

Optimierung der Methoden und Messprozeduren zur Entfaltung der Energieverlustfunktion beim KATRIN-Experiment

Christopher Kranz

Diplomarbeit

**Institut für Kernphysik
Mathematisch-Naturwissenschaftliche Fakultät
Westfälische Wilhelms-Universität Münster**

24. Juni 2011



Referent: Prof. Dr. C. Weinheimer
Korreferent: Prof. Dr. A. Khoukaz

Inhaltsverzeichnis

1 Einleitung	1
2 Einführung in die Neutrino-Physik	3
2.1 Die geschichtlichen Anfänge der Neutrino-Physik	3
2.2 Neutrinooszillation - Physik jenseits des Standardmodells	4
2.3 Die Bestimmung der Neutrinomasse	6
3 Das KATRIN-Experiment	9
3.1 Motivation für das KATRIN-Experiment	9
3.2 Das Tritium- β -Spektrum	10
3.3 Der Aufbau des KATRIN-Experiments	12
3.3.1 Die Tritiumquelle	12
3.3.2 Das Transportsystem	13
3.3.3 Das Vorspektrometer	14
3.3.4 Das Hauptspektrometer - ein MAC-E-Filter	14
3.3.5 Der Detektor	17
4 Streuprozesse in der Quelle	19
4.1 Die Energieverlustfunktion	19
4.2 Die Transmissionsfunktion	21
4.3 Antwortfunktion und Streufunktionen	21
4.4 Die Streuwahrscheinlichkeiten	24
4.5 Rotation und Vibration zweiatomiger Moleküle	24
4.5.1 Der starre und nicht-starre Rotator	26
4.5.2 Schwingung zweiatomiger Moleküle	27
4.5.3 Rotations-Schwingungs-Wechselwirkung	27
4.5.4 Rotations-Schwingungs-Übergänge und ihre Bedeutung für das Modell	29
5 Entfaltung der Energieverlustfunktion	31
5.1 Standardverfahren zur Entfaltung	31
5.1.1 Simulation der Messdaten	31
5.1.2 Matrixinversion	33
5.1.3 Entfaltung mittels Singulärwertzerlegung	34
5.1.4 Ermittlung der systematischen Unsicherheit	37
5.2 Ermittlung eines optimalen Schwellwerts	39
5.3 Überprüfung von Näherungen	40
5.3.1 Demonstrations-Simulation	43

6 Alternative Entfaltungsmethoden	47
6.1 Der BiCGstab(l)-Algorithmus	47
6.1.1 Theorie	47
6.1.2 Ergebnis	52
6.2 Abschnittsweise Singulärwertzerlegung	53
6.2.1 Motivation: Berücksichtigung von geringen Energieverlusten	53
6.2.2 Ergebnis	54
7 Messzeitoptimierung	57
7.1 Abschätzung der benötigten Messzeit	57
7.2 Verfahren zur Optimierung der Messzeitverteilung	57
7.2.1 Beschreibung des Verfahrens	58
7.2.2 „Bump“-Analyse	60
7.2.3 Ergebnis	61
8 Messung der Säulendichte	63
8.1 Beschreibung des Fits	64
8.2 Ergebnisse	65
8.3 Systematische Abweichungen des Fits	67
9 Zusammenfassung und Ausblick	69

1 Einleitung

Seit der Etablierung des sehr erfolgreichen Standardmodells der Teilchenphysik in den 60er Jahren des letzten Jahrhunderts wurden Neutrinos lange Zeit als masselose Teilchen betrachtet. In der jüngeren Vergangenheit haben Neutrinooszillationsexperimente jedoch gezeigt, dass Neutrinos eine Masse besitzen und somit weitere Experimente motiviert, die zum Ziel haben, diese zu messen. Eines dieser Experimente ist das KArlsruhe TRItium Neutrino (KATRIN) Experiment, das um eine Größenordnung sensitiver auf die Neutrinomasse sein wird als bisherige direkte Neutrinomassenexperimente.

KATRIN wird die Energie von Elektronen aus Tritium- β -Zerfällen mit hoher Genauigkeit zu ver messen. Da diese Elektronen am Quellmaterial selbst stoßen können, spielen Energieverluste bei diesen Stößen, die durch eine Energieverlustfunktion beschrieben werden, eine besondere Rolle. Eine ungenaue Kenntnis der Energieverlustfunktion trägt zur systematischen Unsicherheit der Neutrinomasse bei. Sie soll deshalb in vorausgehenden Messungen ermittelt werden. Das vorrangige Ziel dieser Arbeit ist es, Methoden für möglichst exakte Bestimmung der Energieverlustfunktion zu entwickeln und zu optimieren, um die von dieser Fehlerquelle hervorgerufene Unsicherheit der Neutrinomasse zu minimieren.

Als eine weitere Ursache für die systematische Unsicherheit der Neutrinomasse gilt die Teilchendichte in der gasförmigen Tritiumquelle, die in den Langzeitmessungen von KATRIN möglichst stabil gehalten werden muss. Aus diesem Grund wird eine Möglichkeit zur regelmäßigen Messung dieser Dichte in Simulationen getestet, die unbemerkt Veränderungen vorbeugen soll.

Die Arbeit ist folgendermaßen strukturiert:

- Kapitel 2 bietet eine kurze Einführung in die Neutrinophysik und befasst sich mit der geschichtlichen Entwicklung und einigen grundlegenden Phänomenen.
- Kapitel 3 stellt das KATRIN-Experiment vor und erläutert den technischen Aufbau sowie die zugrundeliegenden physikalischen Mechanismen.
- In Kapitel 4 wird speziell auf die Streuprozesse in der Tritiumquelle von KATRIN und ihre Bedeutung eingegangen. In der zweiten Hälfte des Kapitels wird dabei ein besonderer Schwerpunkt auf Rotations- und Vibrationsanregungen gelegt.
- Die tatsächliche Bestimmung der Energieverlustfunktion durch Entfaltung wird in Kapitel 5 erklärt. Hier finden sich auch erste Analysen zur möglichen Verbesserung des Verfahrens.
- In Kapitel 6 werden alternative Entfaltungsverfahren für die Energieverlustfunktion gezeigt. Den Großteil des Kapitels nimmt dabei der BiCGstab(l)-Algorithmus ein.

- In Kapitel 7 wird die Messzeit und die Messzeitverteilung für die Bestimmung der Energieverlustfunktion untersucht.
- Ein Verfahren zur Bestimmung der Säulendichte in der Tritiumquelle wird in Kapitel 8 vorgestellt.
- Die Ergebnisse der Arbeit werden schließlich in Kapitel 9 zusammengefasst.

2 Einführung in die NeutrinoPhysik

Seit ihrer Entdeckung stellen die Neutrinos Wissenschaftler immer wieder vor neue Herausforderungen. Ihre Eigenschaft, nur schwach mit Materie wechselzuwirken, macht einen enormen technischen Aufwand zur Detektion notwendig. Darüber hinaus sind viele Fragen über Neutrinos bis heute ungelöst: Ist das Neutrino sein eigenes Antiteilchen? Wie ist die absolute Neutrinomasse? Warum ist die Neutrinomasse im Vergleich zu den anderen Elementarteilchen so klein? Diese Fragen machen Neutrinos zum wichtigen Gegenstand aktueller Forschung.

Dieses Kapitel soll eine kurze Einführung in die Geschichte und die grundlegenden Phänomene der NeutrinoPhysik geben.

2.1 Die geschichtlichen Anfänge der NeutrinoPhysik

Das Neutrino wurde 1930 von Pauli postuliert und zum ersten Mal schriftlich in einem offenen Brief von ihm an seine Kollegen erwähnt [Pau30]. Das dort zunächst noch Neutron genannte Teilchen wurde nach der Entdeckung des eigentlichen Neutrons durch Chadwick im Jahre 1932 in Neutrino umbenannt. Nachdem man α - und γ -Zerfälle als Zweikörperzerfälle mit Spektren diskreter Energien kennengelernt hatte, hatte man für den β -Zerfall ebenfalls ein solches Spektrum erwartet. Das tatsächlich durch Chadwick im Jahr 1914 gemessene kontinuierliche β -Spektrum [Cha14] hatte dieser Erwartung widersprochen und für den Fall, dass lediglich Tochterkern und Elektron bzw. Positron am Zerfall beteiligt sind, die Energie- und Impulserhaltung verletzt. Pauli führte daher das Neutrino als drittes beteiligtes Teilchen ein, das beim β -Zerfall mit verschiedenen Geschwindigkeiten und Winkeln emittiert werden kann und damit die Energie- und Impulsbilanz wieder ausgleicht. Ein weiterer Grund für dieses Postulat war die Erhaltung des quantenmechanischen Drehimpulses. Da ein Atomkern beim β -Zerfall stets eine ganzzahlige Spinänderung vollzieht und das e^\pm aber den Spin $J = \frac{1}{2}$ davonträgt, folgerte Pauli, dass es ein weiteres beteiligtes Teilchen mit Spin $\frac{1}{2}$ geben musste.

Erst 1956, als durch Kernreaktoren starke Neutrinoquellen zur Verfügung standen, wurde das Neutrino schließlich durch Reines und Cowan experimentell nachgewiesen [Rei59]. Die Spaltprodukte in einem Reaktor zerfallen als β^- -Strahler und erzeugen daher Elektronantineutrinos. Diese wurden mit Hilfe des sogenannten inversen β -Zerfalls

$$p + \bar{\nu}_e \rightarrow n + e^+. \quad (2.1)$$

nachgewiesen. Der benutzte Detektor bestand dabei im Wesentlichen aus Cadmiumchlorid in wässriger Lösung. Das bei (2.1) entstehende Positron annihielt innerhalb kürzester Zeit zu zwei γ -Quanten mit je 511 keV, während das Neutron durch Stöße mit den Protonen der Wassermoleküle innerhalb einiger μs moderiert wird und schließlich durch einen Cadmiumkern aufgrund seines großen Wirkungsquerschnittes für Neutroneneinfang absorbiert wird. Der nun angeregte Cadmiumkern emittiert beim Zurückfallen in

den Grundzustand ebenfalls γ -Strahlung. Der Nachweis des Elektron-Antineutrinos gelang bei [Rei59] also über die Detektion zweier γ -Signale, die zeitlich um einige μs versetzt waren.

Wenige Jahre später konnte von einer Gruppe um Lederman, Schwartz und Steinberger gezeigt werden [Dan62], dass es eine weitere Sorte von Neutrinos gab, die Myon-Neutrinos. Dazu wurden 15 GeV Protonen auf ein Beryllium-Target geschossen und somit u.a. Pionen und Kaonen erzeugt. Diese konnten nun noch im Flug nach

$$\pi^+ \rightarrow \mu^+ + \nu_\mu \quad K^+ \rightarrow \mu^+ + \nu_\mu \quad (2.2)$$

$$\pi^- \rightarrow \mu^- + \bar{\nu}_\mu \quad K^- \rightarrow \mu^- + \bar{\nu}_\mu \quad (2.3)$$

zerfallen und somit einen Strahl von hochenergetischen myonischen (Anti-)Neutrinos erzeugen. Hadronen und Myonen wurden durch eine 13.5 m dicke Eisen-Abschirmung blockiert, so dass nur die Myon-Neutrinos in eine Funkenkammer gelangen konnten, die aufgrund verschiedener Leuchtspuren Elektronen und Myonen nachweisen und eindeutig voneinander unterscheiden konnte. Tatsächlich beobachtete man lediglich Myonen und schloss damit, dass Reaktionen der Form

$$\nu_\mu + n \rightarrow \mu^- + p \quad \bar{\nu}_\mu + p \rightarrow \mu^+ + n \quad (2.4)$$

in der Kammer stattfanden. Die folgenden Prozesse, die für ν_e zu beobachten wären, traten hingegen nicht auf:

$$\nu_\mu + n \rightarrow e^- + p \quad \bar{\nu}_\mu + p \rightarrow e^+ + n. \quad (2.5)$$

Damit war gezeigt, dass es sich bei ν_μ und ν_e tatsächlich um verschiedene Teilchen handelt und die zweite Sorte Neutrinos war entdeckt.

Nach der Entdeckung des Tauons im Jahre 1975 durch Perl [Per75], bestand wenig Zweifel daran, dass auch diesem Lepton ein entsprechendes Neutrino zuzuordnen war. Im Jahr 2000 wurde dieses Tauon-Neutrino im DONUT Experiment am Fermilab schließlich zum ersten Mal direkt nachgewiesen [Kod01]. Seit den 1960er Jahren bilden die oben genannten Teilchen (ν_e, e), (ν_μ, μ) und (ν_τ, τ), zuzüglich ihrer Antiteilchen, den leptonischen Sektor des Standardmodells, in dem die Neutrinos als masselose Teilchen behandelt werden.

2.2 Neutrinooszillation - Physik jenseits des Standardmodells

Ab den 1960er Jahren wurde unter Leitung von Raymond Davis Jr. das Homestake-Experiment unternommen, das zum Ziel hatte, den Neutrinofluss der Sonne zu messen. Neutrinos entstehen in der Sonne durch die Netto-Reaktionsgleichung [Zub04]:

$$2e^- + 4p \rightarrow {}_2^4\text{He} + 2\nu_e + 26.73 \text{ MeV}. \quad (2.6)$$

Die Überschussenergie von 26.73 MeV wird dabei sowohl als kinetische Energie der Neutrinos, wie auch als Wärmestrahlung frei. Davis stellte fest, dass der gemessene Neutrinofluss nur etwa ein Drittel von dem betrug, der durch das Standardmodell der Sonne

vorhergesagt wurde. Da das Standardmodell der Sonne anderweitig gut verifiziert war, suchte man zur Lösung des nun entstandenen solaren Neutrinoproblems nach einer Erklärung in den Eigenschaften des Neutrinos selbst. Davis erhielt nach der Bestätigung seiner Messung durch GALLEX und SAGE in den 1990er Jahren schließlich den Nobelpreis im Jahre 2002.

Das solare Neutrinoproblem wird heute durch Neutrinooszillationen erklärt. Hierbei sind die Flavour-Eigenzustände ν_α mit $\alpha = e, \mu, \tau$ nun nicht mehr mit den Masseneigenzuständen ν_i mit $i = 1, 2, 3$ identisch, sondern hängen über

$$|\nu_\alpha\rangle = \sum_i U_{\alpha i} |\nu_i\rangle \quad (2.7)$$

$$|\nu_i\rangle = \sum_\alpha U_{\alpha i}^* |\nu_\alpha\rangle \quad (2.8)$$

zusammen. U ist hierbei eine 3×3 unitäre Matrix, genannt Maki-Nakagawa-Sakata-Matrix (MNS), und kann als Analogon zur CKM-Matrix auf dem Quark-Sektor betrachtet werden. Sie enthält die Mischungswinkel Θ_{ij} nach

$$U = \begin{pmatrix} c_{12}c_{13} & c_{12}c_{13} & s_{13}e^{-i\delta} \\ -s_{12}c_{23} - c_{12}s_{23}s_{13}e^{i\delta} & c_{12}c_{23} - s_{12}s_{23}s_{13}e^{i\delta} & s_{23}c_{13} \\ s_{12}s_{23} - c_{12}c_{23}s_{13}e^{i\delta} & -c_{12}s_{23} - s_{12}c_{23}s_{13}e^{i\delta} & c_{23}c_{13} \end{pmatrix} \quad (2.9)$$

mit den Abkürzungen $s_{ij} = \sin \Theta_{ij}$ und $c_{ij} = \cos \Theta_{ij}$. Für den Fall, dass Neutrinooszillationen CP-verletzend sind, ist δ von Null verschieden.

Die Masseneigenzustände gehorchen nach der zeitabhängigen Schrödingergleichung der Zeitentwicklung (vgl. [Sch97])

$$|\nu_i(t)\rangle = e^{-iE_i t} |\nu_i\rangle, \quad (2.10)$$

mit

$$E_i = \sqrt{p_i^2 + m_i^2} \approx p + \frac{m_i^2}{2p} \approx E + \frac{m_i^2}{2E} \quad \text{für } p \gg m_i \quad (\hbar = c = 1). \quad (2.11)$$

$E \approx p$ bezeichnet hier die Energie des ultrarelativistischen Neutrinos.

Wenn man nun auf einen reinen Flavour-Eigenzustand $|\nu_\alpha\rangle$ die Zeitentwicklung (2.10) anwendet und (2.7) sowie (2.8) benutzt, gelangt man zu:

$$|\nu_\alpha(t)\rangle = \sum_i U_{\alpha i} e^{-iE_i t} |\nu_i\rangle = \sum_{i, \beta} U_{\alpha i} U_{\beta i}^* e^{-iE_i t} |\nu_\beta\rangle. \quad (2.12)$$

Mit Hilfe dieses Zustands lässt sich nun die Übergangswahrscheinlichkeit für den Flavourübergang $\nu_\alpha \rightarrow \nu_\beta$ berechnen:

$$P(\nu_\alpha \rightarrow \nu_\beta, t) = |\langle \nu_\beta | \nu_\alpha(t) \rangle|^2 = \delta_{\alpha\beta} - 2\operatorname{Re} \sum_{j>i} U_{\alpha i} U_{\alpha j}^* U_{\beta i}^* U_{\beta j} [1 - e^{-i\Delta_{ij}}] \quad (2.13)$$

mit

$$\Delta_{ij} = (E_i - E_j)t = \frac{\delta m_{ij}^2}{2} \frac{L}{E} \quad \text{und} \quad \delta m_{ij}^2 = m_i^2 - m_j^2. \quad (2.14)$$

Vergeht keine Zeit ($t = 0$), was bedeutet, dass ebenfalls keine Strecke zurückgelegt wird ($L \approx ct = 0$), so findet mit einer Übergangswahrscheinlichkeit von $P(\nu_\alpha \rightarrow \nu_\beta, 0) = \delta_{\alpha\beta}$ demnach keine Neutrinoszillation statt. Ebenfalls keine Oszillation ist möglich, wenn $\delta m_{ij}^2 = 0 \forall i, j$ ist. Wenn Neutrinoszillation auftritt, müssen sich also mindestens zwei Neutrinomassen voneinander unterscheiden, was insbesondere bedeutet, dass nicht alle Neutrinos masselos sind.

Neutrinoszillationsexperimente können nach (2.13) über die Messung der Amplitude der Oszillation die Mischungswinkel Θ_{ij} , sowie über Messung der Frequenz die Differenzen der Neutrinomassenquadrate δm_{ij}^2 bestimmen. Eine Bestimmung der absoluten Neutrinomasse ist mit solchen Experimenten jedoch unmöglich, genauso wie die Festlegung der Massenhierarchie¹.

Mittlerweile haben mehrere Experimente die Existenz von Neutrinoszillationen etabliert. So wurden neben solaren Neutrinos beim SNO-Experiment [Aha05] beispielsweise entsprechende Beobachtungen beim Super-Kamiokande-Experiment mit atmosphärischen Neutrinos [Fuk98], beim KamLAND-Experiment mit Reaktorneutrinos [Kam05] und beim K2K-Experiment mit Beschleunigerneutrinos [Ahn06] gemacht.

2.3 Die Bestimmung der Neutrinomasse

Nachdem man mittlerweile durch die Entdeckung der Neutrinoszillationen von der Existenz massiver Neutrinos ausgeht, werden die Versuche, die Masse der Neutrinos zu messen oder zumindest die Massenskala einzuschränken, weiter vorangetrieben.

Eine Möglichkeit, die Summe aller Neutrinomassen durch die Untersuchung der Strukturbildung und Entwicklung des Universums einzuschränken, liefert die Kosmologie. So lässt sich auf Basis von Messungen des kosmischen Mikrowellenhintergrundes mittels des WMAP Satelliten jene Summe festlegen auf [Han10]:

$$\sum m_\nu < 1.19 \text{ eV}. \quad (2.15)$$

Zieht man weitere Messungen hinzu, wird diese Einschränkung noch strenger. Allerdings sind derartige Grenzen stets modellabhängig.

Eine weitere Möglichkeit zur Abschätzung der Neutrinomasse ist die Untersuchung des neutrinolesen doppelten β -Zerfalls ($0\nu\beta\beta$). Während beim gewöhnlichen doppelten β -Zerfall ($2\nu\beta\beta$) einfach zwei β -Zerfälle simultan stattfinden, wird hierbei das Antineutrino, welches im ersten Zerfall emittiert wird, im zweiten Zerfallsvertex als Neutrino eingefangen. Der neutrinoleso doppelte β -Zerfall ist daher nur möglich, wenn es sich bei dem Neutrino um ein Majorana-Teilchen handelt, sprich Teilchen und Antiteilchen identisch sind.

Gemessen wird hier die effektive Majoranamasse

$$\langle m_{\nu_e} \rangle = \left| \sum_i U_{ei}^2 m_i \right| = \left| \sum_i |U_{ei}|^2 e^{2i\alpha_i} m_i \right|, \quad (2.16)$$

die eine Summe der Masseneigenwerte m_i , die über U_{ei}^2 mischen, darstellt. Man beachte, dass hier Interferenz zwischen den einzelnen Summanden auftreten kann.

¹Zur Erklärung der Hierarchie siehe Abschnitt 3.1

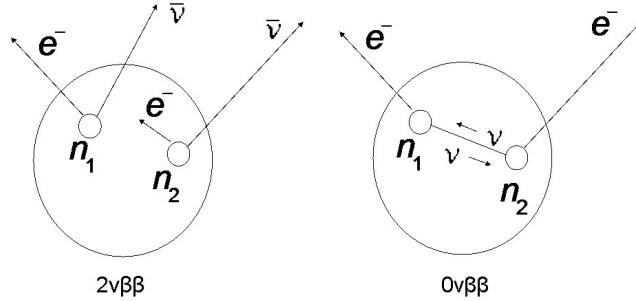


Abbildung 2.1: Schematische Darstellung des gewöhnlichen Doppel- β -Zerfalls (links) und des neutrinolosen Doppel- β -Zerfalls (rechts). Quelle: COBRA Homepage.

Bisher ist strittig, ob beim Heidelberg-Moskau-Experiment [Kla06] ein $0\nu\beta\beta$ -Signal nachgewiesen wurde. Experimente wie GERDA oder Majorana sollen deshalb in naher Zukunft genauere Ergebnisse liefern.

Eine modellunabhängige Möglichkeit zur Neutrinomassenbestimmung bieten Experimente, die das Tritium- β -Spektrum nahe des Endpunktes untersuchen und die (quadratische) Neutrinomasse lediglich anhand kinematischer Beziehungen, d.h. Energie- und Impulserhaltung, ermitteln. Gemessen wird hier

$$m^2(\nu_e) = \sum_{i=1}^3 |U_{ei}|^2 m_i^2. \quad (2.17)$$

Hierbei handelt es sich im Gegensatz zu (2.16) um eine einfache gewichtete Summe der quadratischen Neutrinomassen, und es können keine destruktiven Interferenzen auftreten. Tritium-Experimente eignen sich daher besonders, um die absolute Neutrinomassenskala festzulegen.

Die bisherigen Tritium-Experimente in Troitsk und Mainz gaben die Obergrenzen auf

$$\begin{aligned} \text{Mainz: } m_{\nu_e} &\leq 2.3 \text{ eV} & [\text{Kra05}] \\ \text{Troitsk: } m_{\nu_e} &\leq 2.05 \text{ eV} & [\text{Lob03}] \end{aligned} \quad (2.18)$$

an. Beim Troitsk-Experiment trat die sogenannte Troitsk-Anomalie auf - eine Erhöhung der Zählrate 5-15 eV unterhalb des Endpunktes des β -Spektrums, die mit einer halbjährlichen Periode die Position änderte. Das Troitsk Ergebnis enthält deshalb eine phänomenologische Korrektur dieser Anomalie.

Da beide genannten Experimente ihre maximale Sensitivität erreicht haben, soll das KATRIN-Experiment als Nachfolger mit einer Sensitivität von 200 meV die Neutrinomasse messen oder zumindest eine striktere obere Schranke liefern. Auf das KATRIN-Experiment soll im Kapitel 3 näher eingegangen werden.

3 Das KATRIN-Experiment

In diesem Kapitel sollen die prinzipielle Funktionsweise und die physikalischen Grundlagen zum Verständnis des KATRIN-Experiments erläutert werden. Dazu wird zunächst auf die Motivation des Experiments eingegangen, bevor das Tritium- β -Spektrum kurz vorgestellt wird. Anschließend werden die wichtigsten Komponenten im Aufbau von KATRIN genannt. Dabei werden die Schwerpunkte auf die Tritiumquelle und das Hauptspektrometer gelegt, die in dieser Arbeit eine hervorgehobene Rolle spielen.

3.1 Motivation für das KATRIN-Experiment

Um die vorhandenen sehr kleinen Neutrinomassen zu erklären, existieren verschiedene Erweiterungen des Standardmodells. Vor allem zu nennen sind hier die Seesaw-Mechanismen Typ I und II. Beim Seesaw I Mechanismus werden superschwere (und daher noch nicht beobachtete) rechtshändige Neutrinos N_i eingeführt. Die leichten Neutrinos ν_i werden dabei umso leichter, je schwerer die schweren Neutrinos werden. Modelle nach dem Seesaw I Mechanismus bevorzugen die sogenannte normale Hierarchie der leichten Neutrinos ($m_1 < m_2 < m_3$). Beim Seesaw II Mechanismus wird ein neues Higgs-Triplett eingeführt, das an die leichten Neutrinos koppelt. Modelle dieser Art bevorzugen häufig quasi-entartete ($m_1 \approx m_2 \approx m_3$) Massen. Des Weiteren existieren supersymmetrische Modelle, sowie Modelle mit zusätzlichen Dimensionen zur Erklärung der Neutrinomassen.

Da aus Neutrinooszillationsexperimenten $\Delta m_{\text{solar}}^2 = |\Delta m_{21}^2| \approx 7 \cdot 10^{-5} \text{ eV}^2$ [Ahm03] und $|\Delta m_{13}^2| \approx 2.4 \cdot 10^{-3} \text{ eV}^2$ [Nak10] bekannt ist und außerdem $\Delta m_{32}^2 + \Delta m_{21}^2 + \Delta m_{13}^2 = 0$ gelten muss, lassen sich für den Fall normaler Hierarchie ($m_1 < m_2 < m_3$) die Neutrinomassen als Funktion von m_1 darstellen (s. Abb. 3.1). Das KATRIN-Experiment kann durch eine Festlegung oder weitere Einschränkung der Massenskala engere Randbedingungen für beschreibende Modelle liefern.

Auch in der Kosmologie und Astrophysik ist eine möglichst genaue Kenntnis der Neutrinomasse wünschenswert, da *relic neutrinos* aufgrund ihrer hohen Häufigkeit von 336 cm^{-3} einen signifikanten Beitrag zur gesamten Energiedichte unseres Universums leisten. Des Weiteren spielen Neutrinos als heiße dunkle Materie eine wichtige Rolle in der Strukturbildung unseres Universums auf großen Skalen, da kosmologische Modelle stark von dem Verhältnis von kalter dunkler Materie (CDM) zur heißen dunklen Materie der Neutrinos (ν HDM) abhängen.

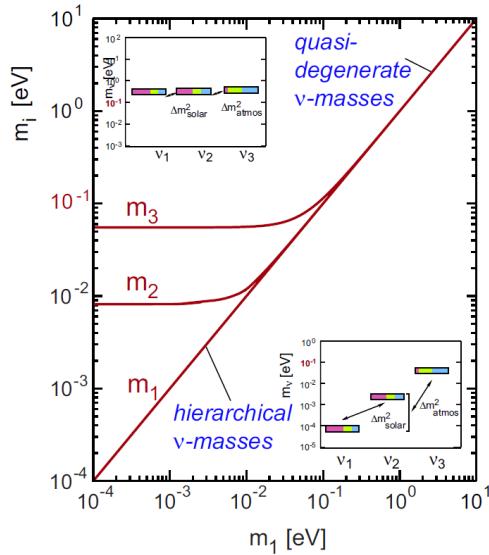


Abbildung 3.1: Eigenwerte der Neutrinomassen als Funktion der kleinsten Neutrinomasse m_1 für normale Hierarchie. Für die derzeit bekannten Differenzen $|\Delta m_{21}^2|$ und $|\Delta m_{13}^2|$ erkennt man für relativ große Massen m_1 , dass die Massendifferenzen gegenüber den absoluten Massen vernachlässigbar sind und eine quasi-Entartung vorliegt. Bei kleineren Massen wird diese Entartung aufgehoben. Die farbigen Boxen zeigen den Anteil der Neutrino-Flavours am entsprechendem Masseneigenwert nach jetzigen Mischungsparametern (rot: ν_e , grün: ν_μ , blau: ν_τ). Quelle: [KAT04].

3.2 Das Tritium- β -Spektrum

Beim KATRIN-Experiment soll die Ruhemasse des Elektronantineutrinos direkt durch Untersuchung des β -Spektrums beim Tritium- β -Zerfall



bestimmt werden. Unter der Näherung, dass der Mutterkern lediglich einen Impuls bei dem Zerfall davonträgt und die Rückstoßenergie aufgrund der großen Masse gegenüber Elektron und Neutrino vernachlässigt werden kann, lautet das β -Spektrum [Alt03]:

$$\frac{d\dot{N}}{dE} = R(E) \sqrt{(E_0 - E)^2 - m_{\bar{\nu}_e}^2 c^4} \Theta(E_0 - E - m_{\bar{\nu}_e} c^2). \quad (3.2)$$

mit

$$R(E) = \frac{G_F^2}{2\pi^3 \hbar^7} \cos^2 \Theta_C |M|^2 F(Z+1, E) p (E + m_e c^2)(E_0 - E). \quad (3.3)$$

Dabei wurden folgende Bezeichnungen verwendet:

G_F	die Fermi Kopplungskonstante
Θ_C	der Cabibbowinkel
$M(E)$	das Kernmatrixelement
$F(Z, E)$	die Fermifunktion des Elektrons unter Berücksichtigung der Coulomb-Wechselwirkung mit dem Kern
p	der Impuls des Elektrons
E	die kinetische Energie des Elektrons
E_0	die Endpunktsenergie des β -Spektrums
$m_e c^2$	die Ruheenergie des Elektrons
$m_{\bar{\nu}_e} c^2$	die Ruheenergie des Elektronantineutrinos

In Abb. 3.2 ist das β -Spektrum für zwei unterschiedliche Neutrinomassen dargestellt. Es wird deutlich, dass sich unterschiedliche Neutrinomassen besonders am Ende des Spektrums durch einen anderen Endpunkt und einen anderen Kurvenverlauf bemerkbar machen. Aus diesem Grund wird sich die Messung vor allem auf diesen Endbereich konzentrieren.

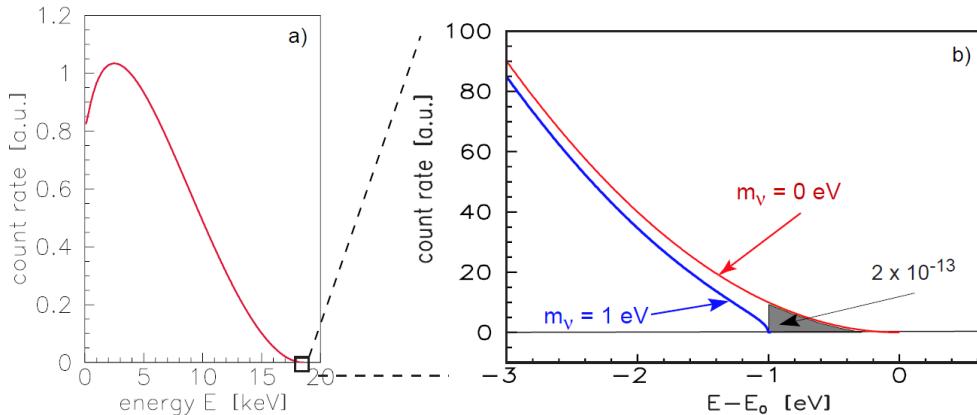


Abbildung 3.2: a) Gesamtes Tritium- β -Spektrum. b) Ausschnitt der Endpunktsregion. Quelle: [KAT04].

konzentrieren. Da nur $2 \cdot 10^{-13}$ aller Elektronen in den Bereich 1 eV unterhalb der Endpunktsenergie fallen, ist für das Experiment neben einer hohen Energieauflösung die Luminosität der Quelle von besonderer Bedeutung. Vor diesem Hintergrund wird Tritium aus folgenden Gründen als Quellmaterial verwendet:

- Tritium besitzt mit $E_0 = 18.6 \text{ keV}$ die zweitniedrigste Endpunktsenergie der bekannten β -Strahler. Dies ist wichtig, da der Anteil der Elektronen, die in den Endbereich fallen, mit $1/E_0^3$ steigt.
- Die Halbwertszeit von Tritium ist mit $t_{1/2} = 12.3 \text{ a}$ vergleichsweise klein, wodurch weniger Quellmaterial für eine hohe Luminosität benötigt wird.
- Der Tritium- β -Zerfall ist übererlaubt, womit das Kernmatrixelement $M(E)$ als energieunabhängige Konstante aufgefasst werden kann.
- Tritium besitzt eine sehr einfache elektronische Struktur, wodurch die Endzustände der Tochtermoleküle leicht zu berechnen sind.

- Durch die kleine Kernladungszahl $Z = 1$ streuen nur wenige Elektronen inelastisch mit dem Tritium.

3.3 Der Aufbau des KATRIN-Experiments

In diesem Abschnitt wird der Aufbau des KATRIN-Experiments beschrieben und die einzelnen Komponenten kurz vorgestellt. Dabei wird der Schwerpunkt auf die Tritiumquelle und das Hauptspektrometer gelegt, da die Eigenschaften dieser Systeme für diese Arbeit eine besondere Rolle spielen.

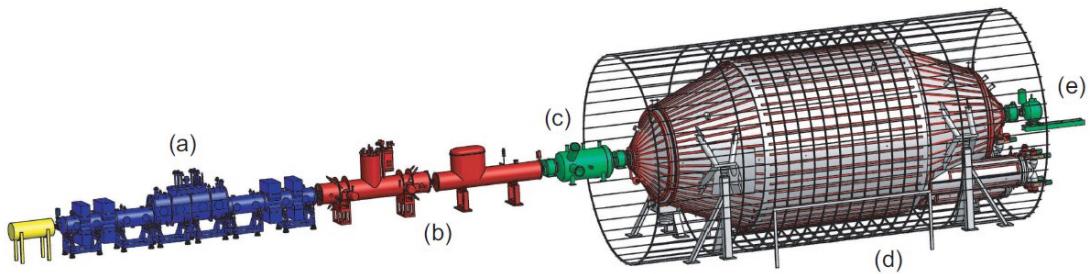


Abbildung 3.3: Der Aufbau des KATRIN-Experiments mit fensterloser gasförmiger Tritiumquelle (a), Transportsystem (b), Vorschektor (c) und Hauptspektrometer (d) sowie dem Elektronendetektor (e). In dem gelb markierten rear system befindet sich u.a. die Elektronenkanone für Kalibrierungsmessungen. Quelle: [Wol08].

3.3.1 Die Tritiumquelle

Die sogenannte fensterlose, gasförmige Tritiumquelle (engl. *windowless gaseous tritium source*, WGTS) stellt die Standardquelle für β -Elektronen während der Langzeitmessungen von KATRIN dar. In die 10 m lange Röhre mit einem Durchmesser von 90 mm wird mittig kaltes Tritiumgas mit 27K und einer Reinheit $\epsilon_T > 95\%$ eingelassen. Die Tritiummoleküle diffundieren daraufhin in einer Zeit von ca. 1s zu den 5 m entfernten Enden der Röhre, wo der Großteil abgepumpt wird. Die Zerfallswahrscheinlichkeit für jedes Molekül beträgt daher etwa 10^{-9} . Elektronen aus β -Zerfällen werden von einem Magnetfeld innerhalb der Quelle mit $B_S = 3.6 \text{ T}$ adiabatisch zu den beiden Enden der Quelle geführt. Die WGTS trägt im Experiment zur systematischen Unsicherheit bei. Dieser Beitrag röhrt im Wesentlichen von Fluktuationen der Säulendichte ρd^1 her. Diese soll während der Messungen $5 \cdot 10^{17} \text{ cm}^{-2}$ betragen und mit einer Genauigkeit von 0.1% bekannt sein. Dies führt zu technischen Herausforderungen, da Parameter wie der Eindruck des Gases oder die Röhrentemperatur mit großer Genauigkeit und Stabilität eingestellt werden müssen.

¹Die Säulendichte gibt die Anzahl der Teilchen pro Fläche an, die man durch Projektion der Quelle auf ihre Querschnittsfläche erhält.

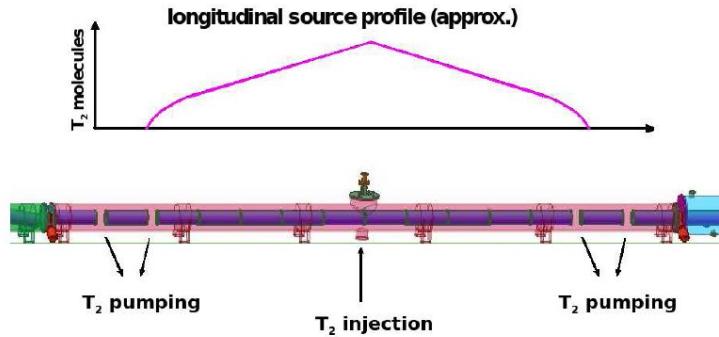


Abbildung 3.4: Schematische Ansicht der WGTS und des Dichteprofils der Tritiummoleküle.
Quelle: [Hug08].

Für die Signalrate S der Quelle gilt:

$$S \propto \frac{1}{1 + \cos \Theta_{\max}} \cdot \rho d \cdot P_0(\rho d, \Theta_{\max}) = (\rho d)_{\text{eff}} \quad (3.4)$$

mit Θ_{\max} als maximal akzeptierten Startwinkel der Elektronen und P_0 als Wahrscheinlichkeit für ein Elektron ohne Streuung an T₂ die Quelle zu passieren. P_0 ist dabei ein Mittelwert über alle möglichen Startpositionen in der Quelle und allen Startwinkeln bis Θ_{\max} . Die effektive Säulendichte $(\rho d)_{\text{eff}}$ lässt sich daher als Säulendichte einer virtuellen Quelle von ungestreuten Elektronen auffassen. Erhöht man nun die Säulendichte, um eine höhere Signalrate zu erzielen, wird die effektive Säulendichte nicht etwa beliebig groß, sondern erreicht asymptotisch einen Grenzwert, da P_0 gleichzeitig kleiner wird:

$$(\rho d)_{\text{eff}} = \frac{1}{1 + \cos \Theta_{\max}} \cdot \rho d \cdot P_0(\rho d, \Theta_{\max}) \xrightarrow{d \rightarrow \infty} \frac{(\rho d)_{\text{frei}}}{2} = \frac{1}{2 \cdot \sigma}. \quad (3.5)$$

$(\rho d)_{\text{frei}}$ bezeichnet hier die aus der mittleren freien Weglänge $d = 1/\rho\sigma$ abgeleitete mittlere freie Säulendichte und σ den totalen Wirkungsquerschnitt von T₂ für Elektronenstreuung. Wie aus Abb. 3.5 ersichtlich, wird KATRIN deutlich näher an dieser idealen effektiven Säulendichte operieren als die Vorläuferexperimente.

3.3.2 Das Transportsystem

Das Transportsystem hat die Aufgabe, mittels Magnetfeldern die Elektronen aus den β -Zerfällen adiabatisch zu den Spektrometern zu führen. Außerdem sollen verbliebene Tritiummoleküle entfernt werden, um zu verhindern, dass sie ins Hauptspektrometer gelangen, dort zerfallen und somit für einen Untergrund sorgen, der die Sensitivität auf die Neutrinomasse verschlechtert. Dafür wird die aktive differentielle Pumpstrecke (DPS) benutzt, welche mithilfe von Turbopumpen Tritium abpumpt und (nach Aufbereitung) in die Quelle zurückführt. Dahinter befindet sich die passive kryogene Pumpstrecke (CPS), an der weiteres Tritium ausgefroren wird.

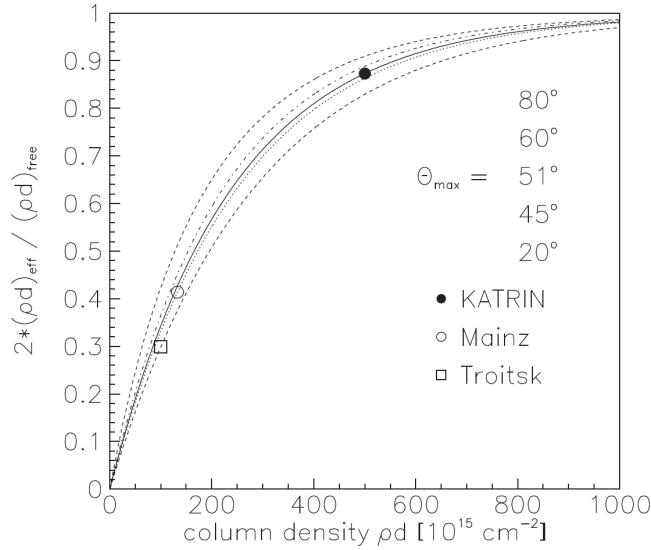


Abbildung 3.5: Effektive Säulendichte in der WGTS in Einheiten des maximal erreichbaren Wertes $2*(\rho d)_{\text{eff}} / (\rho d)_{\text{frei}}$ und in Abhängigkeit der Säulendichte ρd für unterschiedliche maximale Startwinkel Θ_{max} . Eingezeichnet sind zudem die Parameter für das Troitsker, Mainzer und das KATRIN-Experiment. Quelle: [KAT04].

3.3.3 Das Vorspektrometer

Das Vorspektrometer ist wie das Hauptspektrometer ein MAC-E-Filter (s. 3.3.4). Es ist 3.38 m lang, hat einen Durchmesser von 1.7 m und dient als Vorfilter für das Hauptspektrometer. Nur Elektronen mit einer Energie von $E > 18.3 \text{ keV}$ können das Vorspektrometer passieren. Es filtert damit bereits den Großteil der Elektronen heraus, der für die Messung nahe des Endpunktbereichs ohnehin uninteressant ist. Das Vorspektrometer reduziert somit den Untergrund in der Messung, da diese Elektronen ansonsten ionisierende Stöße mit dem Restgas im Hauptspektrometer vollziehen könnten.

3.3.4 Das Hauptspektrometer - ein MAC-E-Filter

Das in Abb. 3.6 schematisch dargestellte Hauptspektrometer ist für die eigentliche Analyse der Energie der Elektronen verantwortlich und bildet mit 23 m Länge und 10 m Durchmesser das Kernstück des KATRIN-Experiments. Das Hauptspektrometer ist ein sogenannter MAC-E-Filter (engl. Magnetic Adiabatic Collimation and Electrostatic Filter). MAC-E-Filter sind im Prinzip Gegenfeldanalysatoren, bei denen die Energie eines geladenen Teilchens in Abhängigkeit davon gemessen wird, ob bei einer bestimmten angelegten Gegenspannung Transmission auftritt oder nicht. Zusätzlich werden bei einem MAC-E-Filter die Teilchen adiabatisch durch Magnetfeldlinien geführt und führen daher eine Zyklotronbewegung um diese Feldlinien aus.

Die kinetische Energie der Elektronen im Hauptspektrometer von KATRIN kann man sich als Summe der Energien aus transversaler und longitudinaler Bewegung vorstellen:

$$E_{\text{kin}} = E_{\parallel} + E_{\perp}. \quad (3.6)$$

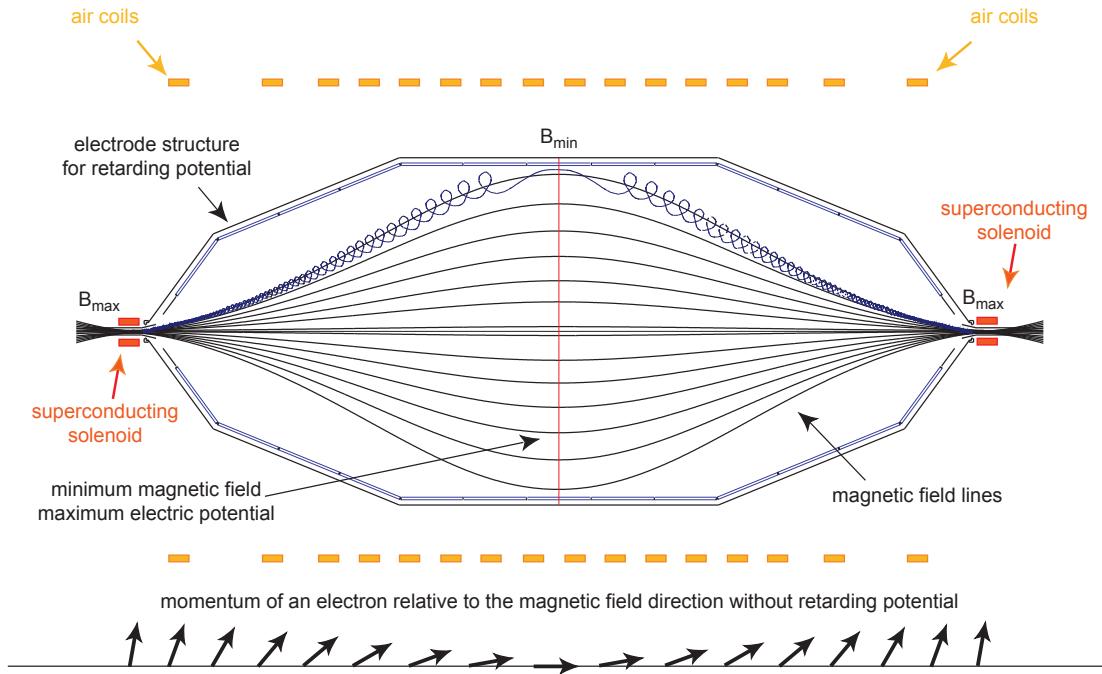


Abbildung 3.6: Schematische Zeichnung des KATRIN-Hauptspektrometers. Eingezeichnet sind Analysierebene und Magnetfeldlinien, sowie die überzeichnete Zyklotronbewegung eines Elektrons. Unten ist die Richtung des Impulses relativ zum Magnetfeld zu sehen. Quelle: [Hug08].

Dabei ist

$$E_{\perp} = E_{\text{kin}} \sin^2 \Theta \quad (3.7)$$

$$E_{\parallel} = E_{\text{kin}} \cos^2 \Theta \quad (3.8)$$

mit Θ als Winkel zwischen Impulsvektor und Magnetfeldlinie. Durch ihre Zyklotronbahnbewegung erhalten die Elektronen im nichtrelativistischem Grenzfall ein magnetisches Moment

$$\mu = |\vec{\mu}| = \frac{E_{\perp}}{B}. \quad (3.9)$$

Ist die relative Magnetfeldänderung $\Delta B/B$ klein während einer Zyklotronperiode, so hat die Bahnbewegung Zeit ihren Radius anzupassen und das magnetische Moment μ ist erhalten. Da die Magnetfeldstärke B zur Spektrometermitte hin abfällt, muss dann nach Gleichung 3.9 die Energie der transversalen Bewegung E_{\perp} ebenfalls abnehmen. Diese Energie wird aufgrund der magnetischen Gradientenkraft (ebenfalls nichtrelativistisch)

$$\vec{F} = \vec{\nabla}(\vec{\mu} \cdot \vec{B}) \quad (3.10)$$

parallel zu den Magnetfeldlinien in die longitudinale Bewegung transferiert. Die Erhaltung von μ ist damit gleichbedeutend mit der Adiabasie. Da der MAC-E-Filter durch sein Retardierungspotential nur sensitiv auf die longitudinale Energie E_{\parallel} ist, ist dieser

Effekt der adiabatischen Kollimation also durchaus sehr wichtig, da durch eine Änderung der Magnetfeldstärke über mehrere Größenordnungen sichergestellt wird, dass in der Analysierebene $E_{\text{kin}} \approx E_{\parallel}$ ist und damit tatsächlich die gesamte kinetische Energie berücksichtigt wird. Darüber hinaus sollten die Bereiche minimaler Magnetfeldstärke und maximaler Retardierungsspannung in der Analysierebene in der Mitte des Spektrometers möglichst gut zusammenfallen. Die nichtrelativistische Betrachtung ist bei KATRIN wegen $\gamma_{\text{max}} = 1.04 \approx 1$ in guter Näherung erfüllt.

Mit Gleichung 3.9 und konstantem μ erhält man die verbleibende transversale Energie eines Elektrons in Abhängigkeit zur transversalen Anfangsenergie also nach

$$(E_{\perp})_f = (E_{\perp})_i \cdot \frac{B_f}{B_i}. \quad (3.11)$$

Die Energieauflösung des MAC-E-Filters entspricht $(E_{\perp})_f$, wenn man davon ausgeht, dass die gesamte Energie des Elektrons am Anfang als Transversalenergie $E_0 \approx 18600$ eV vorliegt:

$$\Delta E = (E_{\perp})_{f,\text{max}} = E_0 \cdot \frac{B_{\min}}{B_{\max}}. \quad (3.12)$$

Der MAC-E-Filter ist ein integrierender Hochpassfilter, da alle Elektronen, die die Transmissionsbedingung

$$E_{\parallel}^A \geq qU \quad (3.13)$$

erfüllen, gleichermaßen transmittiert werden, unabhängig von ihrer Energie. Mit A als Bezeichnung für die Analysierebene und S als Quelle lässt sich 3.13 unter Ausnutzung von 3.6 und 3.11 schreiben als:

$$E_{\parallel}^A - qU = (E - E_{\perp}^A) - qU = (E - (E \cdot \sin^2 \Theta_S \cdot \frac{B_A}{B_S})) - qU \geq 0. \quad (3.14)$$

Löst man diese Ungleichung nach Θ_S auf, sieht man, dass nur Elektronen mit Startwinkeln

$$\Theta_S \leq \Theta_{S,\text{max}} = \arcsin \sqrt{\frac{E - qU}{E} \frac{B_S}{B_A}}. \quad (3.15)$$

die Analysierebene überwinden können. Hinzu kommt bei KATRIN, dass die Elektronen in der Quelle in einem Magnetfeld B_S starten, das kleiner ist als B_{\max} am Pinch-Magneten. Daher werden Elektronen mit Winkeln, die kleiner sind als der kritische Winkel

$$\Theta_{\max} = \arcsin \sqrt{\frac{B_S}{B_{\max}}} \approx 50.77^\circ \quad (3.16)$$

magnetisch reflektiert (KATRIN-Standardparameter: $B_S = 3.6$ T, $B_{\max} = 6$ T). Diese Wahl $B_S < B_{\max}$ wird getroffen, um jene Elektronen zu reflektieren, die aufgrund ihres großen Winkels lange Wege in der Quelle zurücklegen und daher mit größerer Wahrscheinlichkeit inelastisch streuen. Berücksichtigt man die beiden genannten begrenzenden Faktoren und außerdem nur Elektronen, die in den vorderen Halbraum emittiert werden, so gelangt man zur analytischen Transmissionsfunktion:

$$T(E, qU) = \begin{cases} 0 & E - qU < 0 \\ \frac{1 - \sqrt{1 - \frac{E - qU}{E} \frac{B_S}{B_A}}}{1 - \sqrt{1 - \frac{\Delta E}{E} \frac{B_S}{B_A}}} & \text{für } 0 \leq E - qU \leq \Delta E \\ 1 & \Delta E \leq E - qU \end{cases} \quad (3.17)$$

Diese Funktion ist in Abb. 3.7 dargestellt. Man erkennt dort, dass für negative Überschussenergien $E - qU$ keine Transmission auftritt und erst mit einer gewissen Steigung am Nullpunkt einsetzt. In dem Bereich der Steigung können nach (3.15) zunächst jene Elektronen mit kleinen Winkeln Θ und daraus resultierender großer longitudinaler Energie E_{\parallel} passieren. Mit größeren Überschussenergien werden schließlich auch Elektronen mit immer größeren Winkeln durchgelassen, solange bis der maximale akzeptierte Winkel Θ_{\max} bei 0.93 eV Überschussenergie erreicht ist.

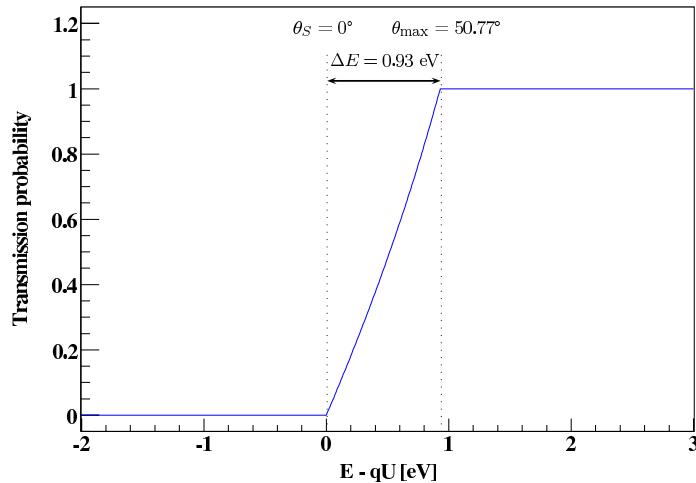


Abbildung 3.7: Die analytische Transmissionsfunktion nach (3.17). Die Breite der Flanke wird durch den maximal akzeptierten Startwinkel Θ_{\max} definiert. Quelle: [Wol08].

Man beachte, dass diese Transmissionsfunktion keine inelastischen Stöße der Elektronen mit Tritium berücksichtigt. Zieht man Energieverluste hinzu, erhält man die sogenannte Antwortfunktion f_{res} , die in Kapitel 4 beschrieben wird.

Eine ausführliche Herleitung der analytischen Transmissionsfunktion findet man in [Val04].

3.3.5 Der Detektor

Zur Detektion der transmittierten Elektronen wird ein Silizium-Halbleiter-Detektor verwendet, der in 148 Pixel unterteilt ist. Dadurch erhält der Detektor eine räumliche Auflösung, die benötigt wird, um bei Testmessungen Inhomogenitäten in den elektromagnetischen Feldern in der Analysierebene zu registrieren. Im Prinzip braucht der Detektor keine hohe Energieauflösung, da die präzise Analyse der Energien vom Hauptspektrometer übernommen wird. Zur Untergrundreduzierung besitzt der Detektor dennoch eine Auflösung von etwa < 1 keV für Energien um 18600 eV.

4 Streuprozesse in der Quelle

Dieses Kapitel befasst sich mit den Streuprozessen von Elektronen an Tritiummolekülen in der Quelle von KATRIN und ihren Auswirkungen auf die Transmission. Es wird dabei ein Verständnis für die Energieverlustfunktion, Transmissionsfunktion, Antwortfunktion und ihren Zusammenhängen vermittelt, das für die weiteren Ausführungen in dieser Arbeit notwendig ist.

4.1 Die Energieverlustfunktion

Da in der WGTS Elektronen mit Tritiummolekülen streuen können und daher Energieverluste erfahren, muss die Energieverlustfunktion $f(\Delta E)$ für die Transmission der Elektronen berücksichtigt werden, sofern die Säulendichte von 0 verschieden ist. Die Energieverlustfunktion beschreibt die Wahrscheinlichkeitsdichte dafür, dass ein gewisser Energieverlust ΔE auftritt. Mit dieser Wahrscheinlichkeitsinterpretation muss gelten:

$$1 = \int f(\Delta E) d\Delta E. \quad (4.1)$$

Die Energieverlustfunktion setzt sich hierbei aus dem energiedifferentiellen Wirkungsquerschnitt $d\sigma/d\Delta E$ und dem totalen Wirkungsquerschnitt σ_{tot} zusammen:

$$1 = \frac{1}{\sigma_{\text{tot}}} \int \frac{d\sigma}{d\Delta E} d\Delta E. \quad (4.2)$$

Da sich $d\sigma/d\Delta E$ und $f(\Delta E)$ nur um einen Faktor $1/\sigma_{\text{tot}}$ unterscheiden, werden im Laufe dieser Arbeit beide Funktionen Energieverlustfunktion genannt. Die Normierung wird dabei an entsprechender Stelle aber stets gewährleistet.

Es sei zu beachten, dass bei der Energieverlustfunktion $d\sigma/d\Delta E$ über die Streuwinkel integriert wird. Die vollständige Beschreibung wäre hier also der doppelt-differentielle Wirkungsquerschnitt $d^2\sigma/d\Delta E d\Omega$. Zur Vereinfachung des Problems wird die Winkelabhängigkeit hier allerdings nicht berücksichtigt. Dies ist gerechtfertigt, da in dem für KATRIN relevanten Energiebereich bis 30 eV unterhalb des Endpunkts nur entsprechend kleine Energieverluste eine Rolle spielen. Für derart kleine Energieverluste liegt die Winkelverteilung bei $e\text{-H}_2$ -Streuung relativ scharf um ca. 1° (vgl. [Uls72]). Abb. 4.1 zeigt das von uns benutzte Modell der Energieverlustfunktion. Zu erkennen sind die verschiedenen Arten von Energieverlusten:

- **Elastische Stöße.** Energieverluste durch elastische Stöße gehen hauptsächlich mit sehr kleinen Energieverlusten $\lesssim 1 \text{ eV}$ einher. Der Grund dafür ist die viel größere Masse des Tritiummoleküls gegenüber dem Elektron und der damit verbundene geringe Impuls- und Energieübertrag.

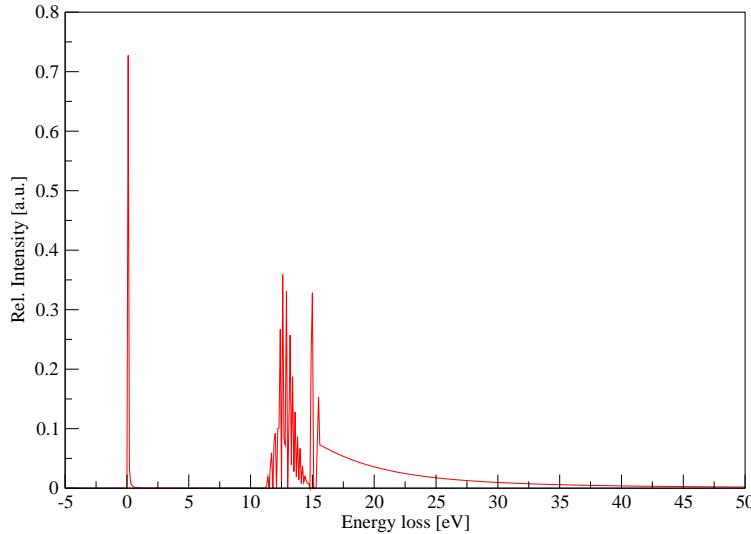


Abbildung 4.1: Modell der Energieverlustfunktion. Zu erkennen sind Energieverluste durch elastische Stöße ($\lesssim 1$ eV), elektronische Anregungen inkl. Vibrationszuständen (11–15 eV), dissoziative Anregung (15 eV) und Ionisation (ab 15.4 eV).

- **Anregung.** In dem Bereich zwischen 11 – 15 eV findet man die Struktur der elektronischen Anregungen des T_2 -Moleküls. Angeregt werden hier vor allem die $B(2p\sigma^1\Sigma_u^+)$ und $C(2p\pi^1\Pi_u)$ Molekülorbitale. Für diese beiden elektronischen Zustände werden auch die Vibrationsanregungen berücksichtigt.
- **Dissoziative Anregung.** Die Dissoziation nach



ist der vorwiegende dissoziative Prozess für 18.6 keV Elektronen und ist im Modell bei etwa 15 eV gut zu erkennen.

- **Ionisation.** Ab ≈ 15.4 eV beginnt das Kontinuum der Ionisation.

Das Modell beruht dabei auf Streuexperimenten von Elektronen an molekularem Wasserstoff. Die Ergebnisse dieser Experimente sind im Falle der Anregung, Dissoziation und Ionisation auch für Tritium gültig, da beide Isotope die gleiche elektronische Struktur aufweisen. Im Falle der elastischen Stöße und der Vibrationsanregungen führt dies aufgrund der unterschiedlichen Masse allerdings zu einem Fehler.

Das in [Wol08] vorgestellte Modell der Energieverlustfunktion umfasste bereits elektronische Anregungen und Ionisation. Eine Beschreibung dieser Prozesse lässt sich dort finden. Die in dieser Arbeit ebenfalls berücksichtigten Rotations- und Vibrationsanregungen werden in Abschnitt 4.5 näher erläutert. Außerdem werden die Auswirkungen der hinzugefügten elastischen Streuung in Abschnitt 6.2.1 gezeigt.

4.2 Die Transmissionsfunktion

Zur Messung der Antwortfunktion wird bei KATRIN eine UV-Laser-basierte Elektronenkanone (engl. *e-gun*) verwendet. Da die genauen Eigenschaften dieser e-gun noch nicht bekannt sind, wird für die spektrale Breite $\sigma = 0.2 \text{ eV}$ angenommen, die mithilfe einer UV-LED-basierten Elektronenkanone bereits realisiert wurde [Val09]. Dies hat zur Folge, dass die in 3.3.4 eingeführte analytische Transmissionsfunktion für diese Messung um den Effekt dieser „Energieunschärfe“ erweitert werden muss. Dies geschieht durch Faltung der analytischen Transmissionsfunktion mit dem Energiespektrum der e-gun:

$$T_{\text{egun}}(E, qU) = T(E, qU) \otimes S_{\text{egun}}. \quad (4.4)$$

In Abb. 4.2 erkennt man, dass durch diese Faltung die Kanten in der Transmissions-

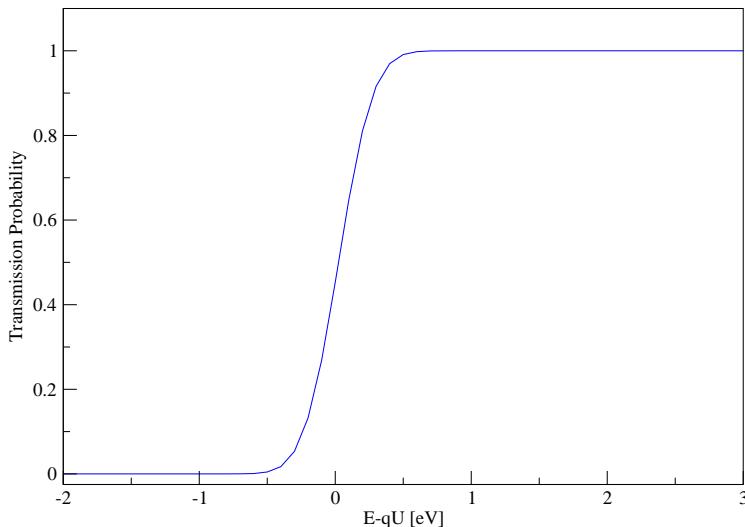


Abbildung 4.2: Transmissionsfunktion unter Einbeziehung der Energieverbreiterung einer *e-gun* mit gaußförmigem Spektrum und $\sigma = 0.2 \text{ eV}$.

funktion verschmiert werden und sich der Bereich der Flanke verbreitert. Außerdem erkennt man, dass Transmission für Überschussenergien $E - qU < 0$ stattfinden kann. Dies hängt damit zusammen, dass weiterhin für ein festes $E = 18.6 \text{ keV}$ aufgetragen wird. Diese Energie stellt allerdings nur die mittlere Startenergie der Elektronen dar. Tatsächlich starten auch Elektronen mit $E^* > E$ und können deshalb auch bei höheren Retardierungsspannungen die Analysierebene überwinden.

4.3 Antwortfunktion und Streufunktionen

Die Antwortfunktion f_{res} lässt sich als eine Art effektive Transmissionsfunktion verstehen. Sie berücksichtigt Energieverluste durch inelastische Stöße und ist daher auch für

nichtverschwindende Säulendichten gültig. Sie gibt die relative Intensität, die man am Detektor misst, als Funktion der Retardierungsspannung an. Die Antwortfunktion ist näherungsweise eine i -fache Faltung der Transmissionsfunktion mit der Energieverlustfunktion:

$$\begin{aligned} f_{\text{res}}(E, qU) &= T(E, qU) \otimes P_0 \\ &\quad + T(E, qU) \otimes P_1 \cdot \frac{d\sigma}{d\Delta E} \\ &\quad + T(E, qU) \otimes P_2 \cdot \frac{d\sigma}{d\Delta E} \otimes \frac{d\sigma}{d\Delta E} \\ &\quad + \dots \end{aligned} \tag{4.5}$$

mit P_i als Wahrscheinlichkeit für i -fache Streuung. Für die Messung der Antwortfunktion mit der e-gun ist T in dieser Gleichung entsprechend durch T_{egun} zu ersetzen. Da sich diese Arbeit im Folgenden ausschließlich mit e-gun-Messungen befasst, wird T fortan als Synonym für T_{egun} gebraucht.

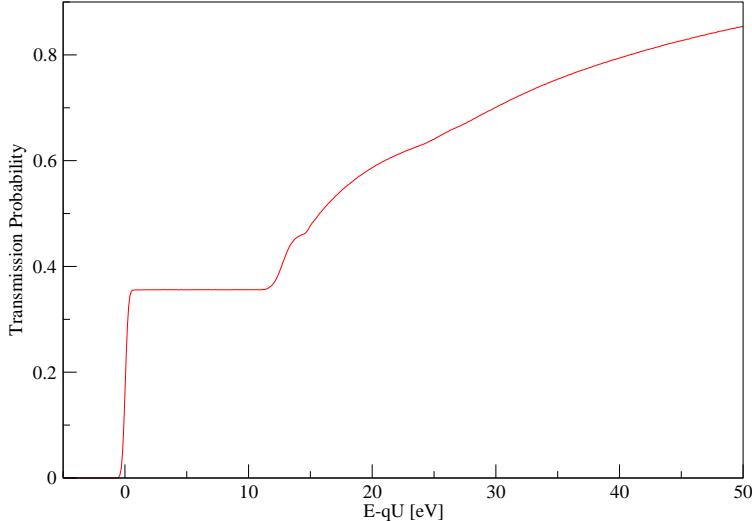


Abbildung 4.3: Beispiel einer Antwortfunktion mit den KATRIN Standardparametern und einer Säulendichte von $\rho d = 3 \cdot 10^{17} \text{ cm}^{-2}$.

Man kann Gleichung (4.5) mit den Abkürzungen

$$\begin{aligned} \epsilon_0(\Delta E) &= T(E, qU) \\ \epsilon_1(\Delta E) &= T(E, qU) \otimes \frac{d\sigma}{d\Delta E} \\ \epsilon_2(\Delta E) &= T(E, qU) \otimes \frac{d\sigma}{d\Delta E} \otimes \frac{d\sigma}{d\Delta E} \\ &\dots \end{aligned} \tag{4.6}$$

vereinfachen zu:

$$f_{\text{res}}(E, qU) = P_0 \cdot \epsilon_0(\Delta E) + P_1 \cdot \epsilon_1(\Delta E) + P_2 \cdot \epsilon_2(\Delta E) + \dots \quad (4.7)$$

Die Funktionen ϵ_i sind hierbei die i -fach-Streufunktionen. Diese Streufunktionen kann man ihrerseits wieder als effektive Transmissionsfunktionen auffassen; sie gelten jedoch nur für jeweils i -fach gestreute Elektronen. In Abb. 4.4 sind diese Funktionen dargestellt.

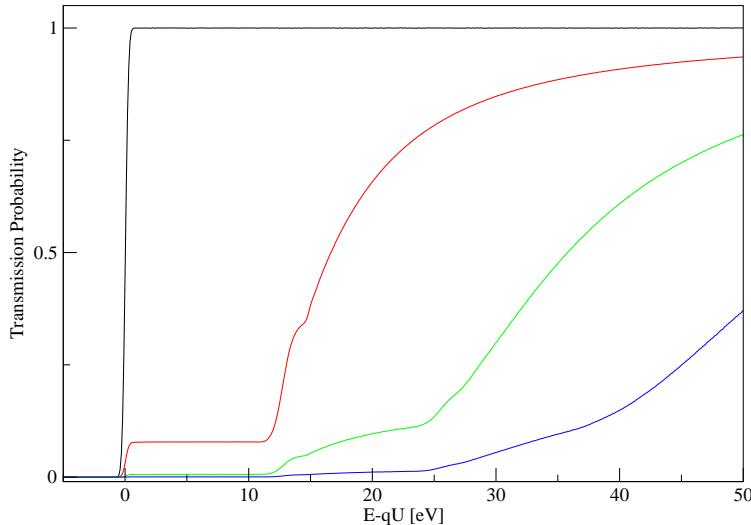


Abbildung 4.4: Transmissionsfunktion $T = \epsilon_0$ (schwarz) und die Streufunktionen ϵ_1 (rot), ϵ_2 (grün) und ϵ_3 (blau).

Man erkennt, dass ungestreute Elektronen gemäß der bereits diskutierten Transmissionsfunktion die Analysierebene passieren. Die durch ϵ_1 repräsentierten einfach gestreuten Elektronen beginnen erst ab ca. 12 eV in größerem Umfang transmittiert zu werden. Dies ergibt sich daraus, dass diese Elektronen in den meisten Fällen einen Energieverlust $\Delta E > 12$ eV erfahren haben, da sich gemäß der Energieverlustfunktion in Abb. 4.1 in diesem Bereich die ersten Anregungen des Tritiums befinden. Ein kleiner Teil der einfach gestreuten Elektronen werden allerdings auch im Bereich von 1-11 eV transmittiert, was sich darin widerspiegelt, dass ϵ_1 hier nicht den Wert 0 annimmt. Diese Elektronen müssen zwangsläufig einen kleinen Energieverlust durch elastische Streuung erfahren haben. Die Funktionen ϵ_2 und ϵ_3 liefern ab ca. 25 bzw. 40 eV einen größeren Beitrag. Hier gelten analoge Überlegungen.

Da die Antwortfunktion in Abb. 4.3 lediglich eine durch die Streuwahrscheinlichkeiten P_i gewichtete Summe aus den Streufunktionen darstellt, ist die Form dieser Funktion nun physikalisch sehr leicht verständlich. So entspricht sie im Bereich bis 11 eV im Wesentlichen der Transmissionsfunktion ungestreuter Elektronen. Ein „Knick“ in der Antwortfunktion, wie er bei ≈ 12 eV deutlich und bei ≈ 25 eV schwach zu erkennen ist,

deutet dementsprechend auf das Einsetzen der Transmission von einfach bzw. zweifach gestreuten Elektronen hin.

Dadurch, dass sich die Streufunktionen lediglich aus der Energieverlustfunktion und der Transmissionsfunktion zusammensetzen, sind sie nur vom experimentellen Aufbau von KATRIN abhängig und hängen im Gegensatz zur Antwortfunktion nicht von der Säulendichte ab.

4.4 Die Streuwahrscheinlichkeiten

Die Wahrscheinlichkeit P'_k , dass ein Elektron k -mal in der Quelle streut, ist gegeben durch die Poissonverteilung

$$P'_k(\mu) = \frac{\mu^k}{k!} e^{-\mu} \quad (4.8)$$

mit μ als Erwartungswert der Anzahl der Streuungen. μ ergibt sich dabei aus dem Verhältnis der Säulendichte $\rho d / \cos \Theta$ zur bereits in Abschnitt 3.3.1 eingeführten mittleren freien Säulendichte $(\rho d)_{\text{frei}}$:

$$\mu(\Theta) = \frac{\rho d}{(\rho d)_{\text{frei}} \cdot \cos \Theta}. \quad (4.9)$$

Da nicht alle Elektronen mit dem gleichen Winkel Θ in die Quelle eintreten, ist zur Berechnung von mittleren Streuwahrscheinlichkeiten noch die normierte Winkelverteilung $f(\Theta)$ in der Quelle interessant. Die mittleren Streuwahrscheinlichkeiten $P_k(\mu(\Theta))$ lauten dann:

$$P_k(\mu(\Theta)) = \int_0^{\pi/2} f(\Theta) P'_k(\mu(\Theta)) d\Theta. \quad (4.10)$$

Die Winkelverteilung $f(\Theta)$ innerhalb der Quelle berechnet sich aus der Winkelverteilung $f'(\Theta)$ der Elektronenkanone durch adiabatische Transformation. Von der e-gun ist bereits bekannt, dass sie kleine Winkeldivergenzen in der Größenordnung von $1\text{-}2^\circ$ besitzen wird, die genaue Winkelverteilung kann allerdings erst nach Fertigstellung bestimmt werden. In dieser Arbeit wird daher eine isotrope Verteilung in der Quelle mit $f(\Theta) = \sin \Theta$ angenommen.

Man beachte, dass $P_k(\mu(\Theta))$ für $k > 1$ nur näherungsweise die richtigen Streuwahrscheinlichkeiten angibt, da in Gleichung (4.8) keine winkeländernden Stöße berücksichtigt werden. Tritt bspw. ein einzelnes Elektron mit Winkel Θ in die Quelle ein, so besitzt es $P'_1(\mu(\Theta))$ und $P'_2(\mu(\Theta))$ als einfache bzw. zweifache Streuwahrscheinlichkeit. Führt es nun allerdings einen winkeländernden Stoß mit $\Theta \rightarrow \Theta'$ durch, so hat $P'_2(\mu(\Theta))$ offenbar keine Anwendung gefunden. Die Näherung ist dennoch gut erfüllt, da wie bereits erwähnt in den Stößen nur sehr kleine Winkeländerungen stattfinden.

4.5 Rotation und Vibration zweiatomiger Moleküle

Wie bereits in Abschnitt 4.1 erwähnt, enthält unser Modell der Energieverlustfunktion Rotations- und Schwingungsanregungen des Wasserstoffmoleküls. Quantenmechanisch

wird das Problem des zweiatomigen Moleküls durch die Schrödinger-Gleichung

$$\left[-\left(\frac{\hbar^2}{2M_A} \Delta_A(\mathbf{R}_A) + \frac{\hbar^2}{2M_B} \Delta_B(\mathbf{R}_B) \right) - \frac{\hbar^2}{2m_e} (\Delta_{e,1}(\mathbf{r}_{e,1}) + \Delta_{e,2}(\mathbf{r}_{e,2})) + E_{\text{pot}}(\mathbf{r}_i, \mathbf{R}_j) \right] \psi(\mathbf{r}_i, \mathbf{R}_j) = E\psi(\mathbf{r}_i, \mathbf{R}_j) \quad (4.11)$$

formuliert. Die ersten beiden Terme des Hamilton-Operators stehen dabei für die kinetische Energie der Kerne A und B. Außerdem wurde in den beiden darauffolgenden Summanden die kinetische Energie zweier Elektronen berücksichtigt, was dem Fall des Tritiummoleküls entspricht. Der letzte Term $E_{\text{pot}}(\mathbf{r}_i, \mathbf{R}_j)$ fasst die potentielle Energie aller beteiligten Teilchen zusammen. Im Gegensatz zur Schrödinger-Gleichung des Wasserstoffatoms ist Gleichung (4.11) nicht mehr analytisch lösbar. Um diesem Umstand entgegenzuwirken, wird die Born-Oppenheimer-Näherung verwendet. Die Idee dieser Näherung ist, dass sich die Kerne aufgrund ihrer viel größeren Masse gegenüber den Elektronen viel langsamer bewegen. Die Elektronenhülle kann sich dadurch praktisch instantan an den aktuellen Kernabstand R anpassen. Die Elektronenergie hängt damit parametrisch von R , nicht jedoch von der Geschwindigkeit der Kernbewegung ab. Durch diese Näherung lässt sich die Wellenfunktion $\psi_k(\mathbf{r}_i, \mathbf{R}_j)$ für einen elektronischen Zustand mit den Quantenzahlen $k = (m, L, \Lambda)$ als ein Produkt

$$\psi_k(\mathbf{r}_i, \mathbf{R}_j) = \chi_k(\mathbf{R}_j) \psi_k^0(\mathbf{r}_i, \mathbf{R}_j) \quad (4.12)$$

aus der Wellenfunktion $\chi_k(\mathbf{R}_j)$ der Kernbewegung und der elektronischen Wellenfunktion $\psi_k^0(\mathbf{r}_i, \mathbf{R}_j)$ schreiben. Setzt man diesen Ausdruck in die Schrödinger-Gleichung (4.11) ein, erhält man neben einer Gleichung für die elektronische Wellenfunktion die Gleichung

$$\left[-\left(\frac{\hbar^2}{2M_A} \Delta_A(\mathbf{R}_A) + \frac{\hbar^2}{2M_B} \Delta_B(\mathbf{R}_B) \right) + E_{\text{pot}}(\mathbf{R}_j, k) \right] \chi_k(\mathbf{R}_j) = E\chi_k(\mathbf{R}_j) \quad (4.13)$$

für die Kernbewegung. Das Potential

$$E_{\text{pot}}(\mathbf{R}_j, k) = E_{\text{pot}}(R, k) = \langle E_{\text{kin}}^e \rangle + \langle E_{\text{pot}}(\mathbf{r}_i, \mathbf{R}_j) \rangle \quad (4.14)$$

setzt sich aus der mittleren kinetischen Energie der Elektronen und der mittleren potentiellen Energie von Kernen und Elektronen zusammen. Erstere lässt sich dabei aus der Gleichung für die elektronische Wellenfunktion berechnen. Die Born-Oppenheimer-Näherung bedeutet für die Bewegungsgleichung der Kerne also, dass die Elektronen lediglich durch einen zusätzlichen bindenden Term im Potential der Kerne beitragen. Beim Übergang zu Schwerpunktskoordinaten und Einführen der reduzierten Masse $M = M_A \cdot M_B / (M_A + M_B)$ wird aus (4.13) die Gleichung

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2M} \Delta + E_{\text{pot}}(R, k) \right] \chi_k(\mathbf{R}_j) = E\chi_k(\mathbf{R}_j). \quad (4.15)$$

in formaler Analogie zur Schrödinger-Gleichung des Wasserstoffatoms. Sie lässt sich daher ebenfalls mit einem Separationsansatz

$$\chi(R, \theta, \phi) = S(R) \cdot Y(\theta, \phi) \quad (4.16)$$

lösen. Setzt man diesen in Gleichung (4.15) ein, erhält man für den Radialteil

$$\frac{1}{R^2} \frac{d}{dR} \left(R^2 \cdot \frac{dS}{dR} \right) + \frac{2M}{\hbar^2} \left[E - E_{\text{pot}}(R) - \frac{J(J+1)\hbar^2}{2MR^2} \right] S = 0 \quad (4.17)$$

mit J als Drehimpulsquantenzahl, die aus den Eigenwerten des Betragsquadrates des Drehimpulsoperators \mathbf{J}^2 stammt.

4.5.1 Der starre und nicht-starre Rotator

Die Energieniveaus eines starren Rotators lassen sich nun unmittelbar aus Gleichung (4.17) ableiten, indem man für R einen festen Gleichgewichtsabstand R_e einsetzt. Dadurch verschwindet der erste Term und der Ausdruck in eckigen Klammern muss ebenfalls Null ergeben. Da bei einem starren Rotator mit der Gesamtenergie E für die kinetische Energie $E_{\text{kin}} = E - E_{\text{pot}} = E_{\text{rot}}$ gilt, ergibt sich damit:

$$E_{\text{rot}} = \frac{J(J+1)\hbar^2}{2MR_e^2}. \quad (4.18)$$

In der Spektroskopie werden hier häufig die Termwerte $F(J) = E(J)/hc$ in der Einheit cm^{-1} angegeben. Diese schreiben sich dann zu

$$F_{\text{rot}} = \frac{J(J+1)\hbar^2}{2hcMR_e^2} = B_e J(J+1) \quad (4.19)$$

mit der Rotationskonstanten

$$B_e = \frac{\hbar}{4\pi cMR_e^2}, \quad [B_e] = \text{cm}^{-1}. \quad (4.20)$$

Möchte man nun auf den nicht-starren Rotator verallgemeinern, kann man den Ansatz machen, dass die Zentripetalkraft $\mathbf{F}_z = -M\omega^2 \cdot \mathbf{R}$ gleich der rücktreibenden Kraft $\mathbf{F}_r = -(\partial E/\partial R)\hat{\mathbf{R}}$ ist. Die rücktreibende Kraft kann dabei in der Nähe des Gleichgewichtsabstandes R_e in guter Näherung als proportional zur Auslenkung angesehen werden:

$$\mathbf{F}_r = -k \cdot (R - R_e) \cdot \hat{\mathbf{R}}. \quad (4.21)$$

Aus der Relation $\mathbf{J}^2 = I^2\omega^2 = M^2R^4\omega^2$ folgt dann

$$M\omega^2 R = \frac{J(J+1)\hbar^2}{MR^3} \stackrel{!}{=} k \cdot (R - R_e) \quad (4.22)$$

$$\Rightarrow R - R_e = \frac{J(J+1)\hbar^2}{M \cdot k \cdot R^3}. \quad (4.23)$$

Durch die Rotation wird der Kernabstand also aufgeweitet. Mit dem der Kraft aus Gleichung (4.21) zugehörigen Potential ergibt sich die Energie des nicht-starren Rotators zu

$$E_{\text{rot}} = \frac{J(J+1)\hbar^2}{2MR_e^2} + \frac{1}{2}k(R - R_e)^2. \quad (4.24)$$

Ersetzt man hier nun R mittels Gleichung (4.23) durch R_e und entwickelt nach kleinen Auslenkungen [Dem09] liefert dies

$$E_{\text{rot}} = \frac{J(J+1)\hbar^2}{2MR_e^2} - \frac{J^2(J+1)^2\hbar^4}{2M^2kR_e^6} \pm \dots \quad (4.25)$$

bzw. als Termwert

$$F_{\text{rot}} = B_e J(J+1) - D_e J^2(J+1)^2 \pm \dots \quad \text{mit} \quad D_e = \frac{\hbar^3}{4\pi ckM^2R_e^6}. \quad (4.26)$$

Die Abstände zwischen den einzelnen Energieniveaus werden durch die Berücksichtigung der Zentrifugalaufweitung also vor allem für größere J etwas nach unten korrigiert.

4.5.2 Schwingung zweiatomiger Moleküle

Für ein nichtrotierendes Molekül mit $J = 0$ hängen die Lösungen für $S(R)$ in Gleichung (4.17) nur noch von der Form des Potentials $E_{\text{pot}}(R)$ ab. Für ein Parabelpotential ergeben sich hier die bekannten Energien des harmonischen Oszillators

$$E(\nu) = \left(\nu + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega, \quad \omega = \sqrt{\frac{k}{M}} \quad (4.27)$$

mit der Schwingungsquantenzahl ν und k als Konstante des Potentials. Für $R \approx R_e$ ist dies eine gute Näherung. Für größere Auslenkungen ist dieser Ansatz allerdings unpassend, weil z.B. das reale Potential hier gegen die Dissoziierungsenergie E_D konvergieren muss, während das Parabelpotential gegen $E = \infty$ strebt. Es wird deshalb häufig das Morse-Potential

$$E_{\text{pot}}(R) = E_D \cdot \left[1 - e^{-a(R-R_e)}\right]^2 \quad (4.28)$$

verwendet, welches für $R \rightarrow \infty$ gegen $E = E_D$ konvergiert und eine bessere Beschreibung des tatsächlichen Potentials ermöglicht. Es weicht allerdings für kleine R von diesem ab, da es bei bspw. $R = 0$ einen endlichen Wert $E < E_D$ annimmt, während das reale Potential gegen ∞ geht (vgl. Abb. 4.5). Das Morse-Potential wird gern verwendet, da es exakte Lösungen besitzt, im Gegensatz zu einem allgemeinen Potenzreihenansatz mit dem (4.17) nur noch numerisch lösbar ist. Die Energieniveaus im Morse-Potential lauten:

$$E(\nu) = \left(\nu + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega - \frac{\hbar^2\omega^2}{4E_D} \left(\nu + \frac{1}{2}\right)^2. \quad (4.29)$$

Die Niveaus sind damit im Vergleich zum harmonischen Oszillator nicht mehr äquidistant.

4.5.3 Rotations-Schwingungs-Wechselwirkung

Nachdem in den vorangegangenen Abschnitten Rotation und Schwingung getrennt behandelt wurden, soll nun der allgemeine Fall eines zweiatomigen Moleküls, das sowohl schwingt als auch rotiert, betrachtet werden. Da die Schwingungsfrequenz in der Regel deutlich größer ist als die Rotationsfrequenz, werden während einer Rotationsperiode

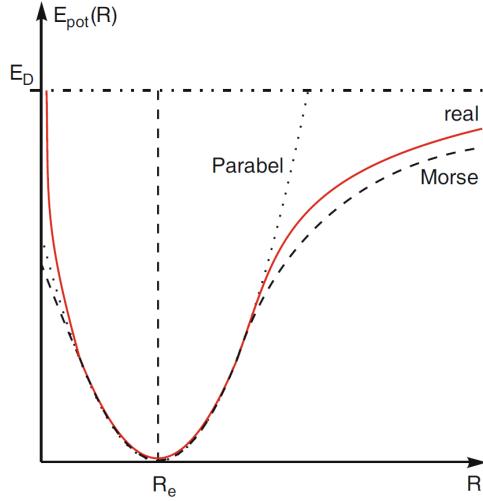


Abbildung 4.5: Schematischer Vergleich zwischen Parabel-, Morse- und realem Potential des Na_2 -Moleküls. Quelle: [Dem09].

mehrere Schwingungsperioden durchlaufen, in denen sich der Abstand R ständig ändert. Dies hat zur Folge, dass sich wegen der Drehimpulserhaltung und $|\mathbf{J}| = I\omega = MR^2\omega$ auch die Rotationsfrequenz ω periodisch ändert. Es muss daher in der Gleichung der Rotationsenergie (4.18) der quantenmechanische Mittelwert von $1/R^2$ berücksichtigt werden, um eine mittlere Rotationsenergie

$$\langle E_{\text{rot}} \rangle = \frac{J(J+1)\hbar^2}{2M} \int \psi_{\text{vib}}^* \frac{1}{R^2} \psi_{\text{vib}} dR \quad (4.30)$$

zu erhalten. Möchte man dies wieder als Termwert schreiben, erhält man nun die von der Schwingungsquantenzahl ν abhängige Rotationskonstante

$$B_\nu = \frac{\hbar}{4\pi c M} \int_0^\infty \psi_{\text{vib}}^*(\nu, R) \frac{1}{R^2} \psi_{\text{vib}}(\nu, R) dR. \quad (4.31)$$

Für das Morse-Potential gelten dann die Beziehungen

$$B_\nu = B_e - \alpha_e \left(\nu + \frac{1}{2} \right) \quad \text{mit} \quad \alpha_e \ll B_e, \quad (4.32)$$

$$D_\nu = D_e - \beta_e \left(\nu + \frac{1}{2} \right) \quad \text{mit} \quad \beta_e \ll D_e. \quad (4.33)$$

Führt man nun, ausgehend von der Energie der rotationslosen Schwingungen aus Gleichung (4.29), den Termwert

$$G(\nu) = \omega_e \left(\nu + \frac{1}{2} \right) - \omega_e x_e \left(\nu + \frac{1}{2} \right)^2 \quad (4.34)$$

ein, ergibt sich der mit der Gesamtenergie zusammenhängende Termwert $T = E/hc$ im elektronischen Zustand E_i zu

$$\begin{aligned} T(\nu) &= T(E_i) + G(\nu) + F(J, \nu) \\ &= T(E_i) + \omega_e \left(\nu + \frac{1}{2} \right) - \omega_e x_e \left(\nu + \frac{1}{2} \right)^2 + B_\nu J(J+1) - D_\nu J^2(J+1)^2 \end{aligned} \quad (4.35)$$

im Morse-Potential. Die Schwingungs-Rotations-Niveaus sind damit näherungsweise durch einen Satz von Konstanten ausgedrückt.

4.5.4 Rotations-Schwingungs-Übergänge und ihre Bedeutung für das Modell

Zur Veranschaulichung sind die Rotations- und Schwingungsniveaus schematisch in Abbildung 4.6 dargestellt. Hier ist zu erkennen, dass sich jeder elektronische Zustand in

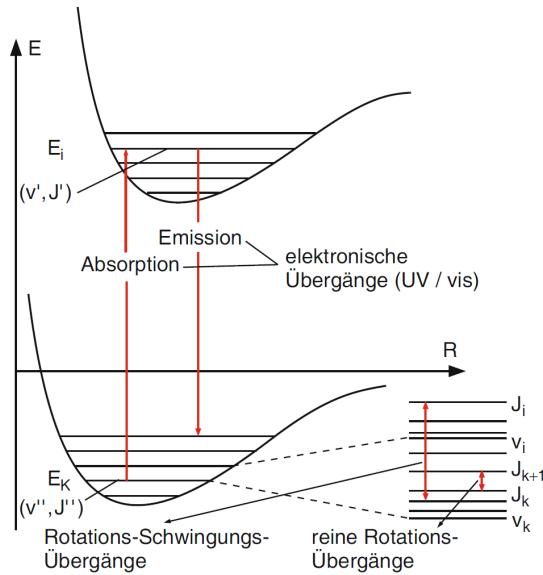


Abbildung 4.6: Schematische Darstellung der Rotations- und Vibrationsstruktur elektronischer Zustände und einiger Übergänge. Quelle: [Dem09].

verschiedene Schwingungsniveaus unterteilt, die wiederum eine Rotationsstruktur besitzen. Zwischen den verschiedenen Zuständen existieren nun Übergänge verschiedener Art¹. So sind bspw. Rotations- und Schwingungsübergänge mit oder ohne Änderung des elektronischen Zustands möglich.

Unser Modell beinhaltet die Vibrationsstruktur des H₂-Moleküls für die B($2p\sigma^1\Sigma_u^+$) und C($2p\pi^1\Pi_u$) Molekülorbitale. Das B-Orbital verteilt sich dabei auf Zustände mit den Schwingungsquantenzahlen $\nu = (0, 1, \dots, 27)$ und das C-Orbital auf Zustände mit $\nu = (0, 1, \dots, 13)$. In unserem Modell der Energieverlustfunktion aus Abbildung 4.1 hat dies eine detailliertere Struktur im Bereich der elektronischen Anregungen zur Folge,

¹Diese gehorchen bestimmten Auswahlregeln.

da zusätzliche Übergänge aus dem Grundzustand des H₂-Moleküls ($1s\sigma^1\Sigma_g^+$) möglich sind. Die Rotationsstruktur ist in diesem Modell nicht enthalten. Die einzelnen Vibrationsniveaus sind damit Mittelungen über die zugehörigen Rotationsniveaus. Die in der Simulation verwendete Schrittweite von 0.1 eV, die der Größenordnung der Vibrationsaufspaltung entspricht, macht die Berücksichtigung der Rotation, die eine um ein bis zwei Größenordnungen kleinere Aufspaltung verursacht, weitgehend uninteressant. Die ebenfalls möglichen reinen Schwingungsübergänge im elektronischen Grundzustand des T₂, welche zu kleinen Energieverlusten führen, die vergleichbar sind mit denen aus der elastischen Streuung, werden ebenfalls nicht berücksichtigt: Der Wirkungsquerschnitt für derartige Prozesse ist bei 18.6 keV-Elektronen 10-100 mal kleiner als der für elastische Streuung [Glu03].

Zuletzt sei angemerkt, dass die Verwendung von Daten zur $e\text{-H}_2$ Streuung zu einer etwas größeren Aufspaltung der Schwingungszustände in unserem Modell führt, als dies tatsächlich bei dem T₂ in der Quelle der Fall sein wird. Bei dreifacher Masse würde man nach Gleichung (4.27) in harmonischer Näherung Abstände erwarten, die etwa $1/\sqrt{3} \approx 0.58$ mal so groß sind.

Eine ausführliche Behandlung von Rotations- und Schwingungszuständen von Molekülen findet man z.B. in [Hak97].

5 Entfaltung der Energieverlustfunktion

In diesem Kapitel wird das aktuelle Standardverfahren zur Entfaltung der Energieverlustfunktion erklärt. Nach einer ausführlichen Beschreibung aller benötigten Schritte werden gegen Ende des Kapitels erste Untersuchungen zum Auffinden eines optimalen Entfaltungsergebnisses vorgestellt. Alternative Verfahren zur Entfaltung sind in Kapitel 6 beschrieben.

5.1 Standardverfahren zur Entfaltung

Das Standardverfahren, die Singulärwertzerlegung, liefert aktuell die kleinste systematische Unsicherheit der quadratischen Neutrinomasse. Um dieses Verfahren anwenden zu können, müssen zunächst die Transmissionsfunktion T und die Streufunktion ϵ_1 aus simulierten Daten und einer anschließenden Matrixinversion gewonnen werden. Aus diesem Grund wird zunächst die Simulation und Matrixinversion erklärt, bevor die Singulärwertzerlegung beschrieben wird. Zuletzt soll erläutert werden, wie sich der Beitrag zur systematischen Unsicherheit der Neutrinomasse errechnet.

5.1.1 Simulation der Messdaten

Zur Erzeugung von simulierten Antwortfunktionen bei verschiedenen Säulendichten wird eine einfache Monte-Carlo-Simulation verwendet, die Elektronen mit den Starteigenschaften Energie E und Winkel Θ verschiedene Stationen durchlaufen lässt. Diese Stationen sind: Start an der Elektronenkanone, Eintritt in die WGTS, Wechselwirkungen in der WGTS, Eintritt ins Hauptspektrometer und Passieren der Analysierebene. Dieses Verfahren wird für eine bestimmte Anzahl von Elektronen für verschiedene Retardierungsspannungen angewandt. Diese Retardierungsspannungen werden standardmäßig mit einer Schrittweite von 0.1 eV von -5 eV bis 50 eV durchgefahren.

Start an der Elektronenkanone

Da die Elektronen in der Elektronenkanone durch Photoeffekt erzeugt werden und die Anzahl der herausgelösten Elektronen zeitlich nicht konstant ist, kann die Produktionsrate nur im zeitlichen Mittel angegeben werden. Für ein gewisses Zeitintervall ist die Anzahl erzeugter Elektronen deswegen poissonverteilt bzw. für entsprechend viele Elektronen näherungsweise gaußverteilt sein. Daher wird der Simulation ein Mittelwert \bar{n} von gestarteten Elektronen übergeben, um anschließend eine Zufallszahl n von Elektronen innerhalb einer Gaußverteilung mit Mittelwert \bar{n} und Standardabweichung $\sigma = \sqrt{\bar{n}}$ zu generieren. Trotz gleicher Messzeit $t \propto \bar{n}$ ist damit die tatsächliche Anzahl gestarter Elektronen für verschiedene Spannungen etwas unterschiedlich. Typischerweise wird

$\bar{n} = 20$ Mio. für alle Spannungsschritte verwendet¹, da dies mit einer vorrausichtlichen Elektronenrate der e-gun von $\sim 1 \cdot 10^5 \frac{1}{\text{s}}$ innerhalb der 4 Wochen Messzeit, die für diese Messungen bei KATRIN eingeplant ist, gut zu erreichen ist.

Jedes Elektron startet mit einer gewissen Energie. Diese wird ebenfalls zufällig mit einer Gaußverteilung mit Mittelwert $\mu = 18.6 \text{ keV}$ und Standardabweichung $\sigma = 0.2 \text{ eV}$, definiert durch das Spektrum der e-gun, bestimmt.

Alle Zufallszahlen der Simulation werden mit dem Zufallszahlengenerator *TRandom3* aus dem C++ framework *ROOT* erzeugt.

Eintritt in die WGTS

Der Simulation wird ein maximaler Startwinkel $\Theta_{\text{egun, max}}$ übergeben, wobei als Standardparameter $\Theta_{\text{egun, max}} = 1^\circ$ dient. Dadurch, dass das magnetische Feld in der WGTS größer ist als an der e-gun, wird dieser Winkel adiabatisch transformiert zu:

$$\Theta_{S,\max} = \arcsin \left(\sin(\Theta_{\text{egun, max}}) \cdot \sqrt{\frac{B_S}{B_{\text{egun}}}} \right) \approx 10.1^\circ \quad (5.1)$$

mit $\Theta_{S,\max}$ als maximalem Winkel in der Quelle. Nun wird für jedes Elektron zufällig ein Winkel aus einer isotropen Verteilung zwischen 0 und $\Theta_{S,\max}$ erzeugt.

Wechselwirkungen in der WGTS

Nach dem Eintritt in die WGTS können die Elektronen elastisch oder inelastisch an Tritiummolekülen stoßen. Die Häufigkeit dieser Wechselwirkungen ist charakterisiert durch die in Gleichung (3.5) bereits eingeführte mittlere freie Säulendichte

$$(\rho d)_{\text{frei}} = \frac{1}{\sigma_{\text{tot}}(E)}. \quad (5.2)$$

Da Elektronen mit größeren Winkeln einen längeren Weg in der Quelle zurücklegen, ist ihre effektive mittlere freie Säulendichte

$$(\rho d)_{\text{eff}} = (\rho d)_{\text{frei}} \cdot \cos \Theta \quad (5.3)$$

entsprechend kleiner. Diese Größe stellt eine Projektion von $(\rho d)_{\text{frei}}$ auf die Längsachse der Quelle dar. Die zurückgelegte Säulendichte bis zur ersten Wechselwirkung wird nun zufällig nach der Exponentialverteilung

$$\text{Exp} \left(\frac{1}{(\rho d)_{\text{eff}}} \right) = \frac{1}{(\rho d)_{\text{eff}}} e^{-\frac{1}{(\rho d)_{\text{eff}}} x} \quad \text{für } x \geq 0 \quad (5.4)$$

bestimmt. Diese Verteilung besitzt den Erwartungswert $(\rho d)_{\text{eff}}$. Ist die zurückgelegte Säulendichte $(\rho d)^*$ größer als die Säulendichte ρd der Quelle, so findet keine Wechselwirkung statt. Ist sie kleiner, so kommt es zur Streuung. In diesem Fall werden mit Hilfe

¹Natürlich ist eine derartige Gleichverteilung im Allgemeinen nicht die beste Wahl, um Messdaten zu erzeugen, die eine möglichst kleine systematische Unsicherheit zur Observablen $m^2(\nu_e)$ liefern. In Kapitel 7 findet man Untersuchungen zur Messzeit.

des Programms *scatter.c* [Glu] ein Energieverlust und eine Winkeländerung für das Elektron bestimmt. Mit der neuen Energie und dem neuen Winkel wird dann abermals nach der Verteilung (5.4) ein neuer Wechselwirkungspunkt erzeugt. Dieser Vorgang wird so lange wiederholt bis die gesamte zurückgelegte Säulendichte $\sum(\rho d)_i^* > \rho d$ ist oder die maximale Anzahl von Wechselwirkungen erreicht ist. Diese Maximalanzahl wurde für unsere Zwecke auf 20 festgelegt. Beim Erreichen dieser Anzahl gilt das Elektron als in der Quelle verloren. Dieser Fall ist aufgrund seiner geringen Wahrscheinlichkeit jedoch von keinerlei praktischer Bedeutung.

Eintritt ins Hauptspektrometer

Auf dem Weg zum Detektor müssen die Elektronen den *Pinch*-Magneten mit dem maximalen Magnetfeld B_{\max} passieren. Aufgrund der magnetischen Reflektion werden nach Gleichung (3.16) alle Elektronen mit $\Theta > \Theta_{\max}$ nicht weiter berücksichtigt.

Passieren der Analysierebene

Zuletzt erreichen die Elektronen die Analysierebene und die Transmissionsbedingung (3.14) wird überprüft. Alle Elektronen mit zu kleiner longitudinaler Energie werden nicht transmittiert.

Die Simulation liefert, neben einer künstlichen Messung der Antwortfunktion, die für die Entfaltung wichtigen Streuwahrscheinlichkeiten P_i . Außerdem wird ein für die Analyse der systematischen Unsicherheiten, die durch die Entfaltung der Energieverlustfunktion induziert werden, notwendiges Modell der Energieverlustfunktion extrahiert. Für zusätzliche Analysen können außerdem die Streufunktionen ausgegeben werden.

5.1.2 Matrixinversion

Um die Energieverlustfunktion zu gewinnen, werden zunächst verschiedene Messungen $\alpha, \beta, \gamma \dots$ der Antwortfunktion mit unterschiedlichen Säulendichten ρd durchgeführt, wovon eine Messung mit $\rho d = 0$ erfolgt. Nach Gleichung (4.7) lassen sich die verschiedenen Antwortfunktionen dann in ein Gleichungssystem

$$\begin{aligned} f_{\text{res}}^{\alpha}(E, qU) - P_0^{\alpha} \cdot \epsilon_0(\Delta E) &= P_1^{\alpha} \cdot \epsilon_1(\Delta E) + P_2^{\alpha} \cdot \epsilon_2(\Delta E) + \dots \\ f_{\text{res}}^{\beta}(E, qU) - P_0^{\beta} \cdot \epsilon_0(\Delta E) &= P_1^{\beta} \cdot \epsilon_1(\Delta E) + P_2^{\beta} \cdot \epsilon_2(\Delta E) + \dots \\ f_{\text{res}}^{\gamma}(E, qU) - P_0^{\gamma} \cdot \epsilon_0(\Delta E) &= P_1^{\gamma} \cdot \epsilon_1(\Delta E) + P_2^{\gamma} \cdot \epsilon_2(\Delta E) + \dots \end{aligned} \quad (5.5)$$

schreiben. Hier sind auf der linken Seite die Antwortfunktionen und die Transmissionsfunktion $T(E, qU) = \epsilon_0(\Delta E)$ durch Messung bei einer Säulendichte von Null bekannt. Des Weiteren erhält man die Streuwahrscheinlichkeiten P_i^x durch Simulationen oder berechnet sie näherungsweise. Durch Inversion der Matrix \mathbf{A} , die aus den Streuwahrscheinlichkeiten besteht, lassen sich nun die Streufunktionen ϵ_i berechnen. Da vierfache Streuung aufgrund ihres kleinen Beitrages vernachlässigbar ist, handelt es sich bei \mathbf{A} um eine 3×3 Matrix.

Grundsätzlich sind nur Matrizen mit $\det \mathbf{A} \neq 0$ invertierbar. Numerisch können allerdings auch sehr kleine Eigenwerte der Matrix \mathbf{A} und damit sehr kleine Determinanten

zu Problemen führen. Es sollte deswegen ein Satz von Säulendichten gewählt werden, der die Determinante maximiert. Eine Säulendichte von $6 \cdot 10^{17} \text{ cm}^{-2}$ sollte aus technischer Sicht maximal erreichbar sein. Zudem wird angenommen, dass sie nach unten als beliebig klein eingestellt werden kann. Es wurde deshalb die Determinante für jede 3er-Kombination der Säulendichten $\rho d = j \cdot 10^{17} \text{ cm}^{-2}$ mit $j = (0.5, 1, 2, 3, 4, 5, 6)$ ausgerechnet. Hier lieferte die Kombination mit $j = (0.5, 3, 6)$ den besten Wert. Offenbar bevorzugt die Problemstellung maximale und (annähernd) gleichgroße Abstände der Säulendichten.

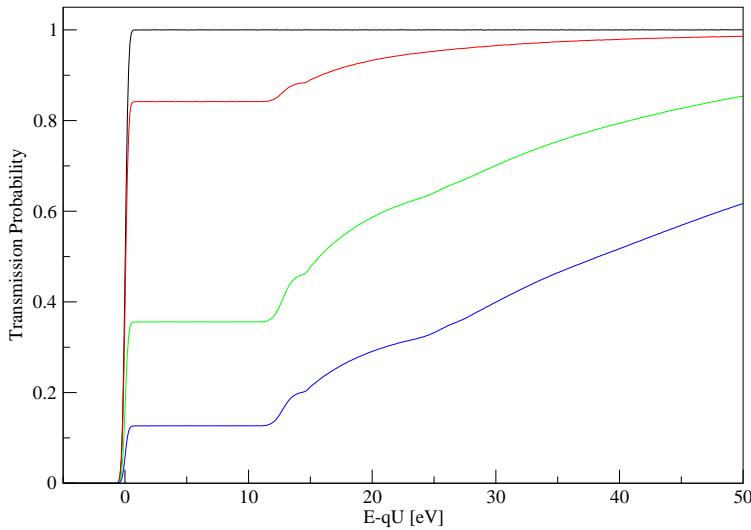


Abbildung 5.1: Die vier für die Matrixinversion verwendeten Antwortfunktionen mit den Säulendichten 0 (schwarz), $0.5 \cdot 10^{17} \text{ cm}^{-2}$ (rot), $3 \cdot 10^{17} \text{ cm}^{-2}$ (grün), $6 \cdot 10^{17} \text{ cm}^{-2}$ (blau).

Abbildung 5.2 zeigt die durch Matrixinversion berechneten Streufunktionen und vergleicht sie mit denen, die durch die Simulation ausgegeben wurden. Alle berechneten Funktionen besitzen dabei ein zusätzliches numerisches Rauschen, beschreiben den Verlauf im Mittel allerdings gut. Für die Streufunktionen ϵ_2 und ϵ_3 ergeben sich darüber hinaus systematische Abweichungen ab ca. 40 bzw. 30 eV. Dies ist nicht weiter störend, da für die Entfaltung im nächsten Abschnitt 5.1.3 nur ϵ_1 weiterverwendet wird. Das Rauschen besitzt je nach Streufunktion eine Amplitude in der Größenordnung von 10^{-3} bis 10^{-2} .

5.1.3 Entfaltung mittels Singulärwertzerlegung

Nun da die Streufunktionen ϵ_i aus der Matrixinversion bekannt sind, lässt sich aus der Definitionsgleichung von ϵ_1 (vgl. (4.6))

$$\epsilon_1(\Delta E) = T(E, qU) \otimes \frac{d\sigma}{d\Delta E} \quad (5.6)$$

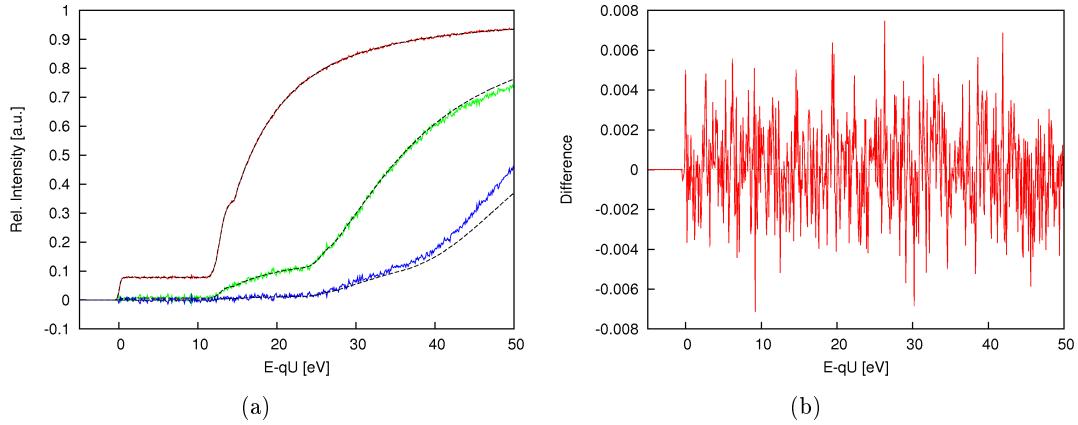


Abbildung 5.2: Abbildung (a) zeigt den Verlauf der durch Matrixinversion berechneten Streufunktionen ϵ_1 (rot), ϵ_2 (grün) und ϵ_3 (blau) im Vergleich zu den entsprechenden Streufunktionen aus der Simulation (schwarz). Abbildung (b) zeigt die Differenz zwischen simuliertem und berechnetem ϵ_1 .

die Energieverlustfunktion entfalten. T und ϵ_1 sind aufgrund der bei der Messung diskret angelegten Retardierungsspannungen allerdings auch nur an diskreten Punkten bekannt. Die eigentliche Definition der Faltung

$$f(x) \otimes g(x) := \int_{-\infty}^{\infty} f(x - \xi)g(\xi)d\xi \quad (5.7)$$

mit den kontinuierlichen Funktionen ($f, g : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$) geht dann über zu einer diskreten Faltung

$$h_k = (f \otimes g)_k = \sum_{l=0}^{N-1} f_{k-l} \cdot g_l \quad (5.8)$$

mit h_k als k -tem Eintrag des Faltungsproduktes h . Die Anzahl der Datenpunkte N muss dabei in den Funktionen f und g gleich sein. Ist dies nicht der Fall, so wird eine Funktion mit Nullen aufgefüllt. Dadurch, dass die Funktionen im diskreten Fall nur eine Folge von Zahlen darstellen, können diese auch als Vektoren $\mathbf{b} = (h_0, h_1, \dots, h_{N-1})$ und $\mathbf{x} = (g_0, g_1, \dots, g_{N-1})$ aufgefasst werden. Nach Gleichung (5.8) entsprechen die f_{k-l} dann den Komponenten einer Matrix \mathbf{A} . Die diskrete Faltung ist damit als lineares Gleichungssystem

$$\mathbf{b} = \mathbf{A} \cdot \mathbf{x} \quad (5.9)$$

mit $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ und $\mathbf{b}, \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$ formuliert. Auf unser Problem bezogen finden die Entsprechungen

$$\mathbf{b} \doteq \epsilon_1(\Delta E), \quad \mathbf{A} \doteq T(E, qU), \quad \mathbf{x} \doteq \frac{d\sigma}{d\Delta E} \quad (5.10)$$

Anwendung. Die Gleichung (5.9) kann nun abermals durch Matrixinversion gelöst werden, allerdings führt dies zu numerischen Problemen und liefert nur unter bestimmten

Voraussetzungen sinnvolle Ergebnisse. Es werden daher spezielle Lösungsverfahren für Gleichungssysteme mit dünnbesetzten Matrizen benötigt, d.h. für Matrizen mit vielen Einträgen die gleich oder sehr nahe an Null sind. In [Wol08] wurde die Singulärwertzerlegung (engl. *singular value decomposition*, SVD) mit der stufenweisen Entfaltung und dem BiCG-Algorithmus verglichen und als passendstes Lösungsverfahren herausgestellt. Das Berechnen der Inversen ist problematisch, weil $\det \mathbf{A} \approx 0$ gilt. Aus diesem Grund wird in der SVD eine pseudoinverse Matrix \mathbf{A}^{-1} bestimmt. Diese Pseudoinverse kann auch für singuläre Matrizen, also für Matrizen, die wegen $\det \mathbf{A} = 0$ keine inverse Matrix besitzen, berechnet werden. Dazu wird die Matrix $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{m \times n}$ zunächst in ein Produkt

$$\mathbf{A} = \mathbf{U} \cdot \boldsymbol{\Sigma} \cdot \mathbf{V}^* \quad (5.11)$$

mit den unitären Matrizen $\mathbf{U} \in \mathbb{C}^{m \times m}$ und $\mathbf{V} \in \mathbb{C}^{n \times n}$ sowie der Diagonalmatrix $\boldsymbol{\Sigma} \in \mathbb{R}^{m \times n}$, die die Quadratwurzeln der Eigenwerte von $\mathbf{A}^* \mathbf{A}$ enthält, zerlegt. Diese Singulärwerte σ_i sind das Analogon zu den Eigenwerten einer regulären Matrix. Für unseren Fall sind nur symmetrische Matrizen mit $m = n$ und reellen Einträgen interessant. Im reellen Fall entspricht die Adjungierte ihrer Transponierten:

$$\mathbf{A} = \mathbf{U} \cdot \boldsymbol{\Sigma} \cdot \mathbf{V}^T \quad \text{mit} \quad \boldsymbol{\Sigma} = \text{diag}(\sigma_i). \quad (5.12)$$

Nach dieser Zerlegung kann die Pseudoinverse nach

$$\mathbf{A}^{-1} = \mathbf{V} \cdot \boldsymbol{\Sigma}^{-1} \cdot \mathbf{U}^T \quad \text{mit} \quad \boldsymbol{\Sigma}^{-1} = \text{diag}\left(\frac{1}{\sigma_i}\right) \quad (5.13)$$

berechnet werden. Die Matrix $\boldsymbol{\Sigma}^{-1}$ enthält dabei also die reziproken Singulärwerte. Die Pseudoinverse geht für reguläre Matrizen in die Inverse über. Da eine singuläre Matrix mindestens einen Singulärwert mit $\sigma_i = 0$ besitzt, werden bei der Bildung der Pseudoinversen in (5.13) für alle Singulärwerte, die gleich oder nahe bei Null sind, auch die zugehörigen reziproken Werte $1/\sigma_i = 0$ gesetzt.

Man beachte, dass das Gleichungssystem (5.9) mit singulärer Matrix \mathbf{A} im Gegensatz zu einem mit regulärer Matrix, das immer eine eindeutige Lösung hat, keine Lösung besitzen muss. Selbst wenn eine Lösung existiert, ist diese aufgrund des nicht maximalen Rangs und $\ker(\mathbf{A}) > 0$ in jedem Fall nicht eindeutig, da jede Linearkombination von einer Lösung \mathbf{x} mit Vektoren aus dem Unterraum, der von \mathbf{A} auf Null abgebildet wird, wieder Lösung des Gleichungssystems ist. Im Falle der Lösbarkeit liefert die Singulärwertzerlegung den Lösungsvektor mit der kleinsten Norm $\|\mathbf{x}\|^2$. Existiert keine Lösung, so löst sie das sogenannte Problem der kleinsten Fehlerquadrate, d.h. es wird eine Näherungslösung \mathbf{x} ausgegeben, die die Summe der Quadrate

$$\|\mathbf{b} - \mathbf{Ax}\|^2 \quad (5.14)$$

minimiert.

In der numerischen Anwendung werden die Singulärwerte im Allgemeinen nicht exakt gleich Null sein, sondern nur sehr klein. Es wird deshalb ein Grenzwert σ_{th} definiert, unter dem alle Singulärwerte mit $\sigma_i < \sigma_{\text{th}}$ gleich Null gesetzt werden. Das Ergebnis der Entfaltung wird natürlich empfindlich von der Wahl für σ_{th} abhängen. Bei Bedarf kann unser Programm *svd_deconvolution* deswegen verschiedene Grenzwerte mit bestimmter

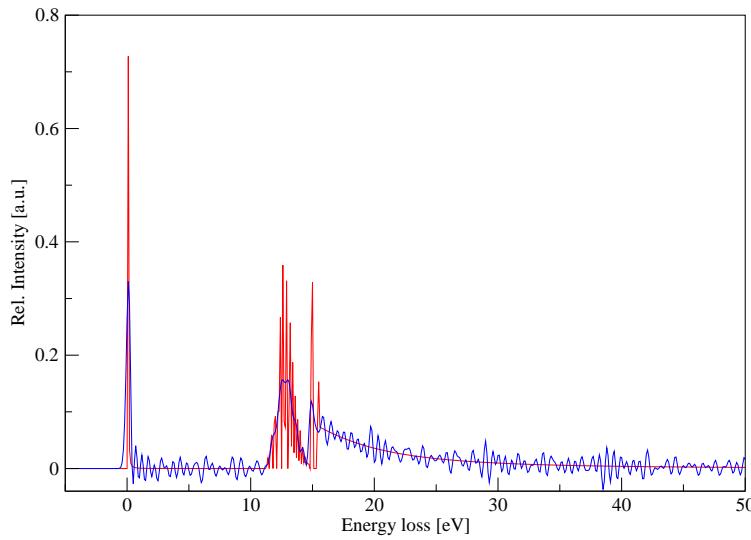


Abbildung 5.3: Beispiel einer entfalteten Energieverlustfunktion (blau) für $\sigma_{th} = 0.27\% \cdot \sigma_{max}$ mit σ_{max} als maximalem Singulärwert in Σ . Zum Vergleich ist das Modell der Energieverlustfunktion in rot eingezeichnet.

Rasterung durchprobieren und entscheidet sich dann automatisch für den Wert mit der kleinsten euklidischen Norm

$$\sqrt{\sum_i (y_{i,m} - y_{i,e})^2} \quad (5.15)$$

mit $y_{i,m}$ und $y_{i,e}$ als i -tem Eintrag des Modells der Energieverlustfunktion bzw. der entfalteten Funktion. Die euklidische Norm taugt jedoch nur bedingt, um die Qualität der Entfaltung abzuschätzen. Von eigentlichem Interesse ist hier die induzierte systematische Unsicherheit auf $m_{\nu_e}^2$. Mit der Berechnung dieser Unsicherheit befasst sich deshalb der folgende Abschnitt 5.1.4.

5.1.4 Ermittlung der systematischen Unsicherheit

Um den Beitrag zur systematischen Unsicherheit der quadratischen Neutrinomasse $m_{\nu_e}^2$, der durch ein ungenaues Entfaltungsergebnis entsteht, abzuschätzen, wird das *evaluation* Programmpaket verwendet, das auf bereits beim Mainzer Neutrinomassenexperiment eingesetzter Software beruht. Es besteht im Wesentlichen aus einer Monte-Carlo-Simulation zur Erzeugung von KATRIN-Messdaten und einem Fit des β -Spektrums an diese Daten.

Zur Erzeugung der Messdaten wird zunächst das Modell der Energieverlustfunktion mehrmals mit sich selbst gefaltet, um die Energieverlustfunktionen für ein- bis vierfache Streuung zu erhalten. Diese Energieverlustfunktionen werden unter Einbeziehung der

Streuwahrscheinlichkeiten dann mit der Transmissionsfunktion gefaltet, was die Antwortfunktion liefert (vgl. Gleichung (4.5)). Zuletzt wird die Antwortfunktion mit dem theoretischen β -Spektrum gefaltet und somit das gemessene β -Spektrum bestimmt. Da dieses gemessene Spektrum nur aus Modellfunktionen entstanden ist, wird es mit Zufallszahlen verrauscht, um simulierte Messdaten zu erzeugen. Bei dieser Simulation können

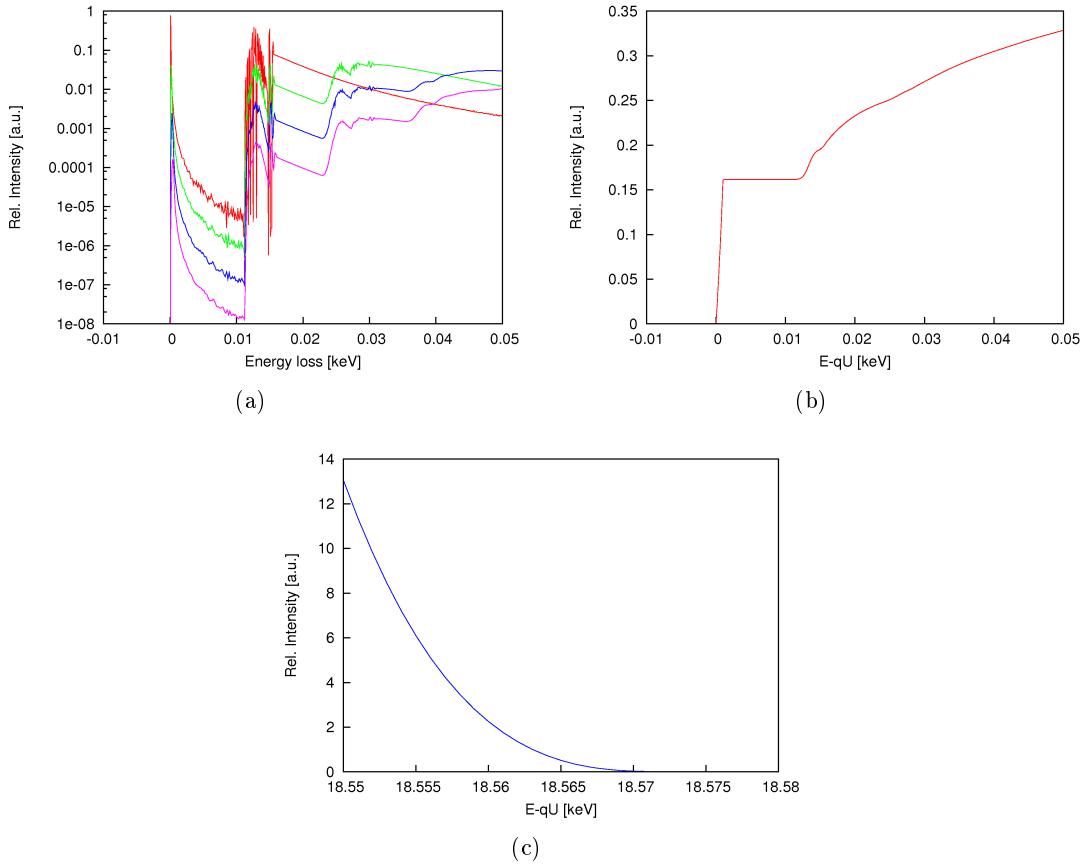


Abbildung 5.4: Die bei der Simulation erzeugten Funktionen: (a) Null- bis dreifache Faltung des Energieverlustmodells mit sich selbst (hier in logarithmischer Darstellung), (b) Antwortfunktion, (c) simuliertes gemessenes Tritium- β -Spektrum.

verschiedene Parameter wie beispielsweise das Neutrinomassenquadrat oder der Untergrund eingegeben werden. Die Neutrinomasse kann hier o.B.d.A. auf Null gesetzt werden. Die Simulation wird bei unseren Tests insgesamt 1000 mal durchgeführt, um ebenso viele simulierte KATRIN-Messungen zu erhalten. Das Verrauschen mit Zufallszahlen macht es möglich, viele Messdaten in kurzer Zeit zu erzeugen.

An die Daten wird nun ein Modell des gemessenen β -Spektrums gefittet [Kra03], bei dem als Fitparameter die Amplitude, der Untergrund, das Neutrinomassenquadrat und der Endpunkt des β -Spektrums eingehen. Zusätzlich werden eine Messzeitverteilung, die Endzustandsverteilung des $(\text{HeT})^+$ Tochtermoleküls und die Antwortfunktion eingelesen. Die Antwortfunktion wird dabei wie im vorangegangenen Teil der Simulation durch Faltung erzeugt, dieses Mal jedoch mit der entfalteten Energieverlustfunktion als

Eingabe. Durch die Erzeugung der Spektren mit Zufallszahlen schwanken die Ergebnisse für den Fitparameter $m_{\nu_e}^2$ um einen Mittelwert. Die Differenz dieses Mittelwerts der 1000 Spektren zur eingangs verwendeten Neutrinomasse von Null liefert die systematische Unsicherheit $\Delta m_{\nu_e}^2$, die durch die Entfaltung der Energieverlustfunktion induziert wird. Für die in Abbildung 5.3 bereits gezeigte Entfaltung mit $\sigma_{\text{th}} = 0.27\%^2$ beträgt die

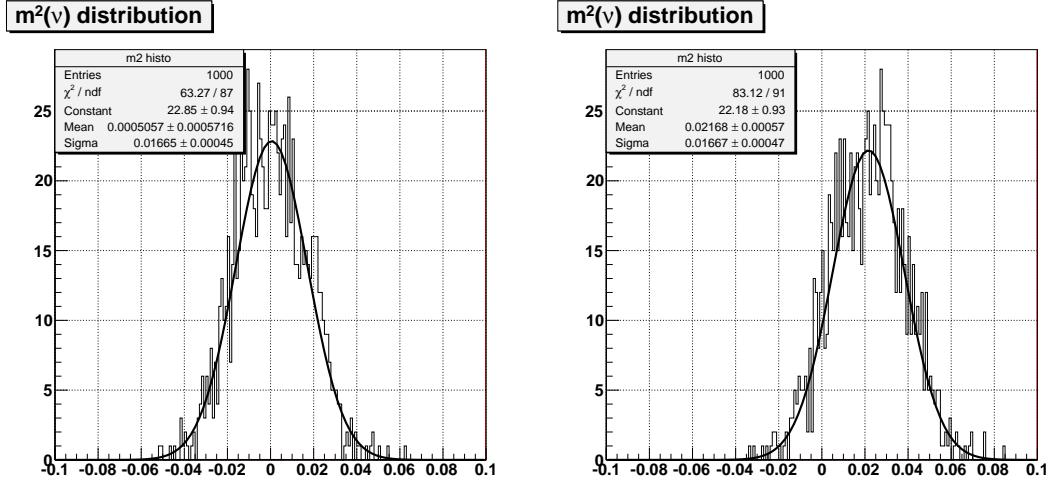


Abbildung 5.5: Die Ergebnisse für den Fitparameter $m_{\nu_e}^2$ für jeweils 1000 simulierte Messungen. Im Diagramm links wurde dabei das Energieverlustmodell, mit der auch die Simulation gestartet wurde, für den Fit verwendet. Rechts wurde hingegen eine entfaltete Energieverlustfunktion mit $\sigma_{\text{th}} = 2\% \cdot \sigma_{\text{max}}$ benutzt. Der Betrag der Verschiebung der Verteilung definiert die durch Entfaltung induzierte systematische Unsicherheit.

systematische Unsicherheit

$$\Delta m_{\nu_e}^2 = (8.2 \cdot 10^{-4} \pm 5.7 \cdot 10^{-4}) \text{ eV}^2. \quad (5.16)$$

Die Entfaltung erfüllt damit gut die KATRIN-Anforderung von $\Delta m_{\nu_e}^2 < 0.0075 \text{ eV}^2$.

5.2 Ermittlung eines optimalen Schwellwerts

Wie bereits in Abschnitt 5.1.3 erwähnt, ist die Qualität der Entfaltung vom Schwellwert σ_{th} abhängig. Zur Beurteilung dieser Qualität stehen die in Gleichung (5.15) genannte Euklidische Norm und die in Abschnitt 5.1.4 beschriebene systematische Unsicherheit $\Delta m_{\nu_e}^2$ zur Verfügung. Die Unsicherheit ist dabei diejenige Größe, die von eigentlichem physikalischen Interesse ist und auf die optimiert werden muss.

Zum Auffinden eines idealen Schwellwertes wird die Entfaltung für verschiedene σ_{th} durchgeführt und jeweils die Euklidische Norm und die induzierte systematische Unsicherheit berechnet. Im interessanten Bereich der betragsmäßig kleinsten Werte wird σ_{th} mit einer Schrittweite von $0.01\% \cdot \sigma_{\text{max}}$ variiert. Das Ergebnis ist in Abbildung 5.6 dargestellt. Grundsätzlich ergibt sich für beide Größen ein ähnliches Bild: Während für

²Im nächsten Abschnitt 5.2 wird gezeigt, dass es sich bei diesem Wert tatsächlich um eine zu bevorzugende Schwelle handelt.

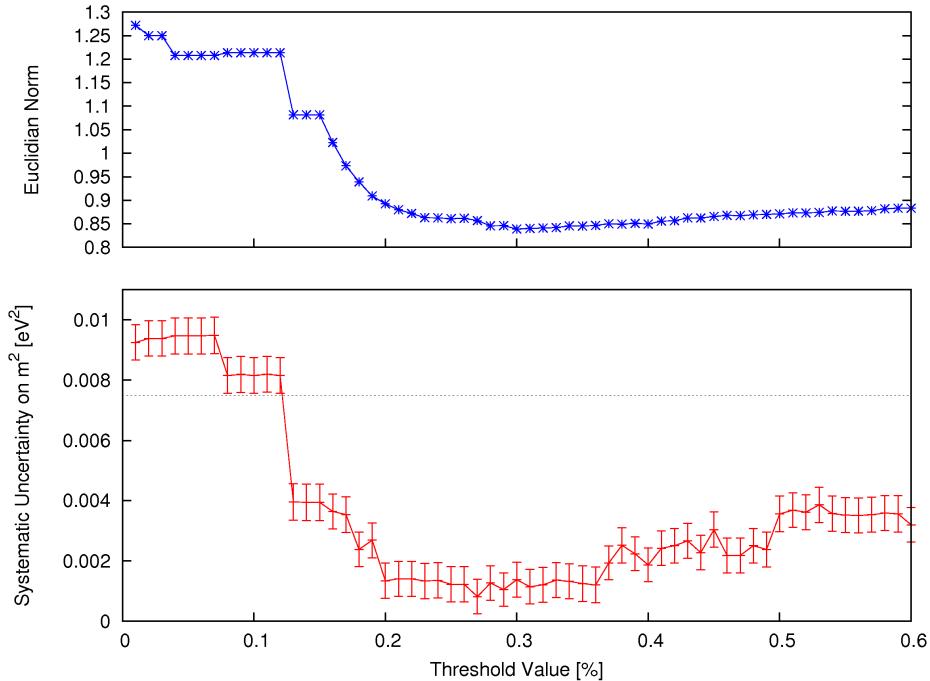


Abbildung 5.6: Dargestellt sind die euklidische Norm und die systematische Unsicherheit $\Delta m_{\nu_e}^2$ für verschiedene Schwellwerte σ_{th} der Singulärwertzerlegung. Die gestrichelte Linie zeigt die KATRIN-Anforderung von $\Delta m_{\nu_e}^2 < 0.0075 \text{ eV}^2$.

kleine Schwellwerte $\sigma_{th} < 0.1\%$ das Modell eher schlecht rekonstruiert wird, werden im Bereich von 0.2% bis 0.4% die besten Ergebnisse erzielt. Geht man über diesen Bereich hinaus, wird die Rekonstruktion langsam aber stetig schlechter.

Die euklidische Norm nimmt ihr Minimum bei ca. 0.3% an. Für die Unsicherheit $\Delta m_{\nu_e}^2$ liegt das Minimum bei 0.27%. Dieser Wert befindet sich zudem mittig innerhalb eines Bereichs von 0.2% bis 0.36%, für den man durchweg sehr kleine $\Delta m_{\nu_e}^2$ erhält und wird daher als Standardschwellwert für die Singulärwertzerlegung genutzt.

5.3 Überprüfung von Näherungen

In Abschnitt 4.3 wurde die Antwortfunktion gemäß Gleichung (4.5) als Summe von i -fachen Faltungen der Energieverlustfunktion mit der Transmissionsfunktion vorgestellt. Die Transmissionsfunktion geht dabei gleichermaßen in jeden Summanden, der die Beiträge der i -fach gestreuten Elektronen repräsentieren, als zu faltende Funktion ein. Dies kann nur näherungsweise der Fall sein, da die Transmissionsfunktion $T(E, qU)$ winkelabhängig ist. Gestreute Elektronen haben durch die Stöße in der Regel aber eine Winkelaufweitung erfahren, so dass sie gemäß modifizierter Funktionen $T'(E, qU), T''(E, qU)$

etc. transmittieren sollten. Allgemeiner gilt also:

$$\begin{aligned} f_{\text{res}}(E, qU) = & T(E, qU) \otimes P_0 \\ & + T'(E, qU) \otimes P_1 \cdot \frac{d\sigma}{d\Delta E} \\ & + T''(E, qU) \otimes P_2 \cdot \frac{d\sigma}{d\Delta E} \otimes \frac{d\sigma}{d\Delta E} \\ & + \dots \end{aligned} \quad (5.17)$$

Mithilfe der Simulation soll untersucht werden, inwiefern die Näherung $T(E, qU) = T'(E, qU) = T''(E, qU) = \dots$ erfüllt ist. Dazu werden die Energieverluste bei Streuung ausgeschaltet, Winkeländerungen jedoch beibehalten. Da nur noch Energieverluste von Null möglich sind, geht die Energieverlustfunktion in die Delta-Distribution über:

$$\frac{d\sigma}{d\Delta E} = \delta(\Delta E). \quad (5.18)$$

$\delta(x)$ stellt unter Faltung das neutrale Element dar. Daher gilt

$$f_{\text{res}}(E, qU) = P_0 \cdot T(E, qU) + P_1 \cdot T'(E, qU) + P_2 \cdot T''(E, qU) + \dots \quad (5.19)$$

oder anders gesprochen

$$\epsilon_0 = T(E, qU), \quad \epsilon_1 = T'(E, qU), \quad \epsilon_2 = T''(E, qU) \quad \text{etc.} \quad (5.20)$$

Man muss sich also nur die Streufunktionen in der Simulation anschauen und erhält damit unmittelbar $T'(E, qU)$, $T''(E, qU)$ etc. Abbildung 5.7 zeigt diese Funktionen. Offenbar sind sie nicht völlig identisch und unterscheiden sich vor allem etwas in der Höhe des Plateaus. Dies ist physikalisch sinnvoll, da nach der Gleichung (3.16) Elektronen mit einem Winkel von $\Theta > 50.77^\circ$ magnetisch reflektiert werden. Die isotrope Startverteilung in der Quelle enthält Winkel bis maximal 10.1° , womit für derart große Winkel nur gestreute Elektronen in Frage kommen. Die Wahrscheinlichkeit p_i für ein Elektron, am Spektrometereingang reflektiert zu werden, steigt mit der Anzahl der Streuungen i natürlich an, was sich in der stärkeren Absenkung der Plateaus für Streufunktionen höherer Ordnung widerspiegelt.

Aufgrund des geschilderten Zusammenhangs erscheint es sinnvoll, Korrekturfaktoren K_i mit

$$T = K_0 \cdot T, \quad T' = K_1 \cdot T, \quad T'' = K_2 \cdot T \quad \text{etc.} \quad (5.21)$$

einzuführen, die die Unterschiede in den Transmissionsfunktionen berücksichtigen. Die Reflektionswahrscheinlichkeit ist dann $p_i = 1 - K_i$. Die Korrekturfaktoren können über eine Mittelung der Funktion im Bereich des Plateaus zwischen 5 eV und 50 eV bestimmt werden. Für null- bis dreifache Streuung ergibt sich:

$$\begin{aligned} K_0 &= 1 \pm 0, & K_1 &= 0.999931 \pm 4 \cdot 10^{-6}, \\ K_2 &= 0.999817 \pm 6 \cdot 10^{-6}, & K_3 &= 0.999622 \pm 9 \cdot 10^{-6}. \end{aligned} \quad (5.22)$$

Der Effekt, dass einige wenige Elektronen reflektiert werden, ist auch zu erkennen, wenn man die simulierten Antwortfunktionen verschiedener Säulendichten vergleicht (s. Abb.

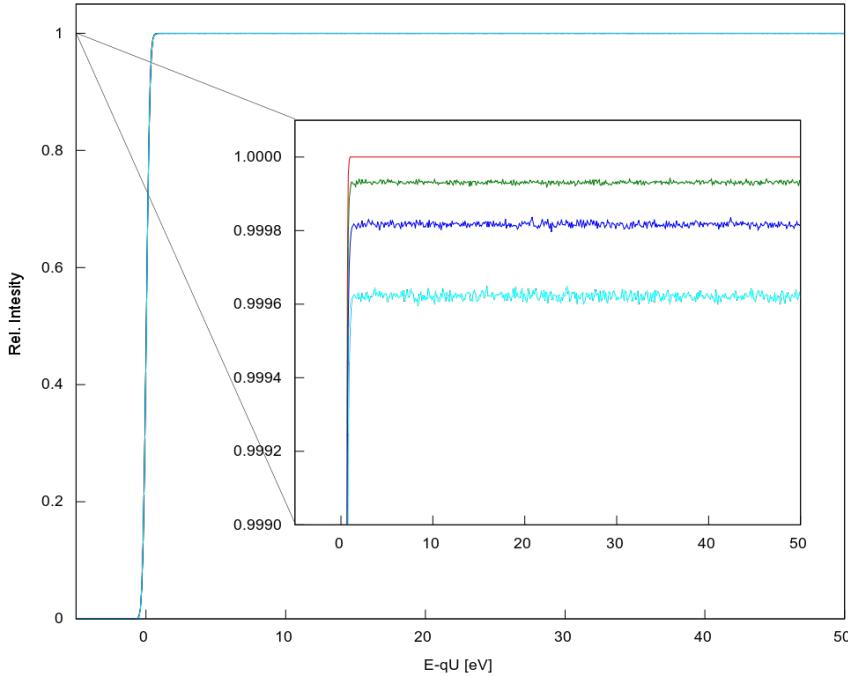


Abbildung 5.7: Abgebildet sind die Streufunktionen ϵ_0 (schwarz), ϵ_1 (grün), ϵ_2 (blau) und ϵ_3 (türkis) aus einer Simulation ohne Energieverluste und einer Säulendichte von $\rho d = 6 \cdot 10^{17} \text{ cm}^{-2}$. Der größte sichtbare Unterschied zwischen diesen Funktionen besteht in der Höhe des Plateaus.

5.8). Mit $\rho d > 0$ wird hier nicht mehr die maximale Transmission ungestreuter Elektronen erreicht. Stattdessen ist diese um den Faktor $\sum P_i K_i$ reduziert.

Nun ist natürlich interessant, in welchem Maße die Matrixinversion und damit die SVD von der Einführung dieser Korrekturfaktoren profitiert. Dazu werden für verschiedene Schwellwerte noch einmal die systematischen Unsicherheiten $\Delta m_{\nu_e}^2$ berechnet. In Abbildung 5.9 ist zu erkennen, dass die Modifikation kaum Auswirkungen auf das Entfaltungsergebnis hat. Die genannte Näherung kann damit ohne Weiteres angewendet werden.

Zuletzt sei angemerkt, dass die unter (5.22) angegebenen Korrekturfaktoren nur für unsere isotrope Winkelverteilung bis $\Theta_{S,\max} = 10.1^\circ$ in der Quelle gültig sind. Möchte man die K_i mit einer anderen Winkelverteilung anwenden, müssen sie vorerst wieder durch Simulation bestimmt werden. Außerdem stellt die Einführung der Faktoren keine vollständige Korrektur sondern nur eine Verbesserung dar. So wird der Effekt der magnetischen Reflexion nach Gleichung (3.16) zwar berücksichtigt; davon abgesehen findet allerdings auch noch eine winkelabhängige Transmission an der Analysierebene

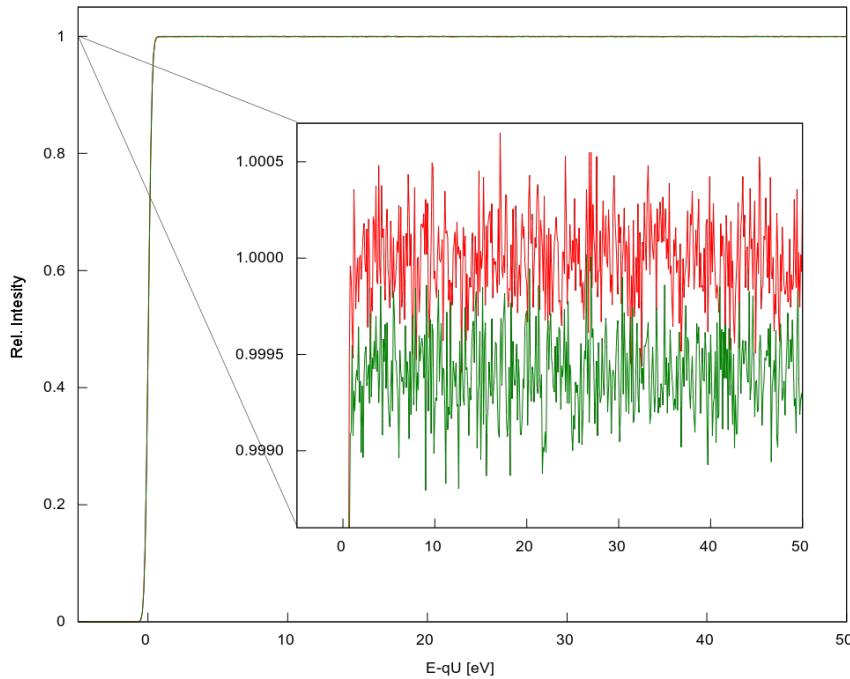


Abbildung 5.8: Abgebildet sind die Antwortfunktionen für die Säulendichten 0 (rot) und $6 \cdot 10^{17} \text{ cm}^{-2}$ (grün) ohne Energieverlust. Der Graph wird in diesem Bereich durch das Rauschen geprägt, das durch die zufällige Anzahl gestarteter Elektronen pro Intervall entsteht, dennoch ist die Absenkung der relativen Intensität gut zu erkennen.

gemäß Gleichung (3.15) statt. Dies äußert sich darin, dass die Transmissionsfunktionen für gestreute Elektronen ihren Maximalwert erst für eine höhere Überschussenergie $E - qU$ erreicht. Der Effekt ist in Abbildung 5.7 enthalten, allerdings kaum zu erkennen und soll im nächsten Abschnitt mithilfe einer Test-Simulation verdeutlicht werden.

5.3.1 Demonstrations-Simulation

Um den Einfluss der winkelabhängigen Transmission in der Analysierebene auf die Antwortfunktion zu demonstrieren, wird eine weitere unphysikalische Test-Simulation durchgeführt. Bei dieser werden wie bei der Simulation in Abschnitt 5.3 alle Energieverluste auf Null gesetzt. Außerdem erfahren die Elektronen bei jeder Streuung stets eine Winkeländerung von 40° . Bei der verwendeten Säulendichte von $3 \cdot 10^{17} \text{ cm}^{-2}$ machen mit $P_0 \approx 33\%$ und $P_1 \approx 31\%$ die null- und einfach gestreuten Elektronen den größten Anteil aus. Da alle Elektronen mit $\Theta = 0^\circ$ gestartet werden, besitzen diese also jeweils feste Winkel von 0° bzw. 40° , so dass man nach Gleichung (3.15) bei 0 eV Transmis-

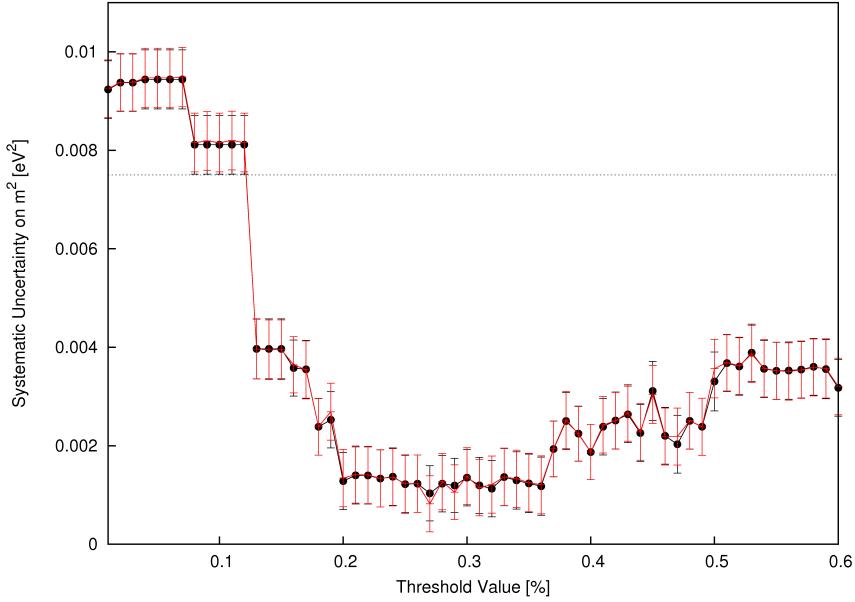


Abbildung 5.9: Abgebildet sind die systematischen Unsicherheiten $\Delta m_{\nu_e}^2$ für verschiedene Schwellwerte σ_{th} der Entfaltung. Die schwarze Kurve ist dabei unter Berücksichtigung der Korrekturfaktoren K_i in der Matrixinversion entstanden. Die rote Kurve zeigt den ursprünglichen Verlauf ohne Korrekturen.

sion der ungestreuten und bei 0.64 eV Transmission der einfach gestreuten Elektronen erwartet. Schaltet man zudem die „Energieverschmierung“ der e-gun mit $\sigma_{egun} = 0$ aus, so erhält man die Antwortfunktion aus Abbildung 5.10.

Man erkennt dort, dass durch die festen Winkel der meisten Elektronen die Flanke der Antwortfunktion durch zwei getrennte Anstiege charakterisiert ist. Zudem zeigt der Vergleich zur Antwortfunktion mit $\rho d = 0$, dass der Bereich maximaler Transmission etwas später erreicht wird. Die Tatsache, dass die Kurve z.B. zwischen 0 und 0.64 eV keine Waagerechte beschreibt, ist darauf zurückzuführen, dass i -fach gestreute Elektronen mit $i \geq 2$ wieder beliebige Winkel zwischen 0 und Θ_{\max} besitzen und daher einen Beitrag u.a. im genannten Bereich leisten. Der bereits diskutierte Effekt der Absenkung des Plateaus ist aufgrund der großen Streuwinkel besonders ausgeprägt.

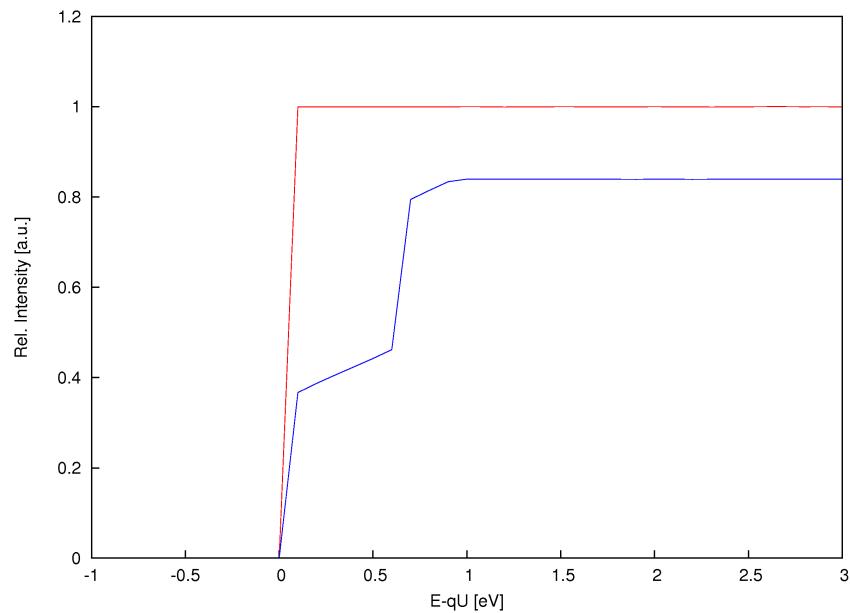


Abbildung 5.10: Antwortfunktionen der Test-Simulation bei einer Säulendichte von 0 (rot) und $3 \cdot 10^{17} \text{ cm}^{-2}$ (blau). Die Graphen zeigen schematisch die Einflüsse der winkeländernden Stöße auf die Antwortfunktion: Zum einen eine Deformation der Flanke und zum andern eine Reduzierung der gesamten Transmission.

6 Alternative Entfaltungsmethoden

In diesem Kapitel wird zunächst der BiCGstab(l)-Algorithmus (engl. *Bi-Conjugate Gradient Stabilized method*), der wie die Singulärwertzerlegung ein Verfahren zur Lösung dünnbesetzter linearer Gleichungssysteme der Form

$$\mathbf{b} = \mathbf{A} \cdot \mathbf{x} \quad (6.1)$$

darstellt, als alternative Entfaltungsmethode für die Energieverlustfunktion getestet. Außerdem soll die abschnittsweise SVD, die einen Versuch zur Verbesserung der SVD für unser Problem darstellt, vorgestellt werden.

6.1 Der BiCGstab(l)-Algorithmus

In [Wol08] wurde bereits der BiCG-Algorithmus für die Entfaltung der Energieverlustfunktion getestet. Dieser war allerdings durch seine unregelmäßige Konvergenz problematisch zu handhaben. Genau dieses Problem geht der BiCGstab(l)-Algorithmus an, der für die meisten Probleme gleichmäßiger und/oder schneller konvergiert als BiCG. Zum Verständnis von BiCGstab(l) werden zunächst CG und BiCG vorgestellt, Algorithmen, auf die BiCGstab(l) aufbaut. Abschließend werden die Ergebnisse des Algorithmus diskutiert.

6.1.1 Theorie

Die in diesem Abschnitt zu behandelnden Algorithmen gehören zu den Krylow-Unterraum-Verfahren. Krylow-Unterraum-Verfahren sind iterative Verfahren, bei denen zu einer Näherungslösung \mathbf{x}_0 von Gleichung (6.1) und dem Residuum $\mathbf{r}_0 = \mathbf{b} - \mathbf{A}\mathbf{x}_0$ eine bessere Näherungslösung $\mathbf{x}_m \in \mathbf{x}_0 + \mathcal{K}_m$ mit dem m -ten Krylow-Unterraum

$$\mathcal{K}_m = \text{span}(\mathbf{r}_0, \mathbf{A}\mathbf{r}_0, \mathbf{A}^2\mathbf{r}_0, \dots, \mathbf{A}^{m-1}\mathbf{r}_0) \quad (6.2)$$

gesucht wird. m wird dabei für jeden Iterationsschritt um 1 erhöht. Zudem wird die Petrov-Galerkin-Bedingung

$$\mathbf{r}_m = \mathbf{b} - \mathbf{A}\mathbf{x}_m \perp \mathcal{L}_m \quad (6.3)$$

mit \mathcal{L}_m als einem anderen m -dimensionalen Unterraum benutzt. Krylow-Unterraum-Verfahren unterscheiden sich in der Wahl für \mathcal{L}_m . Bei CG ist z.B. $\mathcal{L}_m = \mathcal{K}_m$.

Das CG-Verfahren

Der CG-Algorithmus ist für symmetrische, positiv definite, reelle Matrizen \mathbf{A} anwendbar. Er verwendet Hilfsvektoren \mathbf{u}_j , die die Suchrichtung nach einer neuen Lösung vorgeben. Zur Herleitung werden die Orthogonalität der Residuen \mathbf{r}_j und die Konjugation

der Vektoren \mathbf{u}_j ausgenutzt [Hes52], sprich:

$$\langle \mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j \rangle = 0, \quad \langle \mathbf{u}_i, \mathbf{A}\mathbf{u}_j \rangle = 0 \quad \text{für } i \neq j. \quad (6.4)$$

Der Vektor \mathbf{x}_{j+1} kann ausgedrückt werden als [Saa03]

$$\mathbf{x}_{j+1} = \mathbf{x}_j + \alpha_j \mathbf{u}_j. \quad (6.5)$$

Damit gilt für die Residuen

$$\mathbf{r}_{j+1} = \mathbf{r}_j - \alpha_j \mathbf{A}\mathbf{u}_j. \quad (6.6)$$

Wenn die Residuumvektoren die Orthogonalität (6.4) erfüllen, gilt $\langle (\mathbf{r}_j - \alpha_j \mathbf{A}\mathbf{u}_j), \mathbf{r}_j \rangle = 0$ und damit:

$$\alpha_j = \frac{\langle \mathbf{r}_j, \mathbf{r}_j \rangle}{\langle \mathbf{A}\mathbf{u}_j, \mathbf{r}_j \rangle}. \quad (6.7)$$

Da \mathbf{u}_{j+1} eine Linearkombination aus \mathbf{r}_{j+1} und \mathbf{u}_j ist, folgt:

$$\mathbf{u}_{j+1} = \mathbf{r}_{j+1} + \beta_j \mathbf{u}_j. \quad (6.8)$$

Aufgrund der Orthogonalität von $\mathbf{A}\mathbf{u}_j$ und \mathbf{u}_{j-1} ergibt sich als Konsequenz

$$\langle \mathbf{A}\mathbf{u}_j, \mathbf{r}_j \rangle = \langle \mathbf{A}\mathbf{u}_j, \mathbf{u}_j - \beta_{j-1} \mathbf{u}_{j-1} \rangle = \langle \mathbf{A}\mathbf{u}_j, \mathbf{u}_j \rangle, \quad (6.9)$$

Damit wird (6.7) zu $\alpha_j = \langle \mathbf{r}_j, \mathbf{r}_j \rangle / \langle \mathbf{A}\mathbf{u}_j, \mathbf{u}_j \rangle$. Wenn man außerdem die Orthogonalität von \mathbf{u}_{j+1} nach Gleichung (6.8) mit $\mathbf{A}\mathbf{u}_j$ ausnutzt, liefert dies

$$\beta_j = -\frac{\langle \mathbf{r}_{j+1}, \mathbf{A}\mathbf{u}_j \rangle}{\langle \mathbf{u}_j, \mathbf{A}\mathbf{u}_j \rangle}. \quad (6.10)$$

Aus Gleichung (6.6) erkennt man

$$\mathbf{A}\mathbf{u}_j = -\frac{1}{\alpha_j}(\mathbf{r}_{j+1} - \mathbf{r}_j) \quad (6.11)$$

und damit

$$\beta_j = -\frac{1}{\alpha_j} \frac{\langle \mathbf{r}_{j+1}, (\mathbf{r}_{j+1} - \mathbf{r}_j) \rangle}{\langle \mathbf{A}\mathbf{u}_j, \mathbf{u}_j \rangle} = \frac{\langle \mathbf{r}_{j+1}, \mathbf{r}_{j+1} \rangle}{\langle \mathbf{r}_j, \mathbf{r}_j \rangle}. \quad (6.12)$$

Algorithmus 1 zeigt eine Zusammenfassung des Verfahrens. Im Falle der Konvergenz ist nach m Iterationsschritten ein Lösungsvektor mit $\|\mathbf{r}_m\| \approx 0$ gefunden. Ist dies nicht der Fall, kann derjenige Vektor \mathbf{x}_j als Näherungslösung verwendet werden, für den die Norm des Residuums \mathbf{r}_j am kleinsten ist.

Das BiCG-Verfahren

Die für das CG-Verfahren verwendeten Orthogonalitäts- und Konjugationsrelationen (6.4) werden nur von symmetrischen, positiv definiten, reellen Matrizen erfüllt. Das BiCG-Verfahren ist hingegen für beliebige Matrizen anwendbar und stellt eine Verallgemeinerung von CG dar. Es führt zusätzlich zum Residuum \mathbf{r}_j ein „Schattenresiduum“ $\bar{\mathbf{r}}_j$ sowie einen weiteren zugehörigen Vektor $\bar{\mathbf{u}}_j$ ein. Obwohl diese Vektoren im Algorithmus explizit berechnet werden, dienen sie lediglich dazu, die Koeffizienten α_j und β_j zu berechnen. Die genannten Vektoren erfüllen die Biorthogonalitäts- und Bikonjugationsrelationen [Fle72]

$$\langle \mathbf{r}_i, \bar{\mathbf{r}}_j \rangle = \langle \bar{\mathbf{r}}_i, \mathbf{r}_j \rangle = 0, \quad \langle \bar{\mathbf{u}}_i, \mathbf{A}\mathbf{u}_j \rangle = \langle \mathbf{u}_i, \mathbf{A}^T \bar{\mathbf{u}}_j \rangle \quad \text{für } j < i. \quad (6.13)$$

Der vollständige Algorithmus ist unter Algorithmus 2 zu finden.

Algorithmus 1 CG-Verfahren

Eingabe : Startvektor \mathbf{x}_o **Ausgabe** : Ergebnis \mathbf{x}_m

$$j = -1$$

Berechne $\mathbf{r}_0 = \mathbf{b} - \mathbf{A}\mathbf{x}_0$

$$\mathbf{u}_0 = \mathbf{r}_0$$

repeat

$$j = j + 1$$

$$\alpha_j = \frac{\langle \mathbf{r}_j, \mathbf{r}_j \rangle}{\langle \mathbf{A}\mathbf{u}_j, \mathbf{u}_j \rangle}$$

$$\mathbf{x}_{j+1} = \mathbf{x}_j + \alpha_j \mathbf{u}_j$$

$$\mathbf{r}_{j+1} = \mathbf{r}_j - \alpha_j \mathbf{A}\mathbf{u}_j$$

$$\beta_j = \frac{\langle \mathbf{r}_{j+1}, \mathbf{r}_{j+1} \rangle}{\langle \mathbf{r}_j, \mathbf{r}_j \rangle}$$

$$\mathbf{u}_{j+1} = \mathbf{r}_{j+1} + \beta_j \mathbf{u}_j$$

until $\|\mathbf{r}_{j+1}\| \approx 0$

Algorithmus 2 BiCG-Verfahren

Eingabe : Startvektor \mathbf{x}_o **Ausgabe** : Ergebnis \mathbf{x}_m

$$j = -1$$

Berechne $\mathbf{r}_0 = \mathbf{b} - \mathbf{A}\mathbf{x}_0$ **Wähle** $\bar{\mathbf{r}}_0$

$$\mathbf{u}_0 = \mathbf{r}_0, \bar{\mathbf{u}}_0 = \bar{\mathbf{r}}_0$$

repeat

$$j = j + 1$$

$$\alpha_j = \frac{\langle \mathbf{r}_j, \bar{\mathbf{r}}_j \rangle}{\langle \mathbf{A}\mathbf{u}_j, \bar{\mathbf{u}}_j \rangle}$$

$$\mathbf{x}_{j+1} = \mathbf{x}_j + \alpha_j \mathbf{u}_j$$

$$\mathbf{r}_{j+1} = \mathbf{r}_j - \alpha_j \mathbf{A}\mathbf{u}_j$$

$$\bar{\mathbf{r}}_{j+1} = \bar{\mathbf{r}}_j - \alpha_j \mathbf{A}_j^T \bar{\mathbf{u}}_j$$

$$\beta_j = \frac{\langle \mathbf{r}_{j+1}, \bar{\mathbf{r}}_{j+1} \rangle}{\langle \mathbf{r}_j, \bar{\mathbf{r}}_j \rangle}$$

$$\mathbf{u}_{j+1} = \mathbf{r}_{j+1} + \beta_j \mathbf{u}_j$$

$$\bar{\mathbf{u}}_{j+1} = \bar{\mathbf{r}}_{j+1} + \beta_j \bar{\mathbf{u}}_j$$

until $\|\mathbf{r}_{j+1}\| \approx 0$

Der BiCGstab(l)-Algorithmus

Der BiCGstab(l)-Algorithmus wurde geschaffen, um Probleme mit ungleichmäßiger Konvergenz des BiCG-Algorithmus zu beseitigen bzw. um schnellere Konvergenz zu erzeugen. Die Idee bei diesem Algorithmus besteht darin, stets nach einigen BiCG-Iterationen ein Verfahren des minimalen Residuums (MR-Teil) durchzuführen, in dem die Norm des Residuums $\mathbf{r}_k = q_k(A)\mathbf{r}_k$ mit $q_k(A)$ als passendem Polynom k -ten Grades minimiert wird. Der Algorithmus soll damit zur Konvergenz „gezwungen“ werden.

Algorithmus 3 berechnet iterativ \mathbf{u}_{k-1} , \mathbf{x}_k und \mathbf{r}_k für $k = l, 2l, 3l, \dots$. Diese Schritte nennt man die äußeren Iterationsschritte. Ein einzelner äußerer Iterationsschritt, indem von $k = ml$ zu $k = ml + l$ gesprungen wird, enthält einen inneren Iterationsvorgang. Dieser besteht in der ersten Hälfte aus der Berechnung neuer BiCG-Vektoren und in der zweiten Hälfte aus dem MR-Teil, in dem ein lokal minimiertes Residuum konstruiert wird. Dazu wird für alle $k = ml + l$ ein $q_k = q_{ml+l} = p_m p_{m-1} \dots p_0$ ermittelt, wobei die p_i s die Eigenschaften Grad l und $p_i(0) = 1$ besitzen und p_m die Norm $\|\mathbf{r}_k\| = \|p_m(A)q_{k-l}(A)\mathbf{r}_k\|$ minimiert. Das Polynom q_{k-l} ist dabei aus der vorherigen Iteration bekannt.

Wenn wir annehmen, für ein $k = ml$ und ein Polynom $q_k \in \mathcal{P}_k$ mit $q_k(0) = 1$ die Vektoren \mathbf{u}_{k-1} , \mathbf{x}_k und \mathbf{r}_k bereits berechnet zu haben, so dass

$$\mathbf{u}_{k-1} = Q_k u_{k-1}, \quad \mathbf{r}_k = Q_k r_k \quad \text{und} \quad \mathbf{x}_k \quad \text{mit} \quad Q_k = q_k(A) \quad (6.14)$$

ist, kann die innere Iterationsschleife im Falle $l = 2$ gemäß des Schemas in Abbildung 6.1 dargestellt werden. Die Berechnung geschieht hierbei Zeile für Zeile. Die Pfeile zei-

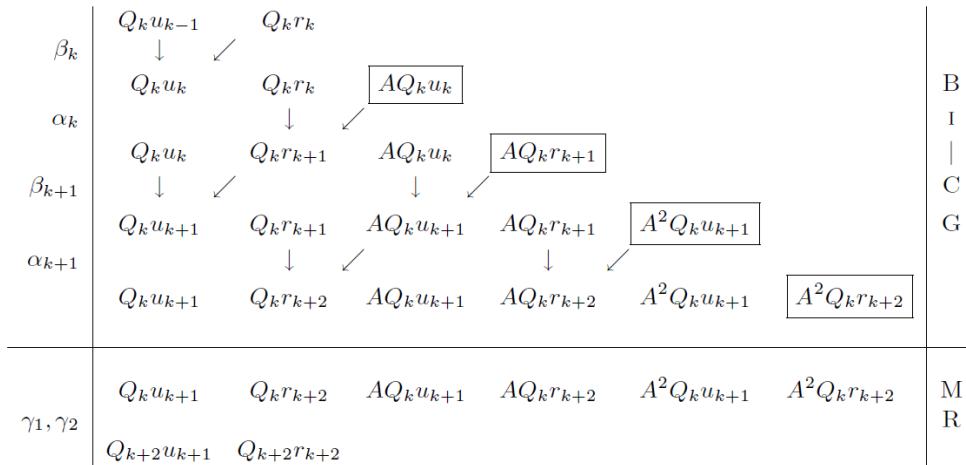


Abbildung 6.1: Berechnungsschema für BiCGstab(2). Quelle: [Sle93].

gen die Updates der Vektoren durch BiCG-Relationen an. So wird beispielsweise beim Übergang von der ersten zur zweiten Zeile $Q_k u_k = Q_k(r_k - \beta_k u_{k-1}) = Q_k r_k - \beta_k Q_k u_{k-1}$ ausgenutzt, beim Übergang von der zweiten zur dritten Zeile entsprechend $Q_k r_{k+1} = Q_k(r_k - \alpha_k A u_k) = Q_k r_k - \alpha_k A Q_k u_k$. Vektoren, die aus einer Matrixmultiplikation mit A resultieren, sind eingerahmt. Es sind allerdings nicht alle Vektorupdates in Abbildung 6.1 zu finden. Die fünfte Zeile kann nun bspw. wie folgt berechnet werden: Wegen

Algorithmus 3 BiCGstab(l)**Eingabe** : Startvektor \mathbf{x}_o **Ausgabe** : Ergebnis \mathbf{x}_m

$$k = -l$$

Berechne $\mathbf{r}_0 = \mathbf{b} - \mathbf{A}\mathbf{x}_0$ **Wähle** $\bar{\mathbf{r}}_0$

$$\mathbf{p}_{-1} = 0, \rho_0 = 1, \alpha = 0, \omega = 1$$

repeat

$$k = k + l$$

Setze $\hat{\mathbf{u}}_0 = \mathbf{p}_{k-1}, \hat{\mathbf{r}}_0 = \mathbf{r}_k$ und $\hat{\mathbf{x}}_0 = \mathbf{x}_k$

$$\rho_0 = -\omega\rho_0$$

(BiCG-Teil)

for $j = 0, \dots, l-1$ **do**

$$\rho_1 = \langle \hat{\mathbf{r}}_j, \bar{\mathbf{r}}_0 \rangle, \beta = \beta_{k+j} = \alpha \frac{\rho_1}{\rho_0}, \rho_0 = \rho_1$$

for $i = 0, \dots, j$ **do**

$$\hat{\mathbf{u}}_i = \hat{\mathbf{r}}_i - \beta \hat{\mathbf{u}}_i$$

end for

$$\hat{\mathbf{u}}_{j+1} = A\hat{\mathbf{u}}_j$$

$$\gamma = \langle \hat{\mathbf{u}}_{j+1}, \bar{\mathbf{r}}_0 \rangle, \alpha = \alpha_{k+j} = \frac{\rho_0}{\gamma}$$

for $i = 0, \dots, j$ **do**

$$\hat{\mathbf{r}}_i = \hat{\mathbf{r}}_i - \alpha \hat{\mathbf{u}}_{i+1}$$

end for

$$\hat{\mathbf{r}}_{j+1} = A\hat{\mathbf{r}}_j, \hat{\mathbf{x}}_0 = \hat{\mathbf{x}}_0 - \alpha \hat{\mathbf{u}}_0$$

end for

(MR-Teil)

for $j = 1, \dots, l$ **do****for** $i = 1, \dots, j-1$ **do**

$$\tau_{ij} = \frac{1}{\sigma_i} \langle \hat{\mathbf{r}}_j, \hat{\mathbf{r}}_i \rangle$$

$$\hat{\mathbf{r}}_j = \hat{\mathbf{r}}_j - \tau_{ij} \hat{\mathbf{r}}_i$$

end for

$$\sigma_j = \langle \hat{\mathbf{r}}_j, \hat{\mathbf{r}}_j \rangle, \gamma'_j = \frac{1}{\sigma_j} \langle \hat{\mathbf{r}}_0, \hat{\mathbf{r}}_j \rangle$$

end for

$$\gamma_l = \gamma'_l, \omega = \gamma_l$$

for $j = l-1, \dots, 1$ **do**

$$\gamma_j = \gamma'_j - \sum_{i=j+1}^l \tau_{ji} \gamma_i$$

end for**for** $j = 1, \dots, l-1$ **do**

$$\gamma''_j = \gamma_{j+1} - \sum_{i=j+1}^{l-1} \tau_{ji} \gamma_{i+1}$$

end for

$$\hat{\mathbf{x}}_0 = \hat{\mathbf{x}}_0 + \gamma_1 \hat{\mathbf{r}}_0, \hat{\mathbf{r}}_0 = \hat{\mathbf{r}}_0 + \gamma'_l \hat{\mathbf{r}}_l, \hat{\mathbf{u}}_0 = \hat{\mathbf{u}}_0 + \gamma_l \hat{\mathbf{u}}_l$$

for $j = 1, \dots, l-1$ **do**

$$\hat{\mathbf{u}}_0 = \hat{\mathbf{u}}_0 - \gamma_j \hat{\mathbf{u}}_j$$

$$\hat{\mathbf{x}}_0 = \hat{\mathbf{x}}_0 + \gamma''_j \hat{\mathbf{r}}_j$$

$$\hat{\mathbf{r}}_0 = \hat{\mathbf{r}}_0 - \gamma'_j \hat{\mathbf{r}}_j$$

end for**Setze** $\mathbf{u}_{k+l-1} = \hat{\mathbf{u}}_0, \mathbf{r}_{k+l} = \hat{\mathbf{r}}_0$ und $\mathbf{x}_{k+l} = \hat{\mathbf{x}}_0$ **until** $\|\mathbf{r}_{k+l}\| \approx 0$

$r_{k+2} = r_{k+1} - \alpha_{k+1} A u_{k+1}$ folgt

$$Q_k r_{k+2} = Q_k r_{k+1} - \alpha_{k+1} A Q_k u_{k+1} \quad \text{und} \quad A Q_k r_{k+2} = A Q_k r_{k+1} - \alpha_{k+1} A^2 Q_k u_{k+1}. \quad (6.15)$$

Durch Multiplikation von $A Q_k r_{k+2}$ mit A kann der Vektor $A^2 Q_k r_{k+2}$ auf der Diagonalen des Schemas berechnet werden. Nach $2l$ Zeilen ergibt dies die Vektoren $A^i Q_k r_{k+l}$ und $A^i Q_k u_{k+l-1}$ ($i = 0, \dots, l$).

Im MR-Teil werden diese Vektoren $A^i Q_k r_{k+l}$ benutzt, um das minimale Residuum \mathbf{r}_{k+l} zu konstruieren. Dieser Vektor befindet sich als beste Näherung durch $Q_k r_{k+l}$ im Krylow-Unterraum $\mathcal{K}_{l-1}(A; A Q_k r_{k+l})$. Die zur Linearkombination benötigten Skalare γ_i werden durch das modifizierte Gram-Schmidtsche Orthogonalisierungsverfahren bestimmt. Sind diese Skalare bekannt, berechnen sich die neuen Vektoren der äußeren Iterationsschleife zu

$$\mathbf{r}_{k+l} = Q_k r_{k+l} - \sum_{i=1}^l \gamma_i A^i Q_k r_{k+l} \quad \text{und} \quad \mathbf{u}_{k+l-1} = Q_k u_{k+l-1} - \sum_{i=1}^l \gamma_i A^i Q_k u_{k+l-1}. \quad (6.16)$$

Der Algorithmus gewinnt mit steigendem l an Komplexität, sodass der Rechenaufwand pro Iterationsschritt steigt. Aufgrund der schnelleren Konvergenz für viele Probleme kann eine Wahl $l > 1$ dennoch sinnvoll sein. Außerdem ist es möglich, dass BiCGstab(l) für größere l konvergiert, wo BiCGstab(1) stagniert.

Eine ausführliche Beschreibung des BiCGstab(l)-Algorithmus lässt sich in [Sle93] finden.

6.1.2 Ergebnis

Wendet man den BiCGstab(l) Algorithmus auf unser Problem an¹, so stellt man zunächst fest, dass dieser tatsächlich gute Konvergenzeigenschaften besitzt. So ist bspw. die Wahl der Eingangsfunktion kaum von Bedeutung. Der Algorithmus liefert sowohl für den Nullvektor als auch für das vergleichsweise grobe Energieverlustmodell des Troitsker Experimentes [Ase00] als Eingabe das gleiche Ergebnis. Darüber hinaus beeinflusst die Wahl von $l = 1, 2, 4$ lediglich die Geschwindigkeit der Konvergenz, nicht jedoch das Resultat. Da das Residuum jedoch in allen Fällen bereits nach wenigen Sekunden kleiner als die Toleranz von 10^{-10} ist, kann einfach $l = 1$ verwendet werden.

Das Ergebnis der Entfaltung ist in Abbildung 6.2 zu sehen. Dieses ist deutlich von Rauschen geprägt, folgt jedoch im Mittel gut dem Energieverlustmodell. Die induzierte systematische Unsicherheit auf $m_{\nu_e}^2$ mit dieser Methode beträgt

$$\Delta m_{\nu_e}^2 = (0.0092 \pm 0.0006) \text{ eV}^2 \quad (6.17)$$

und verfehlt damit knapp die KATRIN-Anforderung von $\Delta m_{\nu_e}^2 < 0.0075 \text{ eV}^2$. Die in Abschnitt 5.1.3 vorgestellte Singulärwertzerlegung ist deshalb zu bevorzugen.

¹ Im vorliegenden Softwarepaket wird eine Implementation des BiCGstab(l)-Algorithmus aus der *Meep*-Bibliothek [Mee] verwendet.

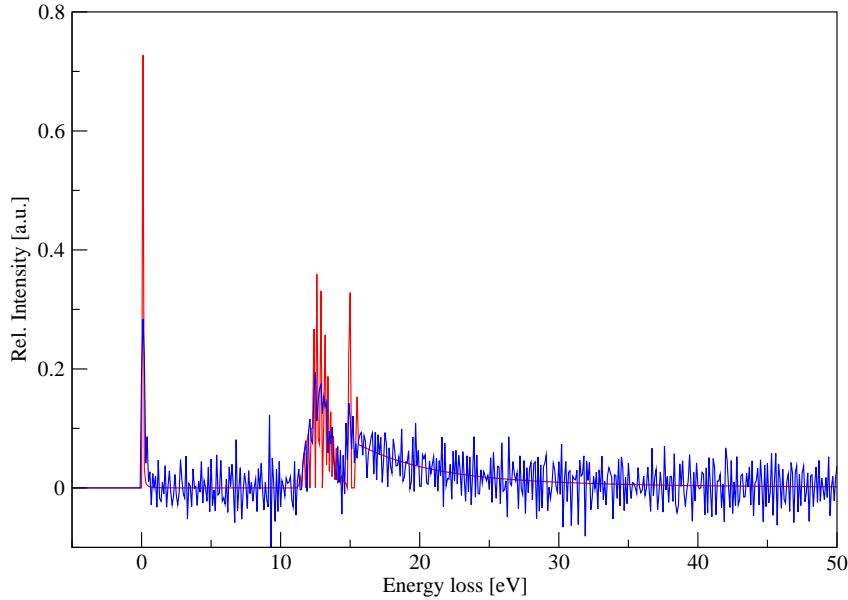


Abbildung 6.2: Dargestellt ist die mit $\text{BiCGstab}(1)$ entfaltete Energieverlustfunktion (blau) im Vergleich zum Modell (rot).

6.2 Abschnittsweise Singulärwertzerlegung

6.2.1 Motivation: Berücksichtigung von geringen Energieverlusten

Die Berücksichtigung von Energieverlusten durch elastische Streuung führt zu einem zusätzlichen sehr scharfen Peak bei sehr niedrigen Energien im Modell der Energieverlustfunktion. Diese Modifikation beeinflusst daher auch das Ergebnis der Entfaltung durch SVD und die Wahl des Schwellwertes σ_{th} .

Abbildung 6.3 ermöglicht einen qualitativen Vergleich zwischen den Modellen und ihren Entfaltungen. Es ist zu erkennen, dass die Entfaltung des aktuellen Modells neben dem rekonstruierten Peak auch ein zusätzliches Rauschen über das gesamte Intervall enthält. Der Grund dafür liegt in der unterschiedlichen Wahl des Schwellwertes. Die Festlegung von σ_{th} und die damit verbundene Manipulation der Pseudoinversen \mathbf{A}^{-1} entspricht einem Filtern von Frequenzen in der entfalteten Funktion. So wird durch einen größeren Schwellwert entsprechend stärker gefiltert, so dass nur niedrige Frequenzen am Ergebnis beteiligt sind, während ein kleiner Schwellwert kaum filtert und hohe Frequenzen durchlässt, die u.a. durch numerisches Rauschen zustande kommen. Es muss also stets ein Optimum zwischen einem verrauschten Ergebnis und einem zu großen Informationsverlust gefunden werden. Die Unterschiede in Abbildung 6.3 werden durch genau diesen Effekt erzeugt: Zur Rekonstruktion des scharfen Peaks sind höhere Frequenzen nötig, die an anderer Stelle das Ergebnis (zumindest optisch) verschlechtern. Für den flache-

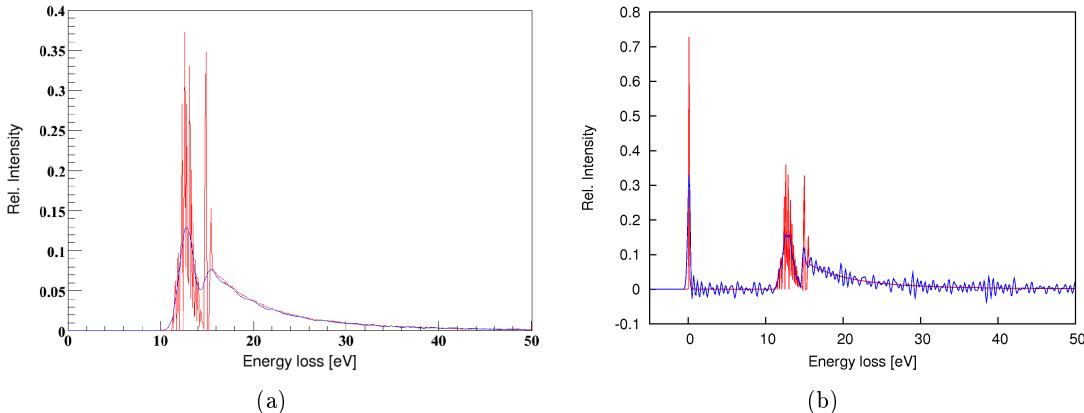


Abbildung 6.3: Dargestellt sind das Modell (rot) und Entfaltungen (blau) der Energieverlustfunktion (a) ohne und (b) mit kleinen Energieverlusten durch elastische Streuung.

ren Bereich ab 15 eV, der die Ionisation beschreibt, reichen offenbar niedrige Frequenzen aus.

Dieser Zusammenhang führt zu der Idee, die Singulärwertzerlegung mehrmals auf jeweils unterschiedliche Bereiche der Funktion anzuwenden, so dass für die unterschiedlichen Intervalle unabhängig voneinander ein geeigneter Schwellwert gefunden werden kann.

6.2.2 Ergebnis

Das Modell der Energieverlustfunktion lässt einen scharfen Peak bei kleinen Energien erwarten. Zudem befinden sich zwischen 10 eV und 16 eV die Resonanzen der elektronischen Anregungen, die zu einem sprunghaften Verhalten in der Energieverlustfunktion führen. Das Kontinuum der Ionisation ab 16 eV sowie der Bereich zwischen 1 und 10 eV werden dagegen durch einen recht glatten Verlauf der Kurve beschrieben. Aus diesem Grund erscheint es sinnvoll, diese vier Bereiche einzeln zu entfalten. Die Abschnittsgrenzen werden dazu bei 1, 10 und 16 eV gesetzt. Für jeden Abschnitt wird der Schwellwert σ_{th} mit einer Schrittweite von 0.01% variiert und derjenige Schwellwert mit der kleinsten euklidischen Norm (Gleichung (5.15)) ausgewählt. Das Ergebnis ist in Abbildung 6.4 dargestellt. Wie man erkennt, wird der erste Peak und der Bereich der Resonanzen ähnlich gut beschrieben wie bei der einfachen SVD aus Abbildung 5.3. Statt durch ein hochfrequentes Rauschen wird die Kurve im Bereich zwischen 1 und 10 eV nun durch ein niederfrequentes oszillierendes Verhalten charakterisiert. Besonders zufriedenstellend sieht der Bereich ab 16 eV aus, bei dem jegliches Rauschen verschwunden ist und der Verlauf relativ gut das Eingangsmodell beschreibt. Dennoch ist diese Methode mit einer erzeugten systematischen Unsicherheit von

$$\Delta m_{\nu_e}^2 = (0.0058 \pm 5.3 \cdot 10^{-4}) \text{ eV}^2. \quad (6.18)$$

der einfachen SVD unterlegen. Ein Grund dafür könnten „Unstetigkeiten“ an den Abschnittsgrenzen sein und eine Interpolation an diesen Stellen wäre unter Umständen in der Lage, dieses Ergebnis zu verbessern.

Für weitere Untersuchungen zur abschnittsweisen SVD siehe [Rii11].

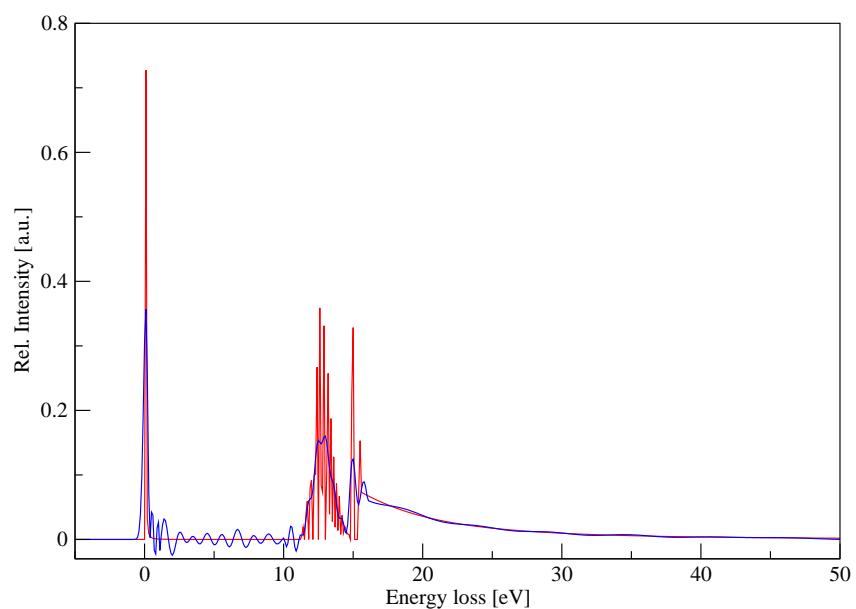


Abbildung 6.4: Dargestellt ist das Ergebnis der abschnittsweisen SVD mit den Grenzen bei 1, 10 und 16 eV. Die Schwellwerte für die einzelnen Bereiche von links nach rechts lauten: 0.22%, 0.54%, 0.32%, 2.64%.

7 Messzeitoptimierung

Dieses Kapitel beschäftigt sich mit der für die Messung der Antwortfunktionen benötigten Messzeit. Dabei wird zunächst abgeschätzt, wie lang die gesamte Messzeit für eine qualitativ ausreichende Entfaltung der Energieverlustfunktion mindestens sein muss. Im zweiten Teil wird dann ein Verfahren vorgestellt, das nach einer besseren Messzeitverteilung sucht.

7.1 Abschätzung der benötigten Messzeit

Die bisher in dieser Arbeit gezeigten simulierten Messungen von Antwortfunktionen wurden für äquidistante Messpunkte mit Abständen von 0.1 eV im Intervall von $E-qU = -5\text{ eV}$ bis 50 eV erzeugt. Mit den daraus resultierenden 551 Messpunkten, der Statistik von $\bar{n} = 20\text{ Mio.}$ pro Messpunkt der vier zu vermessenden Säulendichten und einer Rate der Elektronenkanone von 10^5 s^{-1} ergibt sich eine Gesamtmeszeit von

$$\frac{4 \cdot 551 \cdot 20 \cdot 10^6}{10^5 \text{ s}^{-1}} = 440800 \text{ s} \approx 5.1 \text{ d.} \quad (7.1)$$

Diese Messzeit enthält noch keinerlei „Overhead“, der sich z.B. aus den notwendigen Zeiten zur Änderung der Retardierungsspannung oder der Änderung der Säulendichte in der Tritiumquelle ergibt.

Zur Reduzierung der Messzeit hat man nun die Möglichkeit, die Statistik \bar{n} zu erniedrigen und/oder die Abstände zwischen den Messpunkten zu erhöhen. Um zu überprüfen, welche Kombination der beiden Möglichkeiten noch eine Entfaltung der Energieverlustfunktion gewährleistet, die der KATRIN-Anforderung genügt, werden in Simulationen alle Kombinationen von Statistiken $\bar{n} = (2.5, 5, 10, 20)\text{ Mio.}$ mit den Messpunktabständen $(0.1, 0.2, 0.5)\text{ eV}$ getestet. Abbildung 7.1 zeigt die nach dem Verfahren aus Abschnitt 5.1 ermittelten absoluten systematischen Unsicherheiten, die durch die Entfaltung induziert werden. Dort erkennt man grundsätzlich, dass für größere Messzeiten (berechnet nach (7.1)) kleinere Unsicherheiten $|\Delta m_{\nu_e}^2|$ resultieren. Bereits ab etwa $1.1 \cdot 10^5 \text{ s} \approx 1.3 \text{ d}$ sind hier mit den Binbreiten 0.1 eV und 0.2 eV Resultate zu erwarten, die die Anforderung erfüllen.

Des Weiteren sind die Ergebnisse für kleinere Messpunktintervalle bei gleicher Messzeit tendenziell besser. Es empfiehlt sich daher die 0.1 eV -Intervalle zu verwenden.

7.2 Verfahren zur Optimierung der Messzeitverteilung

Die bisher gezeigten simulierten Messergebnisse für die Antwortfunktion wurden stets mit gleichgroßen Messzeiten für alle Messpunkte erzeugt. Eine solche Gleichverteilung stellt im Allgemeinen nicht die ideale Wahl dar, um in der zur Verfügung stehenden

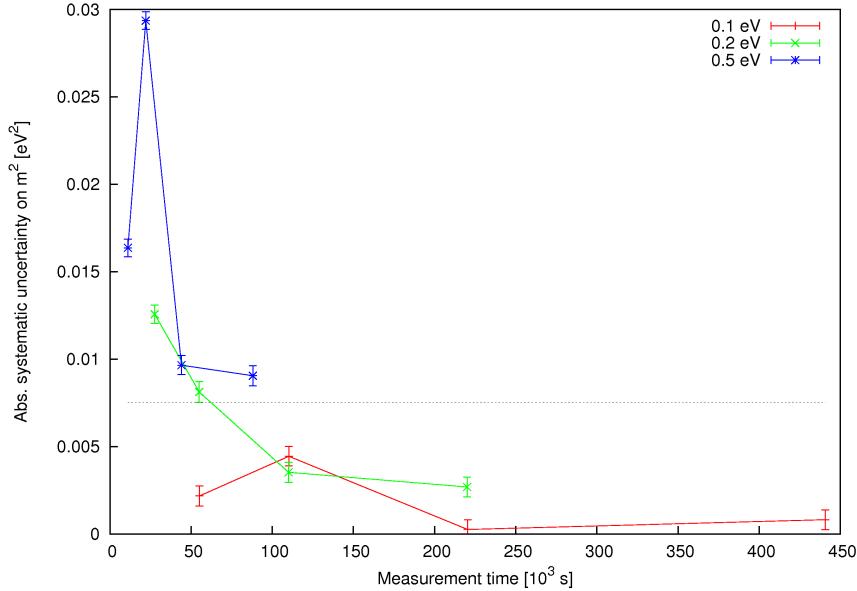


Abbildung 7.1: Dargestellt sind die Ergebnisse für $|\Delta m_{\nu_e}^2|$ für verschiedene Messzeiten der zugrundeliegenden Antwortfunktionen. Die Farben kennzeichnen unterschiedliche Abstände der Messpunkte. Die verwendeten Statistiken simulierter Elektronen pro Messpunkt betragen bei jeder Serie von links nach rechts: (2.5, 5, 10, 20) Mio. Die gestrichelte Linie zeigt die KATRIN-Anforderung von $\Delta m_{\nu_e}^2 < 0.0075 \text{ eV}^2$.

Gesamtmesszeit eine Antwortfunktion aufzunehmen, die die induzierte systematische Unsicherheit der quadratischen Neutrinomasse $\Delta m_{\nu_e}^2$ minimiert, da sich statistische Unsicherheiten in bestimmten Bereichen der Antwortfunktion u.U. stärker auf das Entfaltungsergebnis auswirken als in anderen. Ein Verfahren zum Auffinden einer verbesserten Messzeitverteilung wird daher benötigt.

7.2.1 Beschreibung des Verfahrens

Um eine optimale Messzeitverteilung zu finden, wird ein iteratives Verfahren getestet, das ausgehend von einer Gleichverteilung $T_0 = \{t_{0,1}, t_{0,2} \dots t_{0,N}\}$ mit den Messzeiten $t_{0,1} = t_{0,2} = \dots = t_{0,N}$ und zugehörigem $|\Delta m_{\nu_e}^2(T_0)|$ nach neuen Messzeitverteilungen $T_i = \{t_{i,1}, t_{i,2}, \dots, t_{i,N}\}$ mit $i = (1, 2, \dots)$ und $|\Delta m_{\nu_e}^2(T_i)| < |\Delta m_{\nu_e}^2(T_0)|$ sucht. Die Anzahl der Messzeiten N wird dabei deutlich kleiner gewählt, als die verwendete Anzahl von Messpunkten $N' = 551$ der Standardsimulation, was zur Folge hat, dass mehrere aufeinanderfolgende Messpunkte identische Messzeiten bekommen.

Bei dem Verfahren werden in einem ersten Schritt „Zwischenverteilungen“ $\tau_{i,k}$ mit $k = 1, \dots, N$ erzeugt, die im Wesentlichen der Ausgangsverteilung T_i entsprechen und nur im k -ten Eintrag eine um den Faktor a erhöhte Messzeit aufweisen:

$$\tau_{i,k} = \{t_{i,1}, \dots, a \cdot t_{i,k}, \dots, t_{i,N}\}. \quad (7.2)$$

Dabei werden üblicherweise kleine Erhöhungen wie beispielsweise $a = 1.1$ verwendet. Danach wird für jede Verteilung $\tau_{i,k}$ der Wert $\Delta m_{\nu_e}^2(\tau_{i,k})$ ermittelt. Dies geschieht fol-

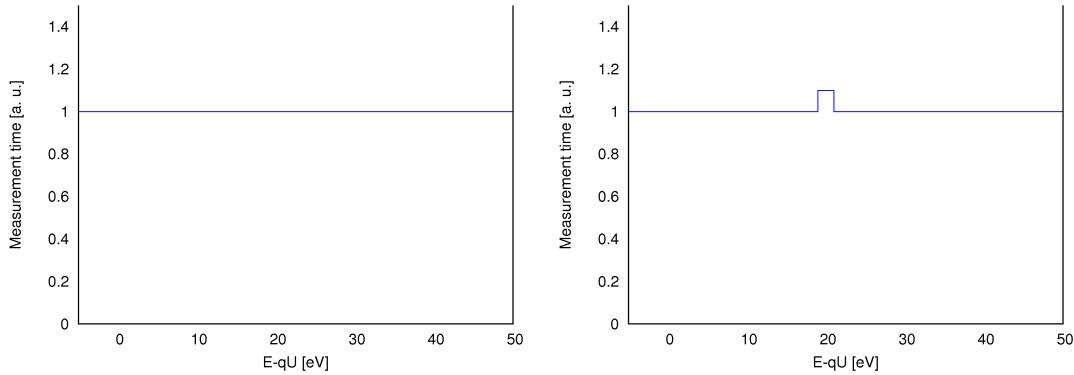


Abbildung 7.2: Zur Veranschaulichung: Schematische Darstellung der Anfangsverteilung T_0 (links) und einer daraus generierten Testverteilung $\tau_{0,k}$ (rechts).

gendermaßen:

1. Für jede Verteilung $\tau_{i,k}$ werden Antwortfunktionen bei den Säulendichten $\rho d = (0, 0.5, 3, 6) \cdot 10^{17} \text{ cm}^{-2}$ generiert. Dazu wird die erwartete Anzahl n' der transmittierten Elektronen für alle Energiebins (bezeichnet mit dem Index j) durch Herunterskalieren der Ereigniszahl aus der Standardsimulation mit einer Statistik von 20 Mio. bestimmt. Der Skalierungsfaktor ist also $t_{i,j}/t_j^*$ mit t_j^* als Messzeit des j -ten Intervalls der Standardsimulation. Um einen statistischen Fehler hinzuzufügen, wird die tatsächliche Anzahl n der transmittierten Elektronen zufällig aus einer Gaußverteilung mit Mittelwert n' und $\sigma = \sqrt{n'}$ ermittelt. Daraufhin werden die 551 Energiebins auf ihre jeweilige Messzeit normiert, um wieder Intensitäten zu erhalten. Bei diesem Vorgehen wird der statistische Fehler, der bereits in der Standardsimulation enthalten ist, vernachlässigt. Damit dies gerechtfertigt ist, werden die Messzeiten $t_{0,j} \ll t_j^*$ gewählt. Auf die beschriebene Art und Weise können in kurzer Zeit simulierte Antwortfunktionen für die zahlreichen $\tau_{i,k}$ generiert werden, ohne die Simulation explizit durchzuführen.
2. Mit den erhaltenen Antwortfunktionen bzw. deren Folgeergebnissen wird die Matrixinversion, Singulärwertzerlegung und die Bestimmung der systematischen Unsicherheit, wie in Abschnitt 5.1 beschrieben, durchgeführt.

Mit den berechneten $\Delta m_{\nu_e}^2(\tau_{i,k})$ kann nun die Differenz

$$D_k = |\Delta m_{\nu_e}^2(T_i)| - |\Delta m_{\nu_e}^2(\tau_{i,k})| \quad (7.3)$$

als Maß für die Veränderung der systematischen Unsicherheit $\Delta m_{\nu_e}^2$ durch die Erhöhung der Messzeit im k -ten Intervall eingeführt werden. Sie wird dabei gleich Null gesetzt, wenn $D_k < 0$ ist, da es unsinnig erscheint, dass das Ergebnis bei einer Erhöhung der Messzeit schlechter wird. Ein solches Ergebnis muss also auf numerische und statistische Fluktuationen zurückzuführen sein.

Die neuen Messzeiten $t_{i+1,j}$ der Messzeitverteilung T_{i+1} berechnen sich dann nach

$$t_{i+1,j} = (1 + D_j \cdot s) \cdot t_{i,j} \quad (7.4)$$

mit s als frei wählbarer Schrittweite des Verfahrens. Zuletzt wird die so erhaltene Messzeitverteilung T_{i+1} auf die Gesamtzeit der Verteilung T_i normiert. Mit T_{i+1} kann nun eine weitere Iteration gestartet werden.

7.2.2 „Bump“-Analyse

Für das Verfahren zur Messzeitverteilung muss die induzierte systematische Unsicherheit der quadratischen Neutrinomasse $\Delta m_{\nu_e}^2$ für viele verschiedene Entfaltungen der Energieverlustfunktion berechnet werden, was aufgrund des in Abschnitt 5.1.4 beschriebenen Vorgehens viel Zeit in Anspruch nimmt. Es wäre daher wünschenswert, ein einfaches Maß für die Qualität der Entfaltung zu konstruieren, das ähnliche Aussagen wie die induzierte Unsicherheit macht. Dazu soll untersucht werden, welche Bereiche der Energieverlustfunktion besonderen Einfluss auf $\Delta m_{\nu_e}^2$ haben.

Es wird deshalb in der Standardentfaltung der Energieverlustfunktion mit dem Schwellwert $\sigma_{\text{th}} = 0.27\% \cdot \sigma_{\max}$ jeweils eine Erhebung (engl. *bump*) an verschiedenen Stellen eingebaut, um so einen Satz von modifizierten Energieverlustfunktionen zu erzeugen, für die anschließend jeweils $\Delta m_{\nu_e}^2$ berechnet wird. Wählt man als Breite der Erhebung 0.5 eV und als Höhe 0.025, so ergeben sich für verschiedene Positionen des „Bumps“ die in Abbildung 7.3 dargestellten Werte für $\Delta m_{\nu_e}^2$. Man erkennt, dass der Einfluss auf die

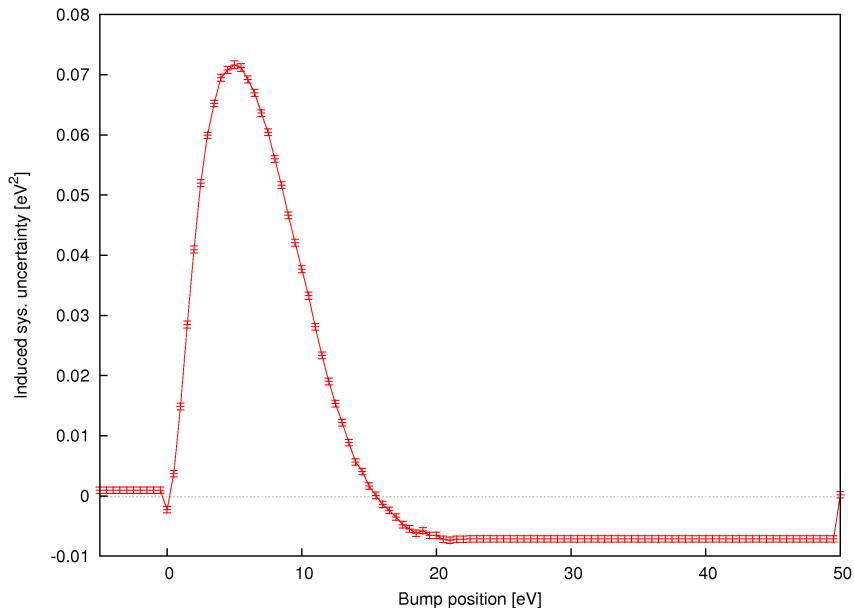


Abbildung 7.3: Dargestellt sind die Ergebnisse für $\Delta m_{\nu_e}^2$ für verschiedene Positionen von künstlichen Erhebungen in der Energieverlustfunktion. Die gestrichelte Linie zeigt $\Delta m_{\nu_e}^2$ der Entfaltung ohne Modifikationen.

quadratische Neutrinomasse im Bereich um ca. 7 eV besonders groß ist und zu den Seiten in einem gaußähnlichen Verlauf abflacht. Bei niedrigen Energien führt die beschriebene Störung zu einer kleinen systematischen Verschiebung zu höheren Neutrinomassen, während sie bei größeren Energien eine Verschiebung zu kleineren Neutrinomassen bewirkt.

Fasst man w_i als die Funktionswerte des Graphen aus Abbildung 7.3 auf, so kann man ausgehend von Gleichung (5.15) eine modifizierte euklidische Norm

$$\sqrt{\sum_i [w_i(y_{i,m} - y_{i,e})]^2} \quad (7.5)$$

konstruieren, in der die Differenzen zwischen Entfaltung und Modell mit den w_i gewichtet werden. Zur Beurteilung, welche Messzeitverteilungen zu einer besonders kleinen systematischen Unsicherheit $\Delta m_{\nu_e}^2$ führen, erwies sich jedoch auch die modifizierte euklidische Norm nicht als zuverlässiges Maß. Für die Optimierung der Messzeitverteilung wurde daher für jede Modifikation $\Delta m_{\nu_e}^2$ bestimmt.

7.2.3 Ergebnis

Das in Abschnitt 7.2.1 beschriebene Verfahren erweist sich als problematisch, da neben den beinhalteten statistischen Unsicherheiten vor allem numerisches Rauschen aus der Matrixinversion und der SVD die Ergebnisse verfälscht. So erkennt man nach wenigen Iterationen in der Regel keine klare Tendenz zu einer bestimmten Verteilung T_i , sondern erhält eine verrauschte Version der Ausgangsverteilung. Um zu überprüfen, ob sich derartige Effekte evtl. über viele Iterationen herausmitteln, wurden dennoch verschiedene Sätze von Parametern getestet und bis zu 50 Iterationen lang beobachtet. Mit den Parametern $a = 1.1$, $s = 50$ und $N = 56$ konnte eine Messzeitverteilung gefunden werden, die über stabile Charakteristika verfügt. Diese in Abbildung 7.4 dargestellte Verteilung verfügt über Peaks bei ca. 30 eV und 45 eV. Da diese Verteilung angesichts

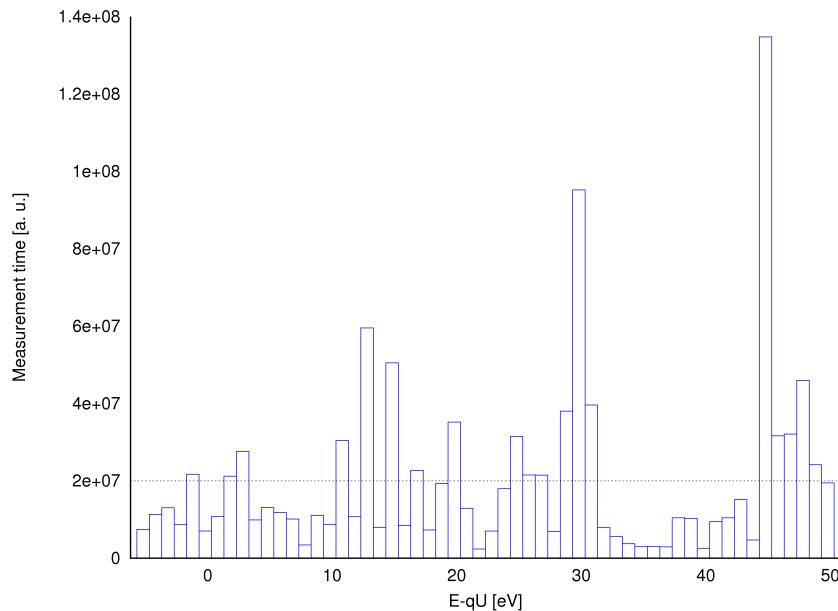


Abbildung 7.4: Dargestellt ist das auf eine Statistik von 20 Mio. normierte Ergebnis des beschriebenen Verfahrens. Die gestrichelte Linie zeigt die entsprechende Gleichverteilung.

der Form der Antwortfunktion, die bei 30 eV und 45 eV einen eher glatten Verlauf hat,

als willkürlich erscheint, wird zur Überprüfung eine vollständige Simulation mit dieser Verteilung durchgeführt¹. Die Energieverlustfunktion, die mithilfe dieser Simulation bestimmt wurde, liefert die systematische Unsicherheit

$$\Delta m_{\nu_e}^2 = (0.0023 \pm 0.0006) \text{ eV}^2 \quad (7.6)$$

und ist damit qualitativ schlechter als das Ergebnis aus der Gleichverteilung.

Das Verfahren ist somit unbrauchbar, um eine verbesserte Messzeitverteilung für die Antwortfunktion zu finden. Auch leicht modifizierte Verfahren führen hier zu keiner Verbesserung. So wurde bspw. eine auf unser Problem angepasste Version des Verfahrens getestet, das zur Bestimmung der Messzeitverteilung in der Endpunktsregion des β -Spektrums benutzt wurde [Kas08]. Auch hier offenbarten sich die gleichen numerischen Probleme.

¹Diese Simulation basiert nicht auf einer herunterskalierten Version der Simulation mit einer Gleichverteilung von 20 Mio. e^-/bin !

8 Messung der Säulendichte

Da die Antwortfunktion über die Streuwahrscheinlichkeiten von der Säulendichte ρd abhängt und unmittelbar die Observable $m_{\nu_e}^2$ beeinflusst (vgl. Kapitel 4), ist es nötig während der Tritium-Messungen von KATRIN ρd zu überwachen, um etwaige Veränderungen über einen längeren Zeitraum zu beobachten und ungewollte Verschiebungen von $m_{\nu_e}^2$ zu verhindern. Dies geschieht durch zwischenzeitliche e-gun-Messungen, bei denen die Transmission der Elektronen nur für einige wenige Energien $\delta E_i = E_e - qU_i$ mit der Startenergie E_e gemessen wird. Da die Form der Antwortfunktion durch die Säulendichte definiert wird, ist es möglich diese durch Messung zweier Intensitäten bei verschiedenen Retardierungsspannungen zu bestimmen. Um die Zeit für die eigentlichen Messungen so wenig wie möglich zu beschneiden, sollten diese Messungen nur etwa 2 Minuten in Anspruch nehmen und nur etwa alle 2 Stunden durchgeführt werden [KAT04]. Dies setzt voraus, dass die Säulendichteschwankungen über 2 h klein gehalten werden können. Ist dies nicht der Fall, muss häufiger gemessen werden. Wenn es möglich ist, die absolute Intensität der Elektronenkanone mit hinreichender Genauigkeit zu messen und stabil zu erhalten, lässt sich die Säulendichte auch aus einem einzigen Messpunkt $\delta E_1 = E_e - qU_1$ bestimmen, mit entsprechender Zeitersparnis.

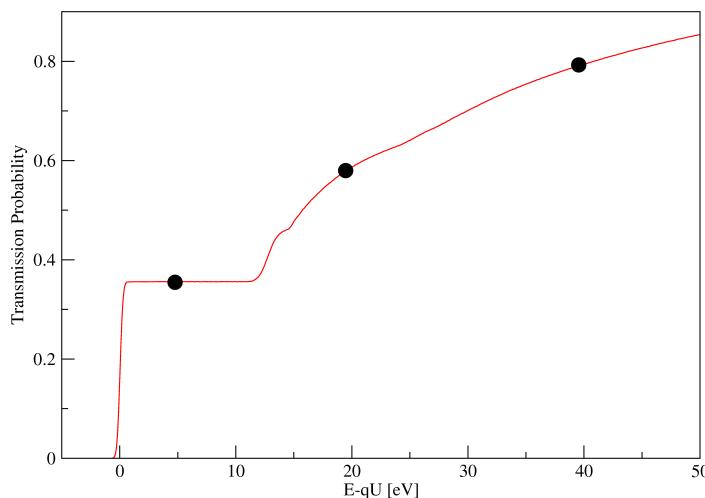


Abbildung 8.1: Schematische Ansicht der Säulendichthemessung. Dargestellt sind die Transmissionswahrscheinlichkeiten für verschiedene Überschussenergien δE_i (Punkte). Die Säulendichte lässt sich mithilfe zweier Messpunkte bestimmen.

Wie in Abbildung 8.2 ersichtlich, können Veränderungen von ρd von einigen 10^{-3} über die gesamte Messzeit leicht zu inakzeptablen systematischen Unsicherheiten von $m_{\nu_e}^2$ führen. Möchte man die induzierte Unsicherheit kleiner halten als die Obergrenze $\Delta m_{\nu_e}^2 = 0.0075 \text{ eV}^2$, welche bei KATRIN für die einzelnen experimentellen Parameter wie ρd festgelegt wurde, so führt dies zu einer Genauigkeitsanforderung von $\Delta \rho d / \rho d < 2 \cdot 10^{-3}$ für Messungen innerhalb der ersten 40 eV unterhalb der Endpunktssnergie.

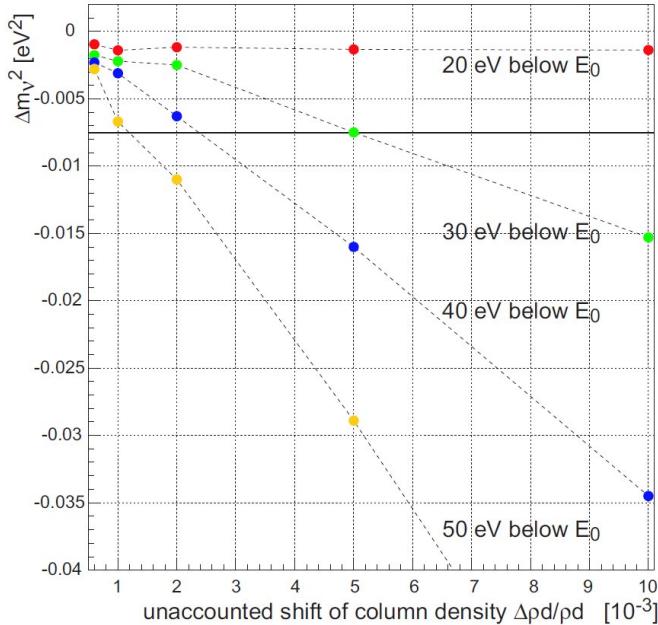


Abbildung 8.2: Abgebildet ist die induzierte systematische Unsicherheit $\Delta m_{\nu_e}^2$ als Funktion der Säulendichtheveränderung $\Delta \rho d / \rho d$ für verschiedene Messintervalle. Quelle: [KÄT04].

In diesem Kapitel soll die Möglichkeit der Säulendichthebestimmung durch einen Fit untersucht werden.

8.1 Beschreibung des Fits

Ein naheliegender Ansatz zur Bestimmung der Säulendichte aus Messungen der Intensität bei verschiedenen Retardierungsenergien ist das Fitten der Funktion

$$f_{\text{res}}(E, qU) = A(P_0 \cdot \epsilon_0(\Delta E) + P_1 \cdot \epsilon_1(\Delta E) + P_2 \cdot \epsilon_2(\Delta E) + P_3 \cdot \epsilon_3(\Delta E)) \quad (8.1)$$

mit

$$P_k(\mu(\Theta)) = \int_0^{\Theta_{\max}} f(\Theta) \frac{\mu(\Theta)^k}{k!} e^{-\mu(\Theta)} d\Theta \quad \text{und} \quad \mu(\Theta) = \frac{\rho d}{(\rho d)_{\text{frei}} \cdot \cos \Theta}. \quad (8.2)$$

Die Säulendichte ρd geht hierbei als Fitparameter ein. Der zweite Fitparameter ist A , ein Skalierungsfaktor, der die fehlende Normierung der eingebenen Intensitäten berücksichtigt. Die Streufunktionen ϵ_i ($i = 1, 2, 3$) sind aus der Matrixinversion zur Messung der

Energieverlustfunktion (s. Kapitel 4) bekannt. Da sie jedoch nur aus diskreten Punkten bestehen, werden sie für den Fit linear interpoliert, um eine kontinuierliche Funktion zu erzeugen. Als Winkelverteilung wird einmal mehr die isotrope Verteilung $f(\Theta) = \sin \Theta$ mit $\Theta_{S,\max} = 10.1^\circ$ verwendet. Durch Gleichung (8.1) werden keine winkeländernden Stöße berücksichtigt. Außerdem wird i -fache Streuung mit $i \geq 4$ vernachlässigt.

8.2 Ergebnisse

Der Fit wird nun an einer Simulation mit der Standardsäulendichte für die Tritium-Messungen von $\rho d = 5 \cdot 10^{17} \text{ cm}^{-2}$ getestet. Es wird davon ausgegangen, dass mit einer Elektronenkanone, die $1 \cdot 10^5 \text{ e}^-/\text{s}$ liefern kann, innerhalb von 2 Minuten an drei verschiedenen Punkten gemessen wird. Deshalb wird für die Simulation eine Statistik von

$$N = \frac{1 \cdot 10^5 \frac{1}{\text{s}} \cdot 120 \text{ s}}{3} = 4 \cdot 10^6 \quad (8.3)$$

pro Messpunkt gewählt. Der Fit wird dann mit allen Zweier- und Dreierkombinationen aus den Werten $\{5, 10, 20, 30, 40\} \text{ eV}$ als Wahl für die Überschussenergien durchgeführt, um zu überprüfen, welche Wahl von Messpunkten geeignet ist und ob zwei Messpunkte evtl. ausreichen.

In Tabelle 8.1 sind die Ergebnisse gezeigt. Dort ist auch die relative Unsicherheit des Fits

$$\frac{u_{\rho d}}{\rho d} \quad (8.4)$$

mit $u_{\rho d}$ als absolutem Fehler des Fits, die eine Abschätzung der statistischen Unsicherheit erlaubt, und die relative Abweichung von der Simulation

$$\frac{\Delta \rho d}{\rho d} = \frac{\rho d_{\text{fit}} - \rho d_{\text{sim}}}{\rho d_{\text{sim}}} \quad (8.5)$$

angegeben. Man sieht, dass die Unsicherheit für einige Messpunkt-kombinationen Werte annimmt, die kleiner sind als $2 \cdot 10^{-3}$. Die besten Ergebnisse werden hier mit $(10, 40) \text{ eV}$ bei den Zweierkombinationen und $(10, 20, 40) \text{ eV}$ bei den Dreierkombinationen erzielt. Darüber hinaus erkennt man, dass fast alle Ergebnisse um einige 10^{-3} unterhalb der tatsächlichen Säulendichte liegen. Dies deutet auf einen systematischen Fehler zu kleineren Säulendichten bei dieser Methode hin.

Um genauere Ergebnisse zu erhalten, kann man die Statistik auf Kosten der Messzeit erhöhen. Dabei stellt man fest, dass die oben genannten Kombinationen auch hier die besten Ergebnisse liefern. Einige davon sind in Tabelle 8.2 dargestellt. Erwartungsgemäß sind die Unsicherheiten hier kleiner und liegen im Bereich 0.8 bis $1.3 \cdot 10^{-3}$. Zwar liefert die Messpunktwahl $(10, 20, 40) \text{ eV}$ bei gleicher Statistik stets bessere Ergebnisse als die Wahl $(10, 40) \text{ eV}$, betrachtet man jedoch zusätzlich die Messzeiten, stellt man fest, dass beide durchaus ähnlich effizient sind. So ergibt sich mit der Zweierkombination bei einer Messzeit von etwa 200 s eine Unsicherheit von $0.99 \cdot 10^{-3}$, während die Dreierkombination bei vergleichbaren 180 s die Genauigkeit $1.11 \cdot 10^{-3}$ liefert. Da eine gewisse Zeit für die Änderung der Spannung notwenig ist, ist die Kombination $(10, 40) \text{ eV}$ zu bevorzugen. Zusammenfassend kann gesagt werden, dass mit diesem Verfahren die Säulendichte mit einer Genauigkeit bestimmt werden kann, die ausreichend für das KATRIN-Experiment

Wahl der Messpunkte [eV]	Fitergebnis [10^{17} cm^{-2}]	Rel. Unsicherheit des Fits [$\pm 10^{-3}$]	$\frac{\Delta \rho d}{\rho d} [10^{-3}]$
5, 10	5.8312	71.15	166.24
5, 20	5.0015	5.27	0.30
5, 30	4.9941	3.18	-1.18
5, 40	4.9873	2.13	-2.54
10, 20	4.9527	4.19	-9.45
10, 30	4.9639	2.40	-7.22
10, 40	4.9668	1.56	-6.64
20, 30	4.9817	5.38	-3.65
20, 40	4.9767	2.27	-4.65
30, 40	4.9727	3.61	-5.45
5, 10, 20	4.9692	3.71	-6.14
5, 10, 30	4.9737	2.10	-5.25
5, 10, 40	4.9733	1.36	-5.33
5, 20, 30	4.9917	3.00	-1.66
5, 20, 40	4.9824	1.70	-3.51
5, 30, 40	4.9844	2.00	-3.11
10, 20, 30	4.9648	2.39	-7.04
10, 20, 40	4.9693	1.44	-6.14
10, 30, 40	4.9671	1.55	-6.58
20, 30, 40	4.9761	2.19	-4.78

Tabelle 8.1: Fitergebnisse der Säulendichte für verschiedene Kombinationen von Messpunkten bei einer Statistik von $4 \cdot 10^6$, die einer Messzeit von 120 s (3 Punkte) bzw. 80 s (2 Punkte) entspricht. Zusätzlich angegeben ist die relative Unsicherheit des Fits und die relative Abweichung zu der in der Simulation eingestellten Säulendichte von $\rho d = 5 \cdot 10^{17} \text{ cm}^{-2}$.

Wahl der Messpunkte [eV]	Statistik N [10^6]	Messzeit [s]	Fitergebnis [10^{17} cm^{-2}]	Rel. Unsicherheit des Fits [$\pm 10^{-3}$]	$\frac{\Delta \rho d}{\rho d} [10^{-3}]$
10, 40	6	120	4.9767	1.28	-4.67
10, 20, 40	6	180	4.9822	1.11	-3.56
10, 40	8	160	4.9839	1.10	-3.21
10, 20, 40	8	240	4.9895	0.96	-2.10
10, 40	10	200	4.9805	0.99	-3.90
10, 20, 40	10	300	4.9871	0.86	-2.68

Tabelle 8.2: Fitergebnisse der Säulendichte für die Messpunkt-kombinationen (10, 40) eV und (10, 20, 40) eV für verschiedene Statistiken. Die entsprechenden Messzeiten sind für eine e-gun mit einer Rate von $1 \cdot 10^5 \frac{1}{\text{s}}$ angegeben.

ist. Die vorhandene Abweichung zur Simulation übersteigt den Wert von $2 \cdot 10^{-3}$ zwar in den meisten Fällen, allerdings ist diese Größe auch nur bei der Bestimmung von absoluten Säulendichten von ausschlaggebender Bedeutung. Für einen kleinen Beitrag zur systematischen Unsicherheit von $m_{\nu_e}^2$ bei KATRIN ist in erster Linie jedoch die Stabilität der Säulendichte entscheidend, welche hier mit einer Genauigkeit festgelegt werden kann, die durch die Unsicherheit des Fits definiert wird.

8.3 Systematische Abweichungen des Fits

Um die Ursache der systematischen Verschiebung in den Ergebnissen zu klären, wurde zunächst die Näherung der nichtberücksichtigten winkeländernden Stöße untersucht. Dazu wurde die Simulation erneut durchgeführt, wobei bei jeder Streuung der Winkel beibehalten wurde. Die neu erhaltenen Streufunktionen ϵ_i , die anschließend durch Matrixinversion berechnet wurden, wurden dann für die Fitfunktion (8.1) verwendet und die ebenfalls erhaltene Antwortfunktion damit gefittet. Es wurde dabei mit einer Statistik von 20 Mio. Elektronen pro Energieintervall simuliert, um statistische Fehler soweit wie möglich zu unterdrücken. Der Vergleich des Fits mit dem Fit der Antwortfunktion gleicher Statistik, der Winkeländerungen beinhaltet, zeigte keine Verbesserung des Ergebnisses. In beiden Fällen lagen die relativen Abweichungen im Bereich um $-3 \cdot 10^{-3}$. Zur weiteren Untersuchung wurde ein neuer Satz von Simulationen mit den Säulendichten $j \cdot 10^{17} \text{ cm}^{-2}$ mit $j = (0.5, 2, 4, 6)$ benutzt, um bei der Matrixinversion mit der nun 4-dimensionalen Matrix auch die Streufunktion für vierfache Streuung ϵ_4 zu erhalten. Nach entsprechender Modifikation der Fitfunktion zeigten sich in den Ergebnissen jedoch keine nennenswerten Veränderungen zum obigen Verfahren. Offenbar ist die Berücksichtigung von lediglich j -facher Streuung mit $j = (0, 1, 2, 3)$ auch in diesem Fall eine gute Näherung.

Darüber hinaus wurden die Streufunktionen für den Fit verwendet, die man direkt aus der Simulation erhält, um eventuelle Einflüsse der Matrixinversion zu umgehen. Auch hier zeigte sich die übliche Tendenz zu kleineren Säulendichten.

Der Grund für die systematischen Abweichungen bleibt damit unklar.

9 Zusammenfassung und Ausblick

Das Karlsruhe Tritium Neutrino (KATRIN) Experiment wird den Endpunktbereich des Tritium- β -Spektrums hochpräzise vermessen und eine direkte Bestimmung der Masse des Elektronantineutrinos im sub-eV-Bereich ermöglichen. Die Messung einer Neutrino-masse von 0.35 eV kann dabei mit einer Signifikanz von 5σ erfolgen. Wird kein Neutrino-massensignal festgestellt, kann eine neue Obergrenze von 0.2 eV (90% C. L.) angegeben werden. Um eine solche Genauigkeit zu erzielen, müssen die systematischen Unsicherheiten aller Messgrößen möglichst klein gehalten werden. Zwei dieser Größen sind die Bestimmung der Energieverlustfunktion $f(\Delta E)$ und die Stabilität der Säulendichte ρd in der Tritiumquelle.

In dieser Arbeit wurden zwei Verfahren zur Entfaltung der Energieverlustfunktion (SVD und BiCGstab(1)) in Simulationen getestet und optimiert. Für die Simulationen wurde dabei ein im Vergleich zu [Wol08] präziseres Modell der Wechselwirkung der Elektronen in der Quelle benutzt, das auch elastische Streuung der Elektronen verbunden mit gerin-gen Energieverlusten ($\lesssim 1$ eV) berücksichtigt. Für die Matrixinversion, mit der aus den simulierten Messungen die Einfachstreufunktion ϵ_1 errechnet wird, wurden die Determinanten überprüft. Dadurch konnten optimale Referenzsäulendichten von $j \cdot 10^{17} \text{ cm}^{-2}$ mit $j = 0.5, 3, 6$ für die Messung der Antwortfunktionen gefunden werden. Bei der anschlie-senden Entfaltung der Energieverlustfunktion aus ϵ_1 und der Transmissionsfunktion T durch die Singulärwertzerlegung (SVD) wurde mit $\sigma = 0.27\% \cdot \sigma_{\max}$ ein idealer Schwell-wert ermittelt. Mit diesen Parametern und einer Statistik von 20 Mio. simulierter Elek-tronen pro 0.1 eV-Bin beträgt der durch $f(\Delta E)$ hervorgerufene Beitrag zur systemati-schen Unsicherheit der quadratischen Neutrinomasse $\Delta m_{\nu_e}^2 = (8.2 \cdot 10^{-4} \pm 5.7 \cdot 10^{-4}) \text{ eV}^2$ und ist damit etwa eine Größenordnung kleiner als die Anforderung des KATRIN-Experiments. Darüber hinaus wurde das iterative BiCGstab(1)-Verfahren zur Entfaltung getestet, das diese Genauigkeit jedoch nicht erreicht.

Bei der genannten hohen Statistik von 20 Mio. Elektronen pro Messpunkt werden für die Gesamtmessung netto 5.1 Tage benötigt (ohne Overhead für die Wechsel der Re-tardierungsspannung oder der Säulendichte). Eine verkürzte Messzeit, die dennoch eine Bestimmung der Energieverlustfunktion ermöglicht, die den KATRIN-Anforderungen genügt, beträgt netto etwa 1.3 Tage. Damit ist die benötigte Messzeit aller Voraussicht nach wesentlich kleiner als die bisher eingeplanten vier Wochen. Die Frage nach einer verbesserten Messzeitverteilung mit individuell angepassten Messintervallen konnte im Rahmen dieser Arbeit nicht geklärt werden und stellt in Zukunft eine Möglichkeit zur weiteren Verbesserung des Messprozesses dar.

Um die Stabilität der Säulendichte in der Tritiumquelle bei KATRIN zu gewährleisten, werden regelmäßig Messungen der transmittierten Elektronen bei verschiedenen Retar-dierungsspannungen durchgeführt. In dieser Arbeit wurde eine Methode zur Verfü-gung gestellt, die in der Lage ist, aus diesen Messungen die Stabilität der Säulendichte mit einer Genauigkeit von $< 2 \cdot 10^{-3}$ zu überprüfen. Zudem konnte eine optimale Wahl von

Messpunkten bei 10 eV und 20 eV Überschussenergie bestimmt werden.

Insgesamt konnten mit dieser Arbeit also neue Methoden zur Bestimmung der Energieverlustfunktion und der Säulendichte entwickelt und die vorhandenen Messprozeduren verbessert werden.

Abbildungsverzeichnis

2.1	Schematische Darstellung des gewöhnlichen und des neutrinolosen Doppel- β -Zerfalls	7
3.1	Eigenwerte der Neutrinomassen als Funktion der kleinsten Neutrinomasse m_1 für normale Hierarchie	10
3.2	Tritium- β -Spektrum	11
3.3	Experimenteller Aufbau des KATRIN-Experiments	12
3.4	Schematische Ansicht der Quelle	13
3.5	Säulendichte beim KATRIN-Experiment	14
3.6	Schematische Zeichnung des KATRIN-Hauptspektrometers	15
3.7	Analytische Transmissionsfunktion	17
4.1	Modell der Energieverlustfunktion	20
4.2	Transmissionsfunktion T_{egun}	21
4.3	Beispiel einer Antwortfunktion	22
4.4	Streufunktionen	23
4.5	Schematische Darstellung von Parabel-, Morse- und realem Potential . .	28
4.6	Schematische Darstellung der Rotations- und Vibrationsniveaus	29
5.1	Für die Matrixinversion verwendete Antwortfunktionen	34
5.2	Durch Matrixinversion ermittelte Streufunktionen	35
5.3	Entfaltete Energieverlustfunktion	37
5.4	Zur Ermittlung der systematischen Unsicherheit verwendete Funktionen	38
5.5	Systematische Unsicherheit durch Entfaltung	39
5.6	Ermittlung eines idealen Schwellwertes	40
5.7	Streufunktionen ohne Energieverlust	42
5.8	Antwortfunktionen ohne Energieverlust	43
5.9	Systematische Unsicherheiten unter Berücksichtigung der Korrekturfaktoren	44
5.10	Ergebnis der Demonstrations-Simulation	45
6.1	Berechnungsschema des BiCGstab(2)-Algorithmus	50
6.2	Entfaltete Energieverlustfunktion mit BiCGstab(1)	53
6.3	Vergleich von Entfaltungen mit und ohne geringen Energieverlusten . .	54
6.4	Abschnittsweise SVD	55
7.1	$ \Delta m_{\nu_e}^2 $ für verschiedene Messzeiten	58
7.2	Schematische Darstellungen von Messzeitverteilungen	59

7.3	Einfluss von Störungen an verschiedenen Stellen der Energieverlustfunktion auf $\Delta m_{\nu_e}^2$	60
7.4	Ergebnis der Messzeitoptimierung	61
8.1	Schematische Ansicht der Säulendichthemessung	63
8.2	Systematische Unsicherheit $\Delta m_{\nu_e}^2$ als Funktion der Säulendichtheveränderung	64

Literaturverzeichnis

- [Aha05] B. Aharmim et al., Phys. Rev. C **72** (2005)
- [Ahm03] S. N. Ahmed et al., nucl-ex/0309004 (2003)
- [Ahn06] M. H. Ahn et al. (K2K Collaboration), Phys. Rev. D **74**, 072003 (2006),
[arXiv:hep-ex/0606032v3](https://arxiv.org/abs/hep-ex/0606032v3)
- [Alt03] C. Weinheimer, Laboratory Limits on Neutrino Masses,
in: G. Altarelli and K. Winter (Eds.), Neutrino Mass, Springer-Verlag, 2003
- [Ase00] V. N. Aseev et al., Eur. Phys. J. F **10** (2000) 39
- [Cha14] J. Chadwick, Verh. d. Deutsch. Phys. Ges. **16** (1914) 383
- [Dan62] G. Danby et al., Phys. Rev. Lett. **9** (1962) 36
- [Dem09] W. Demtroeder, Experimentalphysik 3 - Atome, Moleküle und Festkörper,
Springer-Verlag, 2009
- [Fle72] R. Fletcher, Numerical Analysis Dundee, ed. G. Watson (1975), Vol 506 of Lecture Notes in Mathematics, Springer-Verlag, Berlin 1976
- [Fuk98] Y. Fukuda et al. (Super-Kamiokande Collaboration), Phys. Rev. Lett **81** (1998) 1562, [hep-ex/9807003](https://arxiv.org/abs/hep-ex/9807003)
- [Glu] F. Glück, vorliegender Programmcode
- [Glu03] F. Glück, Vortrag, 4. KATRIN-Kollaborationsmeeting (2003)
- [Hak97] H. Haken und H. C. Wolf, Molekülphysik und Quantenchemie, Springer-Verlag, 1997
- [Han10] S. Hannestad et al., „Neutrino and axion hot dark matter bounds after WMAP-7“, JCAP 08 (2010) 001, arXiv:1004.0695
- [Hes52] R. Hestenes, E. Stiefel, J. Res. Nat. Bur. Stand., 49 (1952) 409
- [Hug08] K. Hugenberg, Diplomarbeit
Institut für Kernphysik, Westfälische Wilhelms-Universität Münster, 2008
- [Kam05] The KamLAND collaboration, Phys. Rev. Lett. **94** 081801 (2005),
[hep-ex/0406035v3](https://arxiv.org/abs/hep-ex/0406035v3)
- [Kas08] J. Kaspar, Dissertation, Czech Technical University In Prague, 2008

- [KAT04] The KATRIN Collaboration, KATRIN Design Report 2004
FZKA Scientific Report 7090
- [Kla06] H. V. Klapdor-Kleingrothaus, I. V. Krivosheina, Modern Physics Letters A Vol. 21, No. 20 (2006) 1547–1566
- [Kod01] K. Kodama et al. (DONUT Collaboration), Phys. Lett. **B504** (2001) 218
- [Kra03] Ch. Kraus, Dissertation, Institut für Physik, Universität Mainz (2003)
- [Kra05] Ch. Kraus, B. Bornschein, L. Bornschein, J. Bonn, B. Flatt, A. Kovalik, B. Ostrick, E. W. Otten, J.P. Schall, Th. Tümmler, Ch. Weinheimer, Eur. Phys. J. C 40 (2005) 447
- [Lob03] V. M. Lobashev, Nucl. Phys. A **719** 153c - 163c
- [Mee] MIT Electromagnetic Equation Propagation (Meep) Softwarepaket, <http://ab-initio.mit.edu/wiki/index.php/Meep>
- [Nak10] K. Nakamura et al. (Particle Data Group), Journal of Physics G **37** 075021 (2010)
- [Pau30] W. Pauli, Brief an die Physikalische Gesellschaft in Tübingen vom 4.12.1930, nachzulesen in L.M. Brown, Phys. Today **31** (1978) 23
- [Per75] M. L. Perl et al., Phys. Rev. Lett. **35** (1975) 1489
- [Rei59] R. Reines und C. L. Cowan, Phys. Rev. **113** (1959) 273
- [Rii11] A. S. Riis, Dissertation, Institut for Fysik og Astronomi, Aarhus Universitet (voraussichtlich 2011)
- [Saa03] Y. Saad, Iterative Methods for Sparse Linear Systems, 2nd edition, SIAM Society for Industrial & Applied Mathematics 2003
- [Sch97] N. Schmitz, Neutrino-physik, Teubner Verlag, 1997
- [Sle93] Gerard L. G. Sleijpen und Diederik R. Fokkema, „BiCGSTAB(L) for linear equations involving unsymmetric matrices with complex spectrum“, Electronic Trans. on Numerical Analysis 1, 11-32 (1993)
- [Uls72] R. C. Ulsh et al., J. Chem. Phys. **60**, No.1 (1974) 103
- [Val04] K. Valerius, Diplomarbeit
Helmholtz-Institut für Strahlen- und Kernphysik, Rheinische Friedrich-Wilhelms-Universität Bonn, 2004
- [Val09] K. Valerius, M. Beck, H. Arlinghaus, J. Bonn, V. M. Hannen, H. Hein, B. Ostrick, S. Streubel, Ch. Weinheimer and M. Zboril, A UV LED-based fast-pulsed photoelectron source for time-of-flight studies, New J. Phys. 11 063018 (2009) arXiv:0902.2305 [physics.ins-det].

[Wol08] I. Wolff, Diplomarbeit

Institut für Kernphysik, Westfälische Wilhelms-Universität Münster, 2008

[Zub04] K. Zuber, Neutrino Physics

Institute of Physics Publishing Bristol and Philadelphia, 2004

Eigenständigkeitserklärung

Ich versichere, dass ich diese Arbeit selbständig verfasst, keine anderen als die angegebenen Quellen und Hilfsmittel benutzt und Zitate kenntlich gemacht habe.

