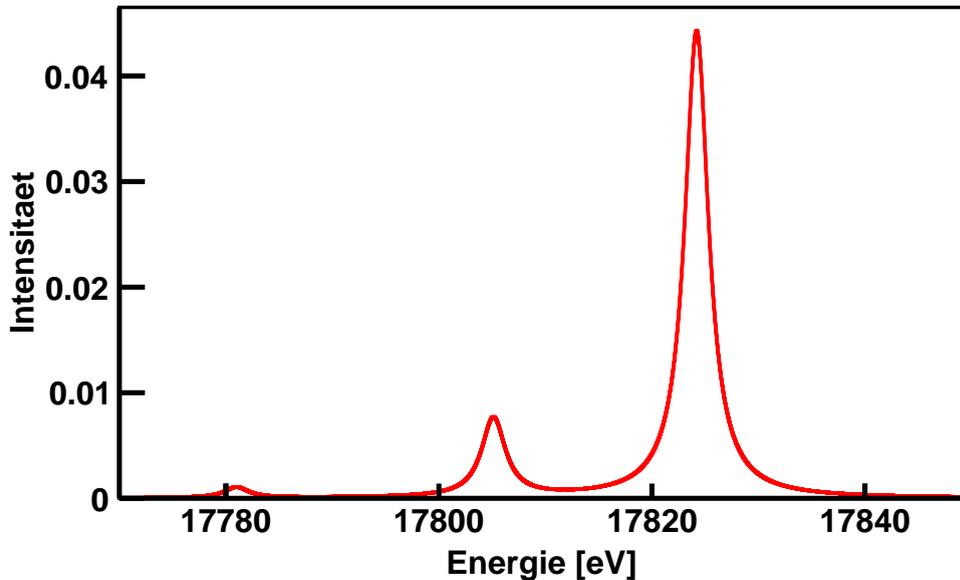


Abbildung 4.4: **K32-Linie mit Satelliten**. Der Peak mit der höchsten Amplitude ist die K -Konversionslinie. Die beiden Nebensatelliten an der niederenergetischen Seite bezeichnen von links nach rechts die $4s$ - und $4p_{1/2}/4p_{3/2}$ -Shakelinien. Die $4p_{1/2}$ -Linie und $4p_{3/2}$ -Linie sind wegen der überlappenden Linienlage nicht unterscheidbar. Die Breite einer Linie kann zumindest nicht kleiner als die Breite der ursprünglichen Konversionslinie sein. Diese Untergrenze ist hier 2,71 eV.

Linienbreite und Konversionskoeffizient) lassen sich nun die erwarteten Konversionslinien ohne Schwierigkeiten charakterisieren. Unter Berücksichtigung der Shake Off/Up Linien (Kap. 3.3) erhält man das komplette Spektrum. In Abb. 4.4- 4.6 sind differentielle Spektrallinien, die im KATRIN Experiment verwendet werden können, exemplarisch dargestellt.

In Abb. 4.4 wird die Spektrallinie im Bereich der K -Konversion gezeigt. Zur Bestimmung der Intensitäten und Linienlagen für die Satelliten wurden die theoretischen Werte in Tab. 3.2 und 3.3 verwendet. Die gesamte Intensität dieses Bereichs, der die Hauptlinie und die Shakelinien in Bezug auf K -Konversion einschließt, wurde zu $A_K = \frac{\alpha_K}{\sum \alpha_i} \approx 0,237$ bestimmt. Der Beitrag der Hauptlinie zu A_K beträgt 79,5%, die fehlenden 20,5% werden durch Shake-Off/Up Effekte beigetragen. Die wichtigsten Beiträge hierzu kommen von den $4s$ und $4p_{1/2}/4p_{3/2}$ Nebensatelliten mit 1,80 %, 4,39 % und 9,06 %.

In Abb. 4.5 sind die erwartete $L_{II}32$ -Konversionslinien gezeigt. Die Intensität des $L_{II}32$ -Bereichs beträgt ca. 0,246, davon ergeben sich die relativen Anteile der Komponenten der L_{II} -Linie: 82,2 %, $4s$: 1,53 %, $4p_{1/2}$: 3,86 % und $4p_{3/2}$: 8,13 %. Für die Breite der Shakelinien wurde wiederum ein Minimalwert (hier 1,25 eV) vorausgesetzt.

Die Spektrallinien der $L_{III}32$ -Konversion und ihre Nebensatelliten, die insgesamt die größ-

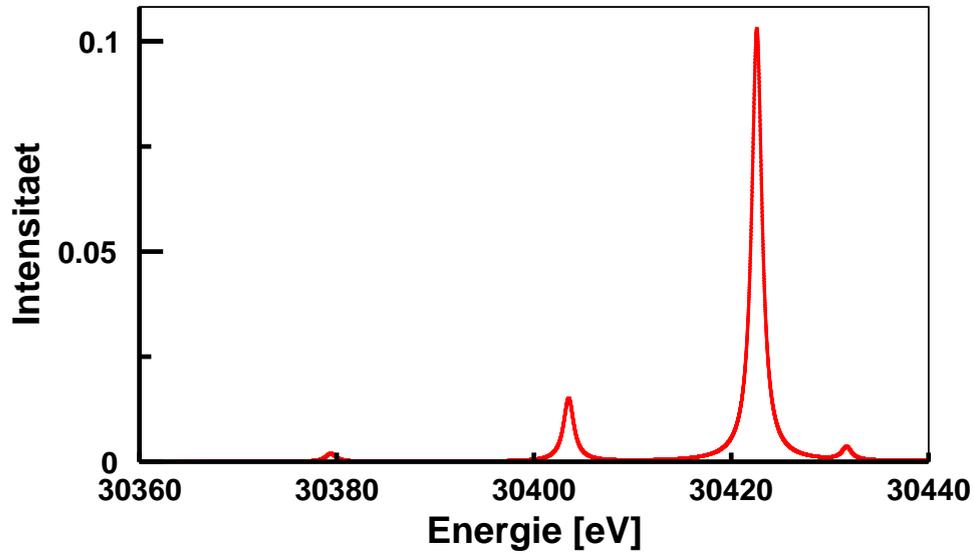


Abbildung 4.5: $L_{II}32$ -Linie mit Satelliten. Neben der Hauptlinie (30422,6 eV) sind dazu zwei Nebenlinien an der niederenergetischen Seite aufgetragen, die durch $4s$ (30379,4 eV) und $4p_{1/2}/4p_{3/2}$ (30403,52 eV) Shake Off/Up Effekte verursacht werden. An der anderen Seite der Konversionslinie taucht die $4s$ -Shakelinie (30431,7 eV) der $L_{III}32$ -Konversion auf.

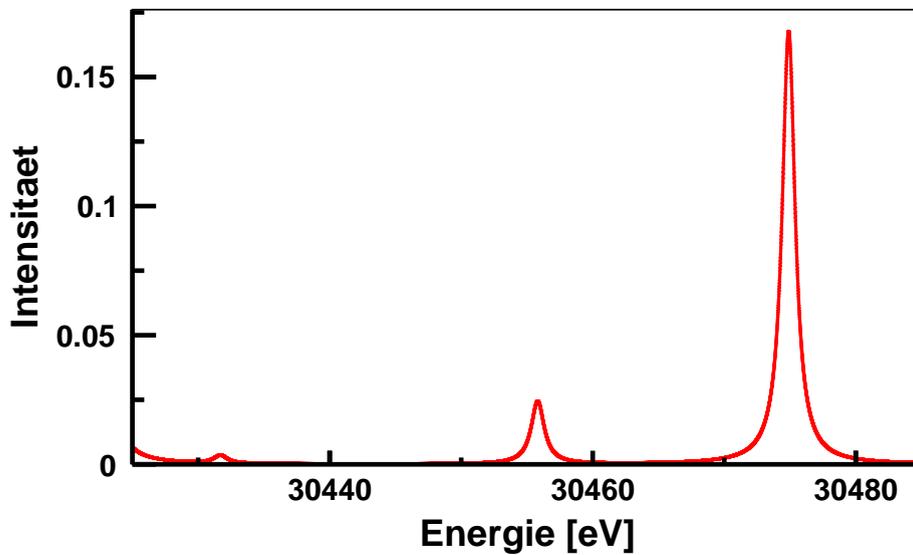


Abbildung 4.6: $L_{III}32$ -Linie mit Satelliten. Die Konversionslinie befindet sich bei $E = 30474,9$ eV mit dem Intensitätsverhältnis von 82,3%. Daneben liegen wieder zwei Satelliten $4s$ (30431,7 eV) und $4p_{1/2}/4p_{3/2}$ (30455,82 eV), die eine Breite von 1,19 eV besitzen.

te Intensität von 0,383 besitzen, wurden in Abb. 4.6 aufgetragen.

Im Falle einer Beschränkung auf eine approximative Beschreibung sind die Spektrallinien im Bereich der Shake Off/Up-Energien nicht analysierbar. Daher werden in der Simulation und zukünftigen Messungen die Spektrallinien in solchen Bereichen nicht analysiert. Die Durchführung der Analyse erfolgt nur in der Umgebung der Konversionslinie, z.B. in einem 5 eV breiten Intervall um die K -Konversionslinie. In diesem Fall werden die integrierten Shakelinien als Untergrund behandelt und ihre Profile nicht berücksichtigt.

Voigtprofil und Faltung

Unter Berücksichtigung des Dopplereffekts wird das differentielle Spektrum statt mit Lorentzkurven mit Voigtkurven beschrieben. Wie in Kap. 3.1.2 erwähnt wurde, handelt es sich hierbei um eine Faltung einer Lorentzfunktion mit einer Gaußfunktion

$$\begin{aligned} V(E, \sigma, \Gamma) &= \int_{-\infty}^{+\infty} G(E', \sigma) L(E - E', E_e, \Gamma) dE' \\ &= A \cdot \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} \exp\left(-\frac{E'^2}{2\sigma^2}\right) \frac{\Gamma}{2\pi} \frac{1}{(E - E_e)^2 + \Gamma^2/4} dE'. \end{aligned} \quad (4.32)$$

Für das Faltungsintegral existiert keine analytische Lösung: es kann jedoch numerisch integriert werden. Dafür aber ist erheblicher Rechenaufwand notwendig. Andererseits kann dieses Integral als Realteil der imaginären Fehlerfunktion $\omega(z)$ näherungsweise ausgedrückt werden:

$$V(E, \sigma, \Gamma) = \frac{\operatorname{Re}[\omega(z)]}{\sqrt{2\pi}\sigma} \quad (4.33)$$

$$\omega(z) = e^{-z^2} \operatorname{erfc}(-iz). \quad (4.34)$$

Hier ist z definiert als

$$z = \frac{E + i\Gamma}{\sqrt{2}\sigma}. \quad (4.35)$$

Die konjugierte Fehlerfunktion $\operatorname{erfc}(x)$ ist gegeben durch

$$\operatorname{erfc}(x) = 1 - \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^x e^{-x'^2} dx'. \quad (4.36)$$

Das Integral lässt sich als eine Potenzreihe ausdrücken:

$$\int_0^x e^{-x'^2} dx' = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k x^{2k+1}}{k!(2k+1)}. \quad (4.37)$$

Schließlich kann $V(E, \sigma, \Gamma)$ mit hinreichend vielen Gliedern beliebig gut angenähert werden

$$V(E, \sigma, \Gamma) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} \operatorname{Re} \left[e^{-z^2} \left(1 - \frac{2}{\sqrt{\pi}} \sum_{k=0}^N \frac{(-1)^k (-iz)^{2k+1}}{k!(2k+1)} \right) \right]. \quad (4.38)$$

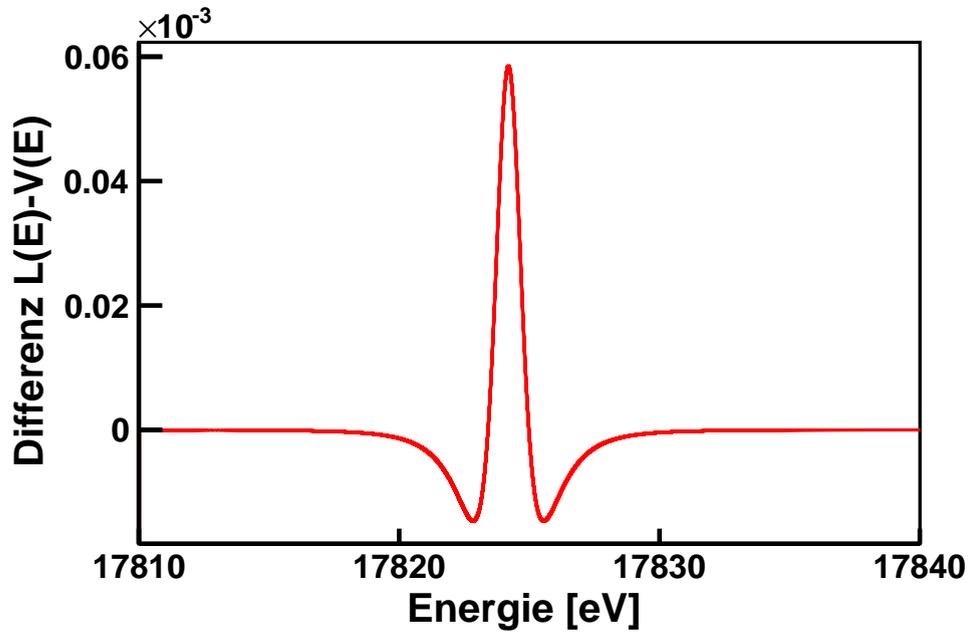


Abbildung 4.7: **Differenz zwischen Lorentzprofil und Voigtprofil.** Unter Berücksichtigung der Dopplerverbreiterung wurde das differentielle Konversionsspektrum durch Gl. 4.38 und Gl. 4.40 berechnet. Aufgetragen ist hier der Unterschied der beiden Profile. Das Maximum der Abweichung in der Linienlage bedeutet, dass die Amplitude des Peaks aufgrund der Dopplerverbreiterung abnimmt. Die beiderseitigen Minima weisen auf eine Verbreiterung der Linie hin.

Die Potenzreihe in Gl. 4.37 konvergiert nur für z mit kleinem Betrag. Bei $|z| \gg 1$ muss $\operatorname{erfc}(x)$ durch einen Kettenbruch ausgedrückt werden.

$$\operatorname{erfc}(x) = \frac{e^{-x^2}}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{1}{x+} \frac{1/2}{x+} \frac{1}{x+} \frac{3/2}{x+} \frac{2}{x+} \dots \right) \quad (4.39)$$

$$\rightarrow V(E, \sigma, \Gamma) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} \operatorname{Re} \left[\frac{1}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{1}{-iz+} \frac{1/2}{-iz+} \frac{1}{-iz+} \frac{3/2}{-iz+} \dots \right) \right]. \quad (4.40)$$

In der Berechnung dieser Arbeit wurde für die Anzahl der Glieder $N = 300$ ausgewählt. Im Vergleich mit einer numerischen Integration wurde gezeigt, dass mit diesem Verfahren ein optimaler Kompromiss zwischen Genauigkeit und Rechenaufwand erreicht wird.

Integriertes Spektrum

Mit den bereits diskutierten Konzepten und den im Anhang aufgelisteten Eingabeparametern lässt sich das integrierte Spektrum von ^{83m}Kr -Konversionselektronen berechnen. In Abb. 4.8-4.10 werden die erwarteten Spektren von $K32$ -, $L_{II}32$ - und $L_{III}32$ -Linien, ohne Quellpotential gezeigt. In den Berechnungen für Krypton im Rahmen von SSC

werden folgende Voraussetzungen beachtet:

1. Die Berechnungen werden für konstante Temperatur $T = 120\text{ K}$ und konstantes Magnetfeld $B_S = 3,6\text{ T}$ in der WGTS durchgeführt. Damit ist der maximale Öffnungswinkel $\theta_{\max} = 50,7^\circ$ in allen Unterteilungselementen der WGTS identisch.

2. Radiale und azimutale Inhomogenitäten in der WGTS werden in diesen Berechnungen nicht berücksichtigt. Für die longitudinalen Unterteilung wird die 10 m lange WGTS in 1000 Elemente (Scheiben) mit einer Breite von 1 cm aufgeteilt. Alle Quellparameter wie Kryptondichte und Streuwahrscheinlichkeiten werden innerhalb eines Elements als konstant behandelt.

3. Die Zerfallsrate \dot{N} an Konversionselektronen einer Scheibe wird normiert durch (siehe Gleichungen 3.24 und 3.26)

$$\dot{N} = N_{tot} \cdot \frac{1}{\tau} \cdot \frac{\alpha}{\alpha + 1} = 1,052 \cdot 10^{-4} N_{tot}, \quad (4.41)$$

mit der Lebensdauer $\tau = 9504,5\text{ s}$ ($T_{1/2} = 1,83\text{ h} = 6588\text{ s}$) und gesamtem Konversionskoeffizienten $\alpha = 2029,7$ [20]. Die Anzahl der ^{83m}Kr -Atome N_{tot} der Scheibe ist gegeben durch

$$N_{tot} = \rho d \cdot A \cdot \epsilon \cdot C, \quad (4.42)$$

mit der Tritium-Säulendichte ρd dieser Scheibe, Tritiumreinheit ϵ , Konzentration C von Krypton und Fläche A des WGTS-Querschnitts. Für die Konzentration C wurde der Wert $C = 2,44 \cdot 10^{-9}$ angenommen [40].

4. Unter Berücksichtigung der erwarteten Detektoreffizienz muss die Zerfallsrate noch mit einem Wert $\eta = 0,9$ multipliziert werden.

4.4 Berechnung des integrierten Spektrums für verschiedene Quellpotentiale

Unter Berücksichtigung des Quellpotentials wird das integrierte Spektrum durch Gl. 4.49 berechnet. In diesem Kapitel werden einige einfache Funktionen als Approximation an ein reelles Potentialprofil in der WGTS vorgestellt und diskutiert, sowie die entsprechenden Spektren werden dargestellt. Für die Berechnungen eines einzelnen Spektrums wurde die WGTS nach der Berechnung der Streuwahrscheinlichkeiten mit 1000 Scheiben zu 10 Scheiben zusammengefasst und jedem Volumenelement wurde ein Potentialswert zugewiesen. Dieser Vorgang hat keinen Einfluss auf die Genauigkeit der Streuwahrscheinlichkeiten und sonstigen Parameter, reduziert aber die Rechenzeit und ermöglicht ausreichend viele Simulationen. Für detailliertere Simulationen kann später mit einer beliebig feineren Aufteilung gerechnet werden.

In Kap. 4.5.1 wird diskutiert, dass die Potentialfunktion sich für bestimmte Fälle durch ein Polynom annähern lässt. Hier werden drei Beispiele gegeben:

Beispiel 1:

$$q_1(x) = 0,045x, \quad 0 \leq x \leq 10,0 \quad (4.43)$$

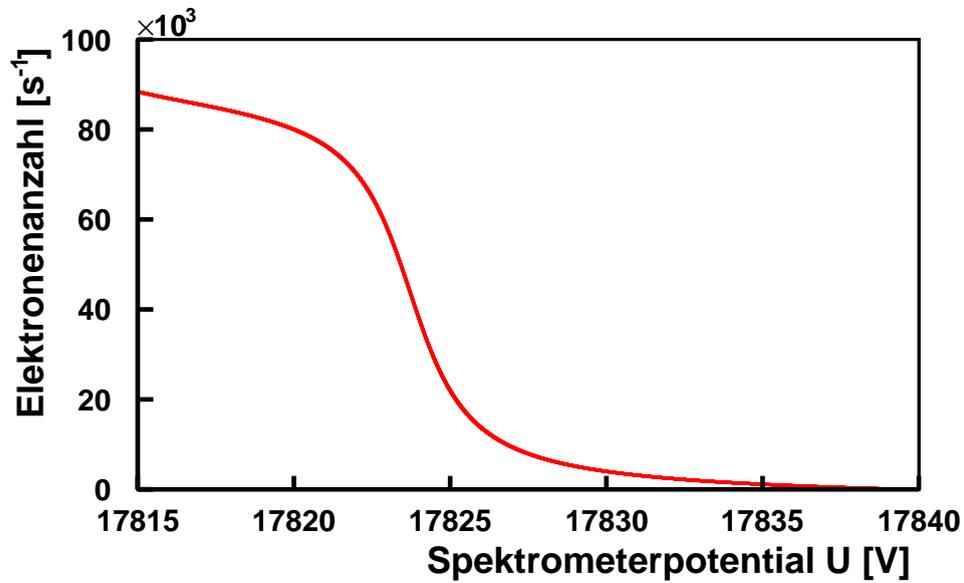


Abbildung 4.8: **Integriertes Spektrum der K_{32} -Konversion.** In der hier dargestellten Berechnung wurde der Elektronenuntergrund, der nicht von der K_{32} -Konversion verursacht wird, ausgeschaltet. Dabei wurde vorausgesetzt, dass kein Quellpotential in der WGTS existiert. Die dargestellte Spektrometerspannung im Intervall von 17815 bis 17840 V ist so gewählt, dass keine Shake Off/Up Phänomene beobachtet werden.

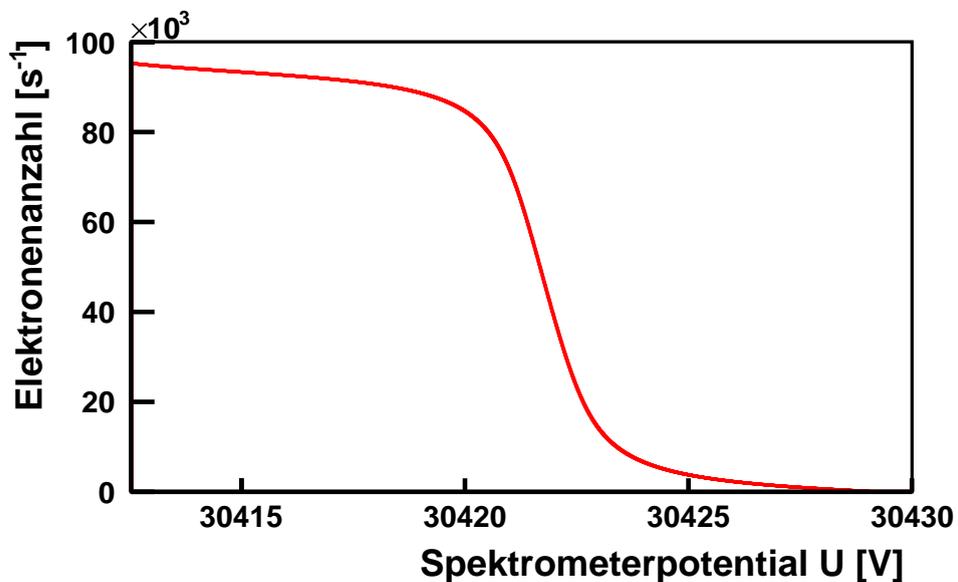


Abbildung 4.9: **Integriertes Spektrum der L_{II} -Konversion.** Da die L_{II} -Konversionslinie über beidseitige Satelliten verfügt, steht für Analyse nur ein schmales Energieintervall von 30415-30425 eV zur Verfügung.

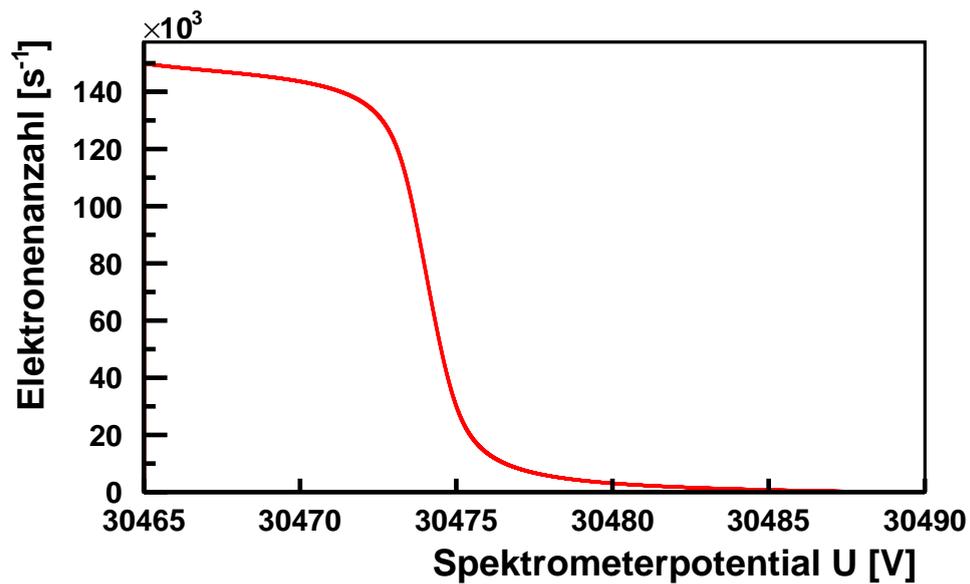


Abbildung 4.10: **Integriertes Spektrum der L_{III} -Konversion.** Das in der L_{III} -Region (30465-30490 eV) mit SSC berechnete Spektrum zeigt ab 30472 eV eine deutliche Stufe. Dies stimmt gut mit dem in Abb. 3.6 dargestellten Spektrum überein. Wie in Abb. 4.8 und Abb. 4.9 wurde der Einfluss eines möglichen Quellpotentials hier nicht berücksichtigt.

Es wird in diesem Szenario angenommen, dass das Quellpotential eine lineare Verteilung in der WGTS (Abb. 4.11 a)) aufweist. Das entsprechende integrierte Spektrum wird in Abb. 4.11 b) gezeigt.

Beispiel 2:

$$q_2(x) = 0,003x + 0,0004x^2, 0 \leq x \leq 10,0 \quad (4.44)$$

In diesem Fall wird das Störpotential als eine Polynomfunktion zweiten Grades angenommen. Ihre zwei Koeffizienten a_1 und a_2 werden angepasst (Kap. 4.5). Die von $q_2(x)$ verursachte Variation des Spektrums kann in Abb. 4.12 optisch nachvollzogen werden.

Beispiel 3:

$$q_3(x) = 0,011(x - 5,0)^2, 0 \leq x \leq 10,0 \quad (4.45)$$

Wenn das Quellpotential symmetrisch um den Mittelpunkt der WGTS wäre, ist diese Funktion ein Kandidat (siehe Abb. 4.13).

Bei diesen Beispielen betragen die maximalen Schwankungen $\Delta q_1 = 405$ mV, $\Delta q_2 = 59,4$ mV und $\Delta q_3 = 275$ mV. Diese im Vergleich zur Linienbreite geringfügigen Verschiebungen und Verbreiterungen der Linien lassen sich im Rahmen des im nächsten Kapitel vorgestellten Analyse als kleine Störung parametrisieren.

4.5 Analyse mit Quellpotential $q(x)$

Wie in Kap. 3.4.2 gezeigt wurde, kann ein mögliches elektrisches Potential in der WGTS die Messung der Neutrinomasse beeinflussen. Im Troitsk-Experiment hat man daher mit ^{83m}Kr den Einfluss eines möglichen inhomogenen Quellpotentials auf das Konversionsspektrum untersucht, damit die Störung des integrierten Tritium-Betaspektrums in einem aus den Kr-Messungen abgeleiteten Potential abgeschätzt werden kann. Für eine Übernahme der Ergebnisse aus dem Troitsk-Experiment müssen einige Aspekte berücksichtigt werden:

- Durch die Analyse mit der Verschmierung des ^{83m}Kr -Spektrums lässt sich tatsächlich nur ein mit den Kryptondichten gewichteter Mittelwert des elektrischen Potentials \bar{q} in der Quelle ermitteln. Die Potentialverteilung entlang des Strahlrohrs kann nicht angegeben werden. Wegen des oben diskutierten Entmischungsphänomens verteilen sich die Kr-Atome und T_2 -Moleküle nicht identisch (Kap. 4.1.1), weshalb eine direkte Anwendung von \bar{q} auf die Berechnung für das Tritium Spektrum sorgfältig überlegt sein muss.
- Die Geometrie und die Arbeitsbedingungen der WGTS bei KATRIN und beim Troitsker Experiment sind unterschiedlich, wodurch sowohl das T_2 Dichteprofil als auch Potentialprofil in beiden Experimenten unterschiedlich sein wird.
- Die leicht unterschiedliche Temperaturen in der Quelle (110 K in Troitsk und 120 K bei KATRIN) können verschiedene thermische Dopplerverbreiterungen verursachen.

Aus diesen Gründen sind im KATRIN Experiment dezidierte Messungen erforderlich, um das mittlere Potential und falls möglich auch die Potentialverteilung in der Quelle festzulegen.

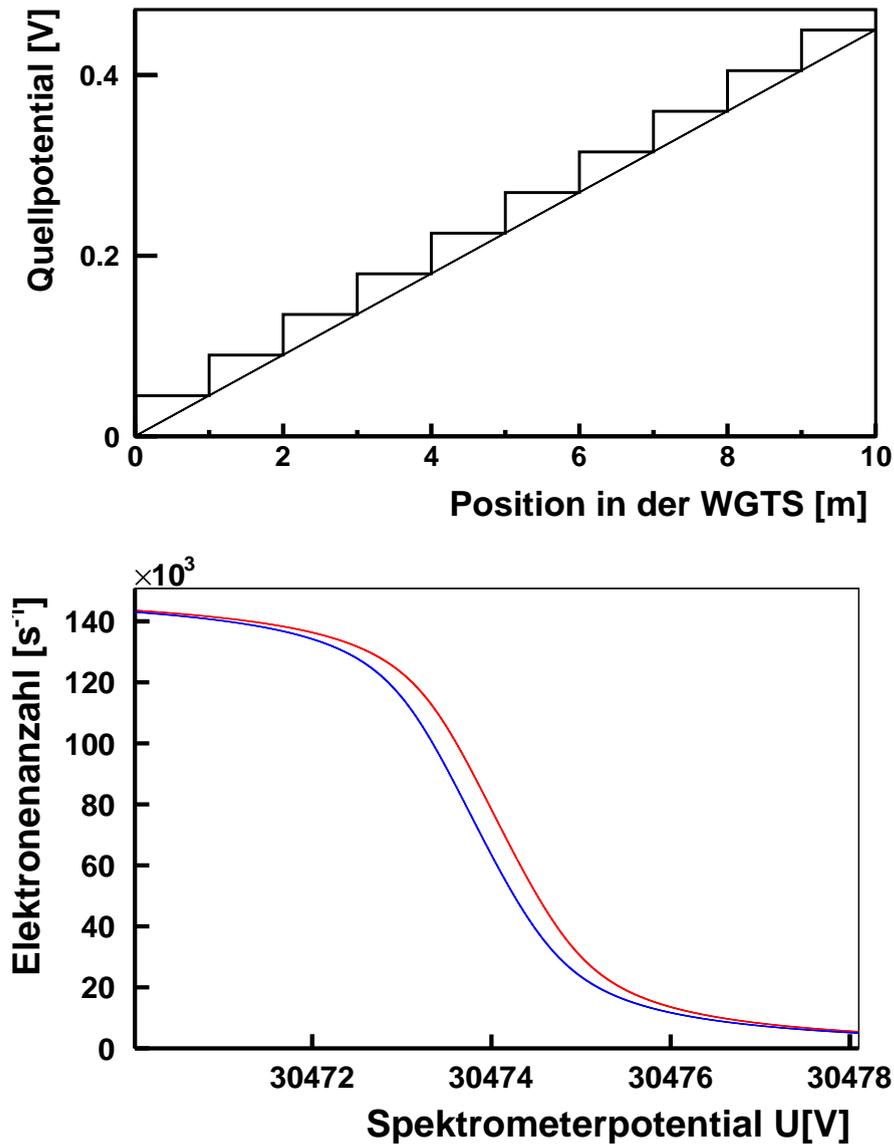


Abbildung 4.11: a) Potentialfunktion in der WGTS mit dem Modellansatz $q_1(x) = 0,045x$ (V). Für die Berechnungen wurde das lineare Quellpotential durch eine stufenförmige Funktion approximiert, da in jedem Unterteilungselement das Quellpotential als konstant vorausgesetzt ist. b) Integriertes Spektrum für $q_1(x)$. Aufgetragen ist in blau das integrierte Spektrum für $q_1(x)$. Im Vergleich zum Spektrum in rot, das einem verschwindenden Quellpotential entspricht, wird eine deutlich sichtbare Linienverschiebung beobachtet.

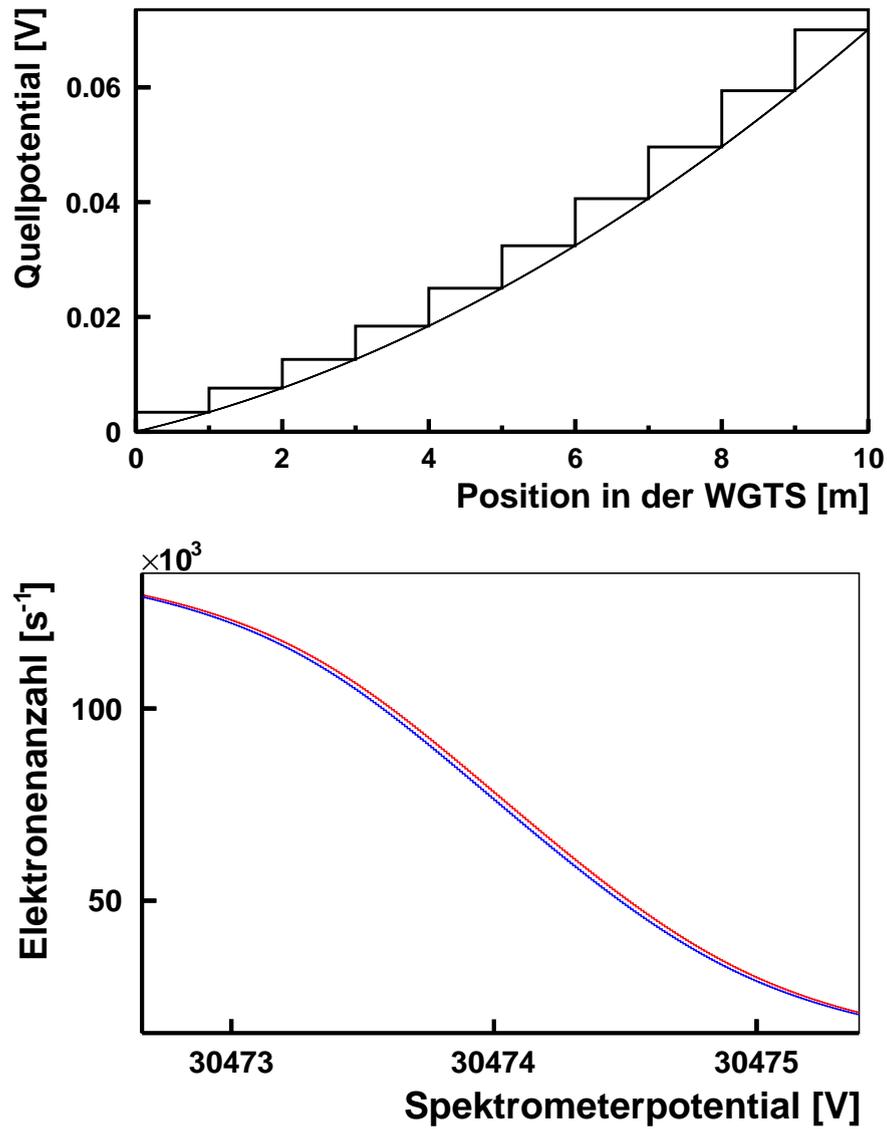


Abbildung 4.12: a) **Potentialfunktion in der WGTS.** Hier ist das Potential ein Polynom 2. Grades mit den exemplarischen Werten $q_2(x) = 0,003x + 0,0004x^2$ (V) gezeigt. b) **Integriertes Spektrum für $q_2(x)$.** Die blaue Kurve zeigt das für $q_2(x)$ erwartete integrierte Spektrum, während die rote wieder das L_{III} -Spektrum ohne Berücksichtigung des Potentials ist.

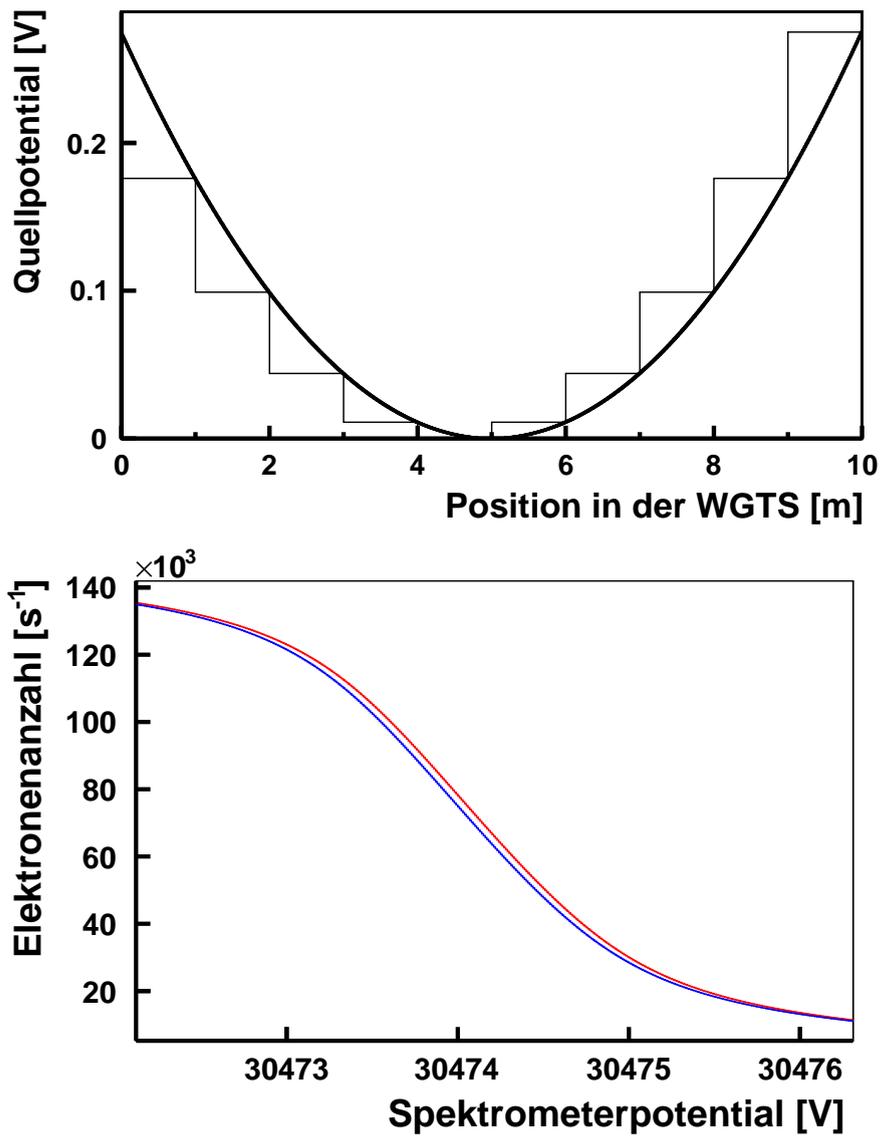


Abbildung 4.13: a) **Potentialfunktion in der WGTS.** Angenommene Potentialfunktion: $q_3(x) = 0,011(x - 5,0)^2$ in V. b) **Integriertes Spektrum für $q_3(x)$.** Die blaue Kurve: L_{III} -Spektrum für $q_3(x)$. Die rote Kurve: Spektrum für verschwindendes Quellpotential.

4.5.1 Grundlage zur Bestimmung des Potentials

Entlang des WGTS-Strahlrohrs existiert ein unbekanntes Potential $q(x)$ als eine Funktion der Koordinate $x \in [0, 0 \text{ m}, 10, 0 \text{ m}]$. In einem Unterteilungselement der WGTS, z.B. einer Scheibe s , werden im Rahmen des hier eingesetzten SSC-Codes alle Parameter als näherungsweise konstant behandelt, inklusive des Potentials, das mit q_s bezeichnet wird. Ohne elektrisches Potential wird das gemessene integrierte Spektrum durch Gl. 4.17 beschrieben zu

$$N_0(qU) = \sum_s C \int_0^\infty f(E) \cdot R_s(E, qU) dE, \quad (4.46)$$

$$\text{mit: } C = \frac{1 - \cos \theta_{\max}}{2} \cdot \rho_s(\text{Kr}) Ad, \quad (4.47)$$

$$f(E) = \frac{dN_V}{dE}. \quad (4.48)$$

Für die hier vorgestellten Analyse kann das Potential es als eine unbekannte ortsabhängige Komponente des Spektrometerpotentials behandelt werden. In der Scheibe s beträgt das Spektrometerpotential $qU + q_s$ statt qU . Die physikalische Bedeutung dafür ergibt sich durch die Tatsache, dass ein Elektron in der Scheibe s ein Potential $qU + q_s$ überwinden muss, um den Detektor zu erreichen. Das integrierte Spektrum mit einem Quellpotential lässt sich damit ausdrücken durch

$$N(qU) = \sum_s C \int_0^\infty f(E) \cdot R_s(E, qU + q_s) dE. \quad (4.49)$$

Man kann q_s als eine kleine Störung von qU behandeln, da in KATRIN die Beziehung $q_s/qU \ll 1$ immer erfüllt wird [9]. So kann Gl. 4.49 durch eine nach wenigen Gliedern abgebrochene Taylorreihe in der Umgebung von qU angenähert werden

$$\begin{aligned} N(qU) &= \sum_s C \int_0^\infty f(E) \cdot [R_s(E, qU) + R'_s(E, qU)q_s \\ &\quad + \frac{R''_s(E, qU)}{2!}q_s^2 + \frac{R'''_s(E, qU)}{3!}q_s^3 + \dots] dE \\ &= N_0(qU) + \sum_s q_s C \int_0^\infty f(E) \cdot R'_s(E, qU) dE \\ &\quad + \sum_s \frac{q_s^2}{2!} C \int_0^\infty f(E) \cdot R''_s(E, qU) dE \\ &\quad + \sum_s \frac{q_s^3}{3!} C \int_0^\infty f(E) \cdot R'''_s(E, qU) dE + O(q_s^4), \end{aligned} \quad (4.50)$$

$$\text{mit } R_s^{(n)} = \frac{d^n R_s(E, qU)}{d(qU)^n}. \quad (4.51)$$

Nach der Formel 4.18 kann man die Ableitungen der Antwortfunktion in einer Scheibe $R_s(E, qU)$ nach dem Spektrometerpotential qU durch die Ableitungen der Transmissionsfunktionen ausdrücken

$$R_s^{(n)}(E, qU) = \int_0^{E/2} T^{(n)}(E - \epsilon, qU) \cdot g_s(\epsilon) d\epsilon, \quad (4.52)$$

$$\text{mit } g_s(\epsilon) = P_0\delta(\epsilon) + P_1f(\epsilon) + P_2(f \otimes f)(\epsilon) + \dots \quad (4.53)$$

Im ersten Schritt wurde in der folgenden Analyse nur bis zu 3. Ordnung gerechnet, weitere Terme der höheren Ordnungen werden in dieser Arbeit vernachlässigt, da $q_s \ll qU$. Die 1-, 2- und 3-fachen Ableitungen der Transmissionsfunktion lauten damit

$$T'(E, qU) = \begin{cases} 0 & E - qU \leq 0 \\ \frac{-B_S}{2EB_A \sqrt{1 - \frac{E - qU}{E} \frac{B_S}{B_A} \cdot \kappa}} & 0 < E - qU \leq \Delta E \\ 0 & E - qU > \Delta E \end{cases} \quad (4.54)$$

$$T''(E, qU) = \begin{cases} 0 & E - qU \leq 0 \\ \frac{B_S^2}{4E^2 B_A^2 \left(1 - \frac{E - qU}{E} \frac{B_S}{B_A}\right)^{3/2} \cdot \kappa} & 0 < E - qU \leq \Delta E \\ 0 & E - qU > \Delta E \end{cases} \quad (4.55)$$

$$T'''(E, qU) = \begin{cases} 0 & E - qU \leq 0 \\ \frac{-3B_S^2}{8E^3 B_A^3 \left(1 - \frac{E - qU}{E} \frac{B_S}{B_A}\right)^{5/2} \cdot \kappa} & 0 < E - qU \leq \Delta E \\ 0 & E - qU > \Delta E \end{cases} \quad (4.56)$$

$$\text{mit } \kappa = 1 - \sqrt{1 - \frac{\Delta E}{E} \frac{B_S}{B_A}}. \quad (4.57)$$

Mit der Polynomentwicklung des integrierten Spektrums kann die vom unbekanntem Quellpotential verschmierte Elektronenrate durch eine Summe der Rate ohne Potential $N_0(qU)$ und einer Polynomfunktion für die Variable q_s dargestellt werden. Als Vergleich wird das integrierte Konversionsspektrum ohne und mit dem Einfluss des Potentials

berechnet. Mit den verschiedenen Werten qU_1, qU_2, \dots, qU_n erhält man das nachfolgende Gleichungssystem

$$\begin{aligned}
N(qU_1) - N_0(qU_1) &= \sum_s C_s \left(\int_0^\infty f(E) \cdot R'_s(E, qU_1) dE \right) q_s \\
&\quad + \sum_s C_s \left(\int_0^\infty f(E) \cdot R''_s(E, qU_1) dE \right) \frac{q_s^2}{2!} \\
&\quad + \sum_s C_s \left(\int_0^\infty f(E) \cdot R'''_s(E, qU_1) dE \right) \frac{q_s^3}{3!} \\
\\
N(qU_2) - N_0(qU_2) &= \sum_s C_s \left(\int_0^\infty f(E) \cdot R'_s(E, qU_2) dE \right) q_s \\
&\quad + \sum_s C_s \left(\int_0^\infty f(E) \cdot R''_s(E, qU_2) dE \right) \frac{q_s^2}{2!} \\
&\quad + \sum_s C_s \left(\int_0^\infty f(E) \cdot R'''_s(E, qU_2) dE \right) \frac{q_s^3}{3!} \\
&\quad \vdots \\
&\quad \vdots \\
\\
N(qU_n) - N_0(qU_n) &= \sum_s C_s \left(\int_0^\infty f(E) \cdot R'_s(E, qU_n) dE \right) q_s \\
&\quad + \sum_s C_s \left(\int_0^\infty f(E) \cdot R''_s(E, qU_n) dE \right) \frac{q_s^2}{2!} \\
&\quad + \sum_s C_s \left(\int_0^\infty f(E) \cdot R'''_s(E, qU_n) dE \right) \frac{q_s^3}{3!} \quad (4.58)
\end{aligned}$$

Die $3n$ in den Klammern dargestellten Koeffizienten lassen sich unabhängig von q_s mit für diese Arbeit entwickelten Programm berechnen und in einer Datenbank speichern, so dass in der weiteren Analyse der dafür benötigte große Rechenaufwand vermieden wird. Bei dieser Methode wird der Querschnitt der WGTS näherungsweise als Äquipotentialfläche behandelt, d.h. man berücksichtigt nur die Potentialverteilung in longitudinaler Richtung und q_s beschreibt den mittleren Einfluss des Quellpotentials in Scheibe s . Theoretisch können unendlich viele Spektrometerspannungen ausgewählt werden, um genügend miteinander linear unabhängige Gleichungen ($n \geq s$) zu erhalten, die zur Bestimmung der s Variablen erforderlich sind.

In der Praxis ist die Anzahl der Parameter durch die Anzahl der Messungen beschränkt. Würde man die WGTS in 1000 Scheiben unterteilen, wären auch Messungen bei 1000 Spannungen qU_i notwendig. Eine große Anzahl an Messungen bedeutet jedoch einen großen experimentellen und zeitlichen Aufwand. Außerdem kann die Schrittweite zwischen einzelnen Spannungen qU_i aufgrund der Schwankungen des Spektrometerpotentials nicht beliebig klein gewählt werden.

Da es bislang noch keine verlässlichen Simulation oder Berechnungen für ein bei KATRIN

zu erwartendes Quellpotential gibt, ist es zunächst einfacher, mögliche Potentiale und deren Effekt auf das integrierte Kryptonspektrum zu untersuchen. Naheliegender sind Polynome, da später auch komplizierte analytische Ausdrücke durch eine nach wenigen Gliedern abgebrochene Potenzreihenentwicklung an einem Punkt angenähert werden können. Ausgehend davon wird ein unbekanntes Potential ausgedrückt durch

$$q(x) = a_0 + a_1x + a_2x^2 + a_3x^3 + \dots + a_nx^n, \quad (4.59)$$

unter der Voraussetzung, dass die für die Funktion $q(x)$ mit der Position x in der WGTS entwickelten Polynome im Bereich der WGTS konvergieren. In diesem Fall ist die Bestimmung der Gliederanzahl noch eine offene Frage. Ohne ein auf der Physik eines kalten, magnetisierten Plasmas basierendes Modell für das Potentialprofil können nur verschiedene generische Potentialverläufe untersucht werden, um eine optimal angepasste Form auszufinden. In Prinzip können die meisten Potentialverläufe mit weniger als 10 Gliedern mit genügender Genauigkeit angenähert werden.

Als Beispiele wurden drei einfache Polynome als Potentialfunktion in den Berechnungen verwendet. Ihre entsprechende Analyseergebnisse werden im Folgenden diskutiert.

4.5.2 Analyseergebnisse

Mit dem in Kap. 4.4 diskutierten Potential-Beispiel wurde das für diese Arbeit entwickelte Fit-Verfahren getestet. Für die Anpassungen wurde das Paket TMinuit in entsprechender Weise optimal eingestellt. TMinuit bestimmt die Parameter durch die Minimierung der Prüfgröße Chi-Quadrat, die die Abweichung zwischen der angepassten Funktion und den Messwerten beschreibt [41]. Sie ist definiert durch

$$\chi^2 = \sum_{i=1}^m \frac{(n_i - n_{0i})^2}{n_{0i}}, \quad (4.60)$$

mit der Anzahl m der Messwerte. Die Größen n_i und n_{0i} beschreiben die einzelnen angepassten Funktionswerte und die experimentellen Messwerte. Zur Anpassung der Parameter werden die Chi-Quadrat-Werte χ^2 und Parameterfehler angegeben, damit die Anpassungsergebnisse beurteilt werden können. In den Anpassungen der nachfolgenden Beispiele wurden die Simulationsergebnisse, die mit dementsprechendem Quellpotential und 30 verschiedenen Retardierungsspannungen ($qU = 30472,0 - 30475,0$ eV mit einer Schrittwerte von 0,1 eV) berechnet wurden als Messwerte verwendet.

Anpassung für $q_1(x) = 0,045x$

Die angepasste Potentialfunktion a_0x besitzt nur einzigen freien Parameter a_0 . Die Simulation wurde mit der Messzeit 1 Sekunde durchgeführt. Die Ergebnisse sind

$$\chi^2 = 23,16,$$

$$q_1(x) = 0,0451x,$$

$$a_0 = 0,0451 \pm (0,0011).$$

Dieses Potentialprofil hat einen maximalen Wert von 450 mV in der 10. Scheibe (siehe Abb. 4.11). Die genau angepassten Parameter und der geringe Fehler haben gezeigt, dass die Methode zur Bestimmung des Potentials im Energiebereich von einiger 100 mV erfolgt. Der Wert von Chi-Quadrat ist kleiner als den entsprechenden kritischen Wert $\chi^2 < 42,56$, der sich durch die Anzahl der Messwerte ($m = 30$) und Parameter ($n = 1$) ergibt [41]. Damit ist diese Anpassung akzeptabel.

Anpassung für $q_2(x) = 0,003x + 0,0004x^2$

Die angepasste Potentialfunktion ist $a_0x + a_1x^2$ mit den beiden Parametern a_0 und a_1 . Für ein kleines Potential wie in diesem Beispiel wurde die Messzeit auf 1000 Sekunden erhöht um die kleinen Auswirkungen auf die integrierte Linie deutlich unterscheiden zu können. Dann erhält man

$$\chi^2 = 7,22,$$

$$q_2(x) = 0,00317x + 0,000429x^2,$$

$$a_0 = 0,00317 \pm (0,00055),$$

$$a_1 = 0,000429 \pm (0,000083).$$

Eine weitere Verlängerung der Messzeit würde die Parameterfehler noch weiter reduzieren.

Anpassung für $q_3(x) = 0,011(x - 5,0)^2$

Die angepasste Potentialfunktion ist $a_0(x + a_1)^2$ mit den beiden Parametern a_0 und a_1 ergibt folgende Anpassungsergebnisse:

$$\chi^2 = 40,90,$$

$$q_3(x) = 0,0118(x - 5,219)^2,$$

$$a_0 = 0,0118 \pm (0,0041),$$

$$a_1 = -5,219 \pm (1,321).$$

(4.61)

Ähnlich wie Beispiel 2 werden hier gute Anpassungsergebnisse für eine Messzeit von 250 Sekunden erzielt. Auch hier gilt, dass der Einfluss des Potentials nur sehr gering ist und deshalb die Messzeit im Vergleich zu Beispiel 1 deutlich vergrößert werden muss. Aufgrund des zu geringen mittleren Potentials kann die Minimierung der Chi-Quadrat-Funktion nur lokal durchgeführt werden. Um diese Parameter anpassen zu können, wurde die Anpassung für den Parameter a_1 in einem Intervall von $[2,0; 8,0]$ lokal implementiert.

Die Anpassungsergebnisse zeigen, dass die Anpassungen für ein bei KATRIN erwartetes kleines Quellpotential mit zwei (oder mehr) Parametern gut funktionieren. Mit den durchgeführten Simulationen kann ermittelt werden, wie lange bei den verschiedenen Spannungen gemessen werden muss, um kleine Potentialeffekte überhaupt nachweisen zu können. Zur Bestimmung eines komplizierten Quellpotentials werden wahrscheinlich viele Parameter gleichzeitig angepasst. Dafür muss die Genauigkeit der Simulation weiter erhöht werden. Vor einer sinnvollen Anpassung müssen zuerst alle Elemente, die mehr oder weniger das integrierte Spektrum beeinflussen, exakt ermittelt werden. Diese Aufgabe wird an die Vorabmessungen gestellt, die mit der Kryptonquelle allein bei KATRIN Standardbedingung durchgeführt werden. Für die Anpassungen dieser Arbeit wurde das integrierte Spektrum durch eine nach vier Gliedern abgebrochene Taylorreihe (siehe Gleichung 4.51) ausgedrückt. Im nächsten Schritt können mehr Glieder höherer Ordnung berücksichtigt werden, damit das Spektrum noch besser angenähert werden kann. Außerdem ist eine feinere Unterteilung der WGTS für die Untersuchung des stark variablen Quellpotentials erforderlich, weshalb für zukünftige Untersuchung eine feinere Unterteilung in 1000 Scheiben vorgeschlagen wird.

5. Zusammenfassung und Ausblick

Im Rahmen dieser Arbeit wurde das bestehende Programm SCC, das zuvor nur für die Berechnungen im Hinblick auf eine detaillierte Beschreibung der KATRIN Tritiumquelle diente weiter entwickelt. Das Hauptziel hierbei war es, das erwartete Elektronenspektrum im sogenannten Kryptonmodus der WGTS detailliert berechnen zu können.

In einem ersten Schritt wurde die Beschreibung des differentiellen Konversionsspektrums einer ^{83m}Kr -Quelle realisiert. Hierbei handelt es sich um die Superposition verschiedener Lorentzlinien. Diese wurden in SSC mit theoretisch berechneten Parametern implementiert. Im nächsten Schritt wurde der Einfluss des Shake Off/Up-Effekts auf das Spektrum untersucht, wobei die Ergebnisse der theoretischen Analyse referiert werden. Schließlich wurde der Doppler-Effekt berücksichtigt, in dem die Konversionsspektren durch Voigtkurven beschrieben wurden. Insbesondere wurden spezielle numerische Berechnungen entwickelt, um die Faltung des differentiellen Spektrums effektiver durchzuführen.

Für die Berechnung des integrierten Konversionsspektrums wurde zunächst die Gasdynamik von atomarem Krypton untersucht, da die ortsabhängige Kryptondichte eine wichtige Rolle in den Berechnungen spielt, z.B. für die Streuwahrscheinlichkeit des Elektrons. In einem longitudinalen Unterteilungselement (Scheibe) des WGTS-Strahlrohrs wurde das Spektrum mit allen lokalen Quellparametern (Temperatur, Teilchendichte, Transmissionfunktion, inelastische Streuwahrscheinlichkeit usw.) berechnet. Auf der Basis dieser Methode erhält man durch eine Zusammensetzung aller Scheiben das gesamte integrierte Meßspektrum.

Einen wichtigen Bestandteil dieser Arbeit bildete die Untersuchung der optimalen Strategie, mit der ein räumlich inhomogenes elektrisches Quellpotential in der WGTS experimentell bestimmt werden kann. Da das Quellpotential durch das Vorhandensein möglicher Plasmaeffekte nur zu einer geringfügigen Abweichung führt, wurde das vom lokalen Potential abhängige Konversionsspektrum durch eine Entmischung in Taylorpolynome vom Grade 4 mit genügender Genauigkeit angenähert. Durch den Vergleich zwischen dem Meßspektrum und der parametrisierten Approximation für das Potential kann die Potentialverteilung entlang der WGTS angepasst werden.

Die in dieser Arbeit entwickelten Methoden und Programme wurden nur durch zahlreiche Simulationen getestet, da momentan noch keine Messdaten zur Verfügung stehen. Für die praktische Analyse mit Messwerten müssen später zunächst die physikalischen Eigenschaften der ^{83m}Kr -Konversionselektronen (Linienform, Linienlage, Linienbreite, Linienamplitude usw.) in der WGTS genau vermessen werden.

Die hier entwickelten Programme sind ein erster wichtiger Schritt zur detaillierten Beschreibung der WGTS im Kryptonmodus bei $T = 120$ K. Die durchgeführten Analysen haben bestätigt, dass dieser von der experimentellen Seite aus sehr aufwändige Betriebsmodus in hohem Maße geeignet ist, mögliche systematische Effekte durch das magnetisierte kalte Plasma in der WGTS mit hoher Präzision zu erkennen. Als weitere Schritte hin zu einer noch umfassenderen Beschreibung der WGTS verbleiben eine vollständig dreidimensionale Gasdynamik und Modellierung, eine Einbeziehung elektronischer Anregungszustände (final state distribution) sowie die Einbeziehung aller relevanten Strahlungskorrekturen.

Nach Komplettierung der hier begonnenen Modellierung der WGTS im Kryptonmodus steht dem KATRIN Experiment mit dem Code SSC ein umfassendes Analysepaket zur Messung der Neutrinomasse mit minimierten systematischen Fehlern zur Verfügung.

Literaturverzeichnis

- [1] N. Schmitz. *Neutrino-physik*. Teubner Studienbücher Physik, Stuttgart, 1997.
- [2] B. Povh et al. *Teilchen und Kerne*. Springer-Lehrbuch, 2006.
- [3] F. Mandl and G. Shaw. *Quantum field theory*. Wiley, 1984.
- [4] Y. Fukuda et al. *Evidence for oscillation of atmospheric neutrinos*. Phys. Rev. Lett. 81, 1562 (1978).
- [5] J. Hosaka et al. *Solar neutrino measurements in Super-Kamiokande-I*. Phys. Rev. D73, (2006) 112001.
- [6] D. H. Perkins. *Introduction to High Energy Physics, 3rd ed.* Addison-Wesley Publishing Company Inc., 1987.
- [7] K. Grotz and H. V. Klapdor. *Die schwache Wechselwirkung in Kern-, Teilchen- und Astrophysik*. Teubner Studienbücher Physik., Stuttgart, 1989.
- [8] K. Eitel et al. *Estimate of the KATRIN sensitivity on the neutrino mass*. KATRIN report, 65-SRP-4011-1, (2003).
- [9] KATRIN Kollaboration. *KATRIN Design Report 2004*. Wissenschaftliche Berichte FZKA 7090.
- [10] C. Weinheimer et al. *High precision measurement of the tritium beta spectrum near its endpoint and upper limit on the neutrino mass*. Phys. Lett. B460, 219 (1999).
- [11] V. M. Lobashev et al. *Direct search for mass of neutrino and anomaly in the tritium beta spectrum*. Phys. Lett. B460, 227 (1999).
- [12] R. G. H. Robertson et al. *Limit on $\bar{\nu}_e$ mass from observation of the β decay of molecular tritium*. Phys. Rev. Lett. Part. 67, 957 (1991).
- [13] R. G. H. Robertson and D. A. Knapp. *Direct measurements of neutrino mass*. Ann. Rev. Nucl. Part. Sci. 38, 185-215 (1988).
- [14] A. I. Belesev et al. *Results of the Troitsk experiment on the search for the electron anti-neutrino rest mass in tritium β decay*. Phys. Lett. B 350, 263 (1995).

- [15] M. Hötzel. *Berechnung von KATRIN Messspektren unter Einbeziehung der Eigenschaften der fensterlosen gasförmigen Tritiumquelle*. Diplomarbeit, Institut für Experimentelle Kernphysik, Universität Karlsruhe (TH), 2009.
- [16] T. Mayer-Kuckuk. *Kernphysik*. Teubner Studienbücher Physik, Stuttgart, 1992.
- [17] B. Ostrick. *Eine kondensierte ^{83m}Kr -Kalibrationsquelle für das KATRIN-Experiment*. Doktorarbeit, Westfälischen Wilhelms-Universität Münster, 2008.
- [18] S. C. Wu. *Nuclear data sheets for $A = 83^*$* . Nuclear data sheets 92, 893 (2001).
- [19] T. Mayer-Kuckuk. *Physik der Atomkerne*. Teubner Studienbücher Physik, Stuttgart, 1970.
- [20] F. Rösel et al. *Internal conversion coefficients for all atomic shells*. Atomic data and nuclear data tables 21, 91-289 (1978).
- [21] V. Weisskopf and E. Wigner. *Berechnung der natürlichen Linienbreite auf Grund der Diracschen Lichttheorie*. Proc. Roy. Soc. London (A), (1927).
- [22] W. R. Kuhn and J. London. *Infrared radiative cooling in the middle atmosphere (30-110 km)*. J. Atoms. Sci. 26, 189 (1969).
- [23] O. Dragoun et al. *Increased accuracy of the binding energy of K- and L-subshell electrons in krypton from re-analysis of experimental data: importance for determination of the neutrino mass*. Czechoslovak journal of physics, Vol. 51 (2001).
- [24] J. M. Blatt and V. F. Weisskopf. *Theoretical nuclear physics*. New York, 1952.
- [25] W. Bambynek et al. *X-ray fluorescence yields, Auger, and Coster-Kronig transition probabilities*. Review of modern physics, Vol. 44, No. 4, (1972).
- [26] J. L. Campbell and T. Papp. *Widths of the atomic K-N7 levels*. Atomic data and nuclear data tables 77, 1-56, (2001).
- [27] M. Przyrembel. *Inelastische Streuungen von β -Elektronen in kondensierten Tritiumquellen am Mainzer Neutrinomassensexperiment*. Doktorarbeit, Institut für Physik Johannes Gutenberg-Universität Mainz, 1995.
- [28] D. L. Wark et al. *Correspondence of electron spectra from photoionization and nuclear internal conversion*. Physical review letters, Vol. 67, No. 17, (1991).
- [29] T. A. Carlson et al. *Calculation of electron shake-off for elements from $Z = 2$ to 92 with the use of self-consistent-field wave function*. Physical review, Vol. 169, No. 1, (1968).
- [30] T. A. Carlson and Jr. C. W. Nestor. *Calculation of electron shake-off probabilities as the result of x-ray photoionization of the rare gases*. Physical review A, Vol. 8, No. 6, (1973).
- [31] J. S. Levinger. *Effects of radioactive disintegrations on inner electrons of the atom*. Physical review, Vol. 90, No. 1, (1953).

- [32] A. Picard. *Aufbau und Test eines Solenoid-Retardierungs-Spektrometers zur Bestimmung der Neutrino Ruhemasse aus dem Tritium-beta-Zerfall*. Doktorarbeit, Institut für Physik Johannes Gutenberg-Universität Mainz, 1990.
- [33] A. Picard et al. *Precision measurement of the conversion electron spectrum of ^{83m}Kr with a solenoid retarding spectrometer*. Z. Phys. A - Hadrons and Nuclei 342, 71-78 (1992).
- [34] A. I. Belesev et al. *Investigation of space-charge effects in gaseous tritium as a source of distortions of the beta spectrum observed in the troitsk neutrino-mass experiment*. Physics of atomic nuclei, Vol. 71, No. 3, 427-436 (2008).
- [35] J. Kaspar. *Influence of energy scale imperfections on neutrino mass sensitivity in the KATRIN experiment*. Diplomarbeit, Universität Prag, 2003.
- [36] F. Sharipov et al. *Influence of temperature variations and acoustic waves on the column density. Calculations of the velocity distribution function*. KATRIN Report, 2009.
- [37] D. Kalempa and F. Sharipov. *Separation phenomenon in the windowless gaseous tritium source of KATRIN experiment. Ternary mixture tritium-Hydrogen-krypton*. KATRIN Report, 2009.
- [38] L. Asplund et al. *Vibrational structure and lifetime broadening in core-ionised methane*. J. Phys. B: At. Mol. Phys. 18, 1569-1579(1985).
- [39] V. N. Aseev et al. *Energy loss of 18keV electrons in gaseous T_2 and quench condensed D_2 films*. Eur. Phys. J. D 10, (2000).
- [40] M. Rysavy. *^{83m}Kr for calibration and monitoring present status and outlook*. Presentation in 8th collaboration meeting, 2005.
- [41] F. James and M. Roos. *MINUIT-a system for function minimization and analysis of the parameter errors and correlations*. Computer physics communications, 10 (1975).

Danksagung

Ich möchte mich bei allen bedanken, die mich während meiner Diplomarbeit unterstützt und zum Gelingen dieser Arbeit beigetragen habe.

Mein Dank gilt an erster Stelle Herrn Prof. Dr. Guido Drexlin, der mir diese interessante Diplomarbeit ermöglicht hat.

Auch möchte ich mich bei Herrn Prof. Dr. Thomas Müller für die freundliche Übernahme des Koreferats bei dieser Arbeit bedanken.

Für die exzellente Betreuung während der Durchführung der Diplomarbeit möchte ich mich bei Herrn Dipl.-Phys. Markus Hötzel und Herrn Dr. Wolfgang Käfer von ganzen Herzen bedanken. Beide Betreuer sind mir während der gesamten Zeit mit sehr viel Verantwortung und sehr großem Interesse für meine Arbeit begegnet und haben mich immer wieder unterstützt. Die zahlreichen fachlichen Diskussionen haben mich vieles gelehrt und meine Arbeit mit neuen Ideen weiter gebracht. Auch für die umfassende Unterstützung beim Umgang mit C++ und anderer Software möchte ich mich bei Herrn Markus Hötzel und Herrn Wolfgang Käfer bedanken, die mir mit ihrer Hilfe vieles erleichtert haben.

Außerdem möchte ich Herrn Dr. Lutz Bornschein für die wertvollen Ratschläge und die Hilfe bei der Korrektur dieser Arbeit danken.

Des Weiteren möchte ich mich bei Herrn Markus Hötzel, Herrn Dr. Wolfgang Käfer, Herrn Prof. Dr. Guido Drexlin und Herrn Alexander Kromp für die Hilfe bei der Ausarbeitung dieser Arbeit bedanken.

Für die gute Atmosphäre und die stets sehr freundliche Hilfe im Alltag möchte ich mich an dieser Stelle ganz herzlich bei allen Kolleginnen und Kollegen des KATRIN-Experiments bedanken.

Ein spezieller Dank gilt meiner Familie, die mir das Studium in Deutschland ermöglicht und mich stets mit allen Kräften unterstützt haben.

Erklärung

Hiermit versichere ich, die vorliegende Arbeit selbständig angefertigt, alle dem Wortlaut oder Sinn nach entnommenen Inhalte anderer Werke an den entsprechenden Stellen unter Angabe der Quellen kenntlich gemacht und keine weiteren Hilfsmittel verwendet zu haben.

Jiayu Hua, Nov. 2010