



INSTITUT FÜR KERNPHYSIK

# Entfaltung der Energieverlustfunktion beim KATRIN Experiment

DIPLOMARBEIT

im Studiengang Physik

vorgelegt von

**Irina Wolff**

Juli 2008



# Inhaltsverzeichnis

<b>1</b>	<b>Einleitung</b>	<b>1</b>
<b>2</b>	<b>Grundlagen der Neutrinophysik</b>	<b>3</b>
2.1	Geschichtliche Entwicklung der Neutrinophysik . . . . .	3
2.2	Neutrinoquellen . . . . .	6
2.3	Bestimmung der Neutrinomasse . . . . .	7
2.4	Motivation für das KATRIN Experiment . . . . .	8
<b>3</b>	<b>Das KATRIN Experiment</b>	<b>10</b>
3.1	Das Tritium- $\beta$ -Spektrum . . . . .	10
3.2	Der MAC-E-Filter . . . . .	12
3.3	Der experimentelle Aufbau . . . . .	14
3.3.1	Die Tritiumquelle . . . . .	14
3.3.2	Das Transportsystem . . . . .	15
3.3.3	Die Spektrometer . . . . .	16
3.3.4	Der Detektor . . . . .	17
<b>4</b>	<b>Transmission der Elektronen</b>	<b>18</b>
4.1	Die Transmissionsfunktion . . . . .	18
4.2	Inelastische Streuung von Elektronen an molekularem Tritium . .	20
4.2.1	Anregung . . . . .	22
4.2.2	Ionisation . . . . .	24
4.2.3	Winkeländerung nach einem Stoß . . . . .	24
4.3	Berücksichtigung der Energieverluste . . . . .	25
4.3.1	Die Energieverlustfunktion . . . . .	25
4.3.2	Die Antwortfunktion . . . . .	26
<b>5</b>	<b>Experimentelle Bestimmung der Energieverlustfunktion</b>	<b>28</b>
5.1	Die Elektronenkanone . . . . .	28
5.2	Das Simulationsprogramm . . . . .	28
5.3	Vorgehensweise zur Bestimmung der Energieverlustfunktion . . .	33
5.3.1	Berechnung der Streuwahrscheinlichkeiten . . . . .	33
5.3.2	Messung der experimentellen Transmissionsfunktion . . .	35
5.3.3	Messungen der Antwortfunktionen . . . . .	36
5.3.4	Lösung des linearen Gleichungssystems . . . . .	39
5.4	Ergebnis . . . . .	44

<b>6</b>	<b>Entfaltung der Energieverlustfunktion</b>	<b>46</b>
6.1	Die stufenweise Entfaltung . . . . .	47
6.1.1	Test mit analytischen Funktionen . . . . .	47
6.1.2	Digitale Filter . . . . .	48
6.1.2.1	Bestimmung der Rauschfrequenzen . . . . .	51
6.1.2.2	Anwendung eines Tiefpassfilters . . . . .	54
6.1.3	Entfaltung der Energieverlustfunktion . . . . .	57
6.2	BiCG-Verfahren . . . . .	60
6.2.1	Iterative Lösungsverfahren . . . . .	60
6.2.2	Der CG-Algorithmus . . . . .	61
6.2.3	Der BiCG-Algorithmus . . . . .	63
6.2.4	Entfaltung der Energieverlustfunktion . . . . .	64
6.3	Die Singulärwertzerlegung . . . . .	65
6.3.1	Theoretische Grundlagen . . . . .	65
6.3.2	Lösung eines linearen Gleichungssystems . . . . .	66
6.3.3	Numerische Anwendung . . . . .	67
6.3.4	Entfaltung der Energieverlustfunktion . . . . .	68
6.4	Ergebnis . . . . .	70
<b>7</b>	<b>Vergleich der drei Entfaltungsmethoden</b>	<b>72</b>
7.1	Systematische Unsicherheiten . . . . .	72
7.2	Simulation und Analyse der Messungen des KATRIN Experimentes . . . . .	73
7.3	Analyse der entfalteten Energieverlustfunktionen . . . . .	75
7.4	Alternatives Modell zur Beschreibung der Energieverluste . . . . .	75
7.4.1	Beschreibung des Modells . . . . .	76
7.4.2	Entfaltung des Energieverlustspektrums . . . . .	76
7.4.3	Analyse des entfalteten Energieverlustspektrums . . . . .	77
7.5	Ergebnis . . . . .	78
<b>8</b>	<b>Zusammenfassung und Ausblick</b>	<b>80</b>
8.1	Zusammenfassung . . . . .	80
8.2	Ausblick . . . . .	81
<b>A</b>	<b>Anwendung der Simulations- und Analyseprogramme</b>	<b>83</b>
A.1	Simulationsprogramm . . . . .	83
A.2	Matrixinversion . . . . .	83
A.3	Stufenweise Entfaltung und Digitaler Filter . . . . .	84
A.4	BiCG-Methode . . . . .	84
A.5	Singulärwertzerlegung . . . . .	84
A.6	Analyseprogramm . . . . .	85
	<b>Literaturverzeichnis</b>	<b>86</b>
	<b>Danksagung</b>	<b>89</b>

# 1 Einleitung

Über einen langen Zeitraum wurden Neutrinos als masselose Teilchen betrachtet, bevor Neutrinooszillationsexperimente zeigen konnten, dass Neutrinos eine – wenn auch kleine – Masse tragen. Da Oszillationsexperimente nur auf die Differenzen der Neutrinomassenquadrate sensitiv sind, konnten sie zwar eine Untergrenze für die Neutrinomasse angeben, jedoch keine Aussage über die absolute Neutrinomasse machen. Obergrenzen für die Neutrinomasse wurden einerseits in Laborexperimenten (Mainz und Troitsk) bestimmt, ergeben sich aber auch aus kosmologischen Beobachtungsmessdaten und Modellbildungen.

Wegen der großen Anzahl von Neutrinos aus dem Urknall kann die genaue Kenntnis der Neutrinomasse einen Beitrag leisten, die Entwicklung des Universums und die Bildung von Strukturen auf großen Skalen zu verstehen. Zusätzlich hat sie eine große Bedeutung für die Elementarteilchenphysik jenseits des Standardmodells. Insgesamt gibt es eine Vielzahl von Motivationen für eine direkte Bestimmung der Neutrinomasse im Labor.

Derzeit wird das KATRIN (**K**arlsruhe **TR**itium **N**eutrino) Experiment aufgebaut mit dem Ziel, die Masse des Elektronantineutrinos mit einer Sensitivität im sub-eV-Bereich zu bestimmen. Bei dem Experiment wird wie bei den Vorgängerexperimenten in Mainz und Troitsk das Energiespektrum der Elektronen, die beim Tritium- $\beta$ -Zerfall entstehen, im Endpunktbereich untersucht. Aus der Kinematik des  $\beta$ -Zerfalls kann dann die Masse des Elektronantineutrinos modellunabhängig bestimmt werden.

Der Aufbau des KATRIN Experimentes setzt sich zusammen aus einer Tritiumquelle, einer Transport- und Pumpstrecke, Vor- und Hauptspektrometer sowie einem Detektor. Die Tritiumquelle ist eine 10 m lange Röhre, in deren Mitte molekulares Tritiumgas eingeleitet wird. Die  $\beta$ -Elektronen des Tritiumzerfalls entstehen überall in der Quelle und müssen auf dem Weg zu den Spektrometern und zum Detektor einen Teil der Quelle durchlaufen. Auf diesem Weg können sie Energie durch inelastische Stöße mit Tritiummolekülen verlieren und werden dann, falls sie transmittiert werden, am Detektor mit einer geringeren als ihrer Startenergie nachgewiesen.

Die Energieverlustprozesse der  $\beta$ -Elektronen in der Quelle liefern einen Beitrag zur gesamten systematischen Unsicherheit des KATRIN Experimentes, da sie zu einer Modifikation der gemessenen Spektren transmittierter Elektronen führen. Beschrieben werden die Energieverlustprozesse durch die Energieverlustfunktion  $f(\Delta E)$ , die mit experimentellen Methoden möglichst präzise bestimmt werden muss.

Ziel dieser Arbeit ist es, eine Methode zu entwickeln und zu testen, mit der sich

## 1 Einleitung

die Energieverlustfunktion aus den gemessenen Spektren extrahieren lässt. Die dazu benötigten Analysemethoden bilden den Kern der vorliegenden Arbeit.

## Gliederung der Arbeit

- Zu Beginn gibt Kapitel 2 einen Überblick über die theoretische und geschichtliche Entwicklung der Neutrinophysik.
- In Kapitel 3 wird zunächst erläutert, mit welcher Methode die Neutrinomasse aus dem Tritium- $\beta$ -Zerfall bestimmt werden kann. Danach wird das Prinzip des MAC-E-Filters beschrieben, bevor die einzelnen Komponenten des KATRIN Experimentes vorgestellt werden.
- Die mathematische Beschreibung der Transmission von Elektronen durch die analytische Transmissionsfunktion erfolgt in Kapitel 4. Weiterhin werden die Streuprozesse von Elektronen in der Tritiumquelle behandelt und die Antwortfunktion des KATRIN Experimentes näher erläutert, welche die Wechselwirkungen von Elektronen in der Quelle berücksichtigt.
- In Kapitel 5 wird ein Computerprogramm vorgestellt, das Testmessungen mit einer Elektronenkanone zur Bestimmung der Energieverlustfunktion vor Beginn der eigentlichen Messungen des KATRIN Experimentes simuliert. Anschließend erfolgt eine Beschreibung der Analyseschritte zur Ermittlung der Einfachstreuungsfunktion  $\varepsilon_1(\Delta E)$  aus den simulierten Messergebnissen. Mit dieser Funktion kann die eigentliche Energieverlustfunktion  $f(\Delta E)$  bestimmt werden.
- Im Zentrum des Kapitels 6 steht die Bestimmung der Energieverlustfunktion  $f(\Delta E)$ . Es werden drei verschiedene Methoden vorgestellt, mit denen die Funktion entfaltet werden kann.
- Die Ergebnisse der drei Entfaltungsmethoden werden in Kapitel 7 quantitativ verglichen. Zusätzlich wird ein alternatives Modell zur Beschreibung der Energieverluste der Elektronen in der Quelle vorgestellt und die Entfaltungsmethoden erneut unter Verwendung dieses Modells getestet.
- Am Ende dieser Arbeit steht in Kapitel 8 die Zusammenfassung der Ergebnisse sowie ein Ausblick.

## 2 Grundlagen der Neutrinophysik

In diesem Kapitel wird das Forschungsgebiet der Neutrinophysik umrissen. Dabei werden die folgenden Fragen beantwortet: Was sind Neutrinos und woher kommen sie? Woher weiß man, dass Neutrinos eine Masse besitzen? Wie kann die Neutrinomasse experimentell bestimmt werden?

Und: Warum ist die genaue Kenntnis der Neutrinomasse so wichtig? Die Beantwortung dieser Frage ist gleichzeitig die Motivation für das KATRIN Experiment, das in der Lage ist, die Obergrenze für die Masse des Elektronantineutrinos auf  $m(\nu_e) < 0.2$  eV zu senken. Wird ein Signal gemessen, so kann eine Neutrinomasse von 0.35 eV (0.3 eV) mit  $5\sigma$  ( $3\sigma$ ) bestimmt werden.

### 2.1 Geschichtliche Entwicklung der Neutrinophysik

Zum Ende des 19. Jahrhunderts wurde die Strahlung natürlicher radioaktiver Isotope von Becquerel entdeckt und in drei Gruppen unterteilt:  $\alpha$ -  $\beta$ - und  $\gamma$ -Strahlung.  $\alpha$ -Strahlen wurden als Heliumkerne identifiziert [Rut08],  $\beta$ -Strahlen als Elektronen [Kau02] und  $\gamma$ -Strahlen als hochenergetische Photonen im MeV-Bereich [Rut14]. Während beim  $\alpha$ - und  $\gamma$ -Zerfall ein diskretes Linienspektrum beobachtet wird, das charakteristisch für einen Zweikörperzerfall ist, erhält man beim  $\beta$ -Zerfall ein kontinuierliches Energiespektrum der Zerfallselektronen.

Die Messung des kontinuierlichen Spektrums von Chadwick [Cha14] im Jahre 1914 stellte ein Problem dar, weil die fundamentalen Sätze der Energie- und Drehimpulserhaltung verletzt zu sein schienen. Um diese Schwierigkeiten zu beseitigen, postulierte Pauli 1930 ein drittes Teilchen, welches im  $\beta$ -Zerfall freigesetzt wird und die zusätzliche Energie aufnehmen sollte [Pau30]. Dieses leichte Teilchen mit Spin  $1/2$ , das elektrisch neutral sein und schwach wechselwirken sollte, nannte er zunächst Neutron, nach der Entdeckung des eigentlichen Neutrons durch Chadwick 1932 wurde es jedoch 1934 von Fermi in Neutrino umbenannt. Fermi entwickelte zu dieser Zeit eine theoretische Beschreibung des  $\beta$ -Zerfalls und leitete ein Verfahren her, bei dem aus der Form des Elektronen-Energiespektrums die Ruhemasse des Neutrinos bestimmt werden kann<sup>1</sup> [Fer34].

Erst 26 Jahre nach Paulis Neutrinopostulat gelang Reines und Cowan 1956 der Nachweis des Neutrinos<sup>2</sup>, nachdem starke Neutrinoquellen aus den Zerfällen von Spaltprodukten in Kernreaktoren zur Verfügung standen.

---

<sup>1</sup>Dieses Verfahren wird auch beim KATRIN Experiment angewandt und in Abschnitt 3.1 näher beschrieben.

<sup>2</sup>Genauer gesagt handelt es sich um das Elektronantineutrino.

## 2 Grundlagen der Neutrinophysik

Der grundlegende Nachweisprozess des Experiments ist ein inverser  $\beta^-$ -Zerfall

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

bei dem ein Proton  $p$  ein Elektronantineutrino  $\bar{\nu}_e$  einfängt und unter Umwandlung in ein Neutron  $n$  ein Positron  $e^+$  aussendet.

Die experimentelle Anordnung bestand aus zwei Tanks mit wässriger Kadmiumchloridlösung, in denen die Elektronantineutrinos aus dem Savannah River Reaktor gemäß (2.1) Neutronen und Positronen erzeugten. Gemessen wurden die koinzidenten 511-keV Photonen, die bei der Positronenvernichtung emittiert werden und die zeitlich verzögerten Photonen, die bei der Neutroneneinfangreaktion  $^{113}\text{Cd} \rightarrow ^{114}\text{Cd}^* \rightarrow ^{114}\text{Cd} + \gamma$  entstehen. Nachdem das Experiment an verschiedenen Reaktoren mit unterschiedlichen Anordnungen wiederholt worden war, konnte die Existenz des Elektronantineutrinos eindeutig belegt werden. Der Wirkungsquerschnitt, der für die Reaktion (2.1) bestimmt wurde, beträgt  $\sigma = (11 \pm 2.6) \cdot 10^{-44} \text{ cm}^2$  [Rei59].

1962 gelang es Lederman, Schwartz und Steinberger, das Myonneutrino am Brookhaven AGS Beschleuniger nachzuweisen [Dan62]. Dazu traf ein hochenergetischer Protonenstrahl auf ein Be-Target und erzeugte geladene Pionen  $\pi^\pm$ , die gemäß der Reaktion

$$\pi^+ \rightarrow \mu^+ + \nu_\mu \quad \text{bzw.} \quad \pi^- \rightarrow \mu^- + \bar{\nu}_\mu$$

zerfallen. Die entstandenen Neutrinos  $\nu_\mu/\bar{\nu}_\mu$  erzeugten durch Wechselwirkung mit Materie geladene Myonen  $\mu^\pm$ , die nachgewiesen werden konnten. Gleichzeitig gab es keinen Hinweis auf die Erzeugung von Elektronen oder Positronen  $e^\pm$ . Dies bedeutete, dass es mehr als eine Neutrinoart geben musste, und damit war die zweite Neutrinogeneration entdeckt.

In der 1960er Jahren des vergangenen Jahrhunderts wurde das *Standardmodell der Elementarteilchenphysik* entwickelt, welches die fundamentalen Bausteine der bekannten Materie und ihre Wechselwirkungsträger beschreibt. Die Elementarteilchen werden unterteilt in Quarks und Leptonen, die in drei Generationen oder Familien mit jeweils einem Teilchenpaar angeordnet sind. Bei den Quarks, die drittelzahlige Ladungen  $+2/3 e$  bzw.  $-1/3 e$  tragen, bilden  $(u, d)$ ,  $(c, s)$  und  $(t, b)$  je eine Familie. Die Leptonen mit der Elementarladung  $-e$  bzw.  $0$  werden in die Familien  $(\nu_e, e)$ ,  $(\mu_\nu, \mu)$  und  $(\nu_\tau, \tau)$  eingeteilt.

Somit gibt es noch eine dritte Generation von Neutrinos, die sogenannten Tau-neutrinos  $\nu_\tau$ , welche bisher nicht erwähnt worden sind und in den 1960er Jahren auch noch nicht bekannt waren<sup>3</sup>. Erst nach der Entdeckung des Tauons  $\tau$  durch Perl im Jahr 1975, wurde die Existenz des zugehörigen Tauneutrinos vorhergesagt, welches jedoch erst 2000 beim DONUT-Experiment am Fermilab nachgewiesen werden konnte [Kod01].

Im *Standardmodell* sind Neutrinos masselos, jedoch zeigten eine Reihe von Experimenten seit den 1990er Jahren, dass Neutrinos Flavouroszillationen durchführen können. Bei diesen Oszillationen handelt es sich um die Umwandlung

<sup>3</sup>Auch die  $c$ -,  $t$ - und  $b$ -Quarks konnten erst in späteren Jahren nachgewiesen werden.



## 2.1 Geschichtliche Entwicklung der Neutrinophysik

einer Neutrinoart in eine andere, nachdem eine gewisse Wegstrecke durchlaufen worden ist. Bedeutsam sind die Neutrinooszillationen, weil sie nur unter folgenden Voraussetzungen auftreten können:

- Neutrinos werden als Eigenzustände der schwachen Wechselwirkung erzeugt, welche nicht identisch mit den Masseneigenzuständen sind, sondern einer Überlagerung mehrerer Masseneigenzustände entsprechen.
- Die Masseneigenzustände haben verschiedene nicht verschwindene Massen.

Das Prinzip der Neutrinooszillationen soll am Beispiel der Mischung zweier Flavours kurz erläutert werden.

In diesem Fall bilden die zwei Flavoureigenzustände  $\nu_\alpha$  ( $\alpha = e, \mu$ ) eine nichttriviale Überlagerung zweier Masseneigenzustände  $\nu_i$  ( $i = 1, 2$ ):

$$\begin{pmatrix} \nu_e \\ \nu_\mu \end{pmatrix} = \underbrace{\begin{pmatrix} \cos \theta & \sin \theta \\ -\sin \theta & \cos \theta \end{pmatrix}}_U \begin{pmatrix} \nu_1 \\ \nu_2 \end{pmatrix}$$

Hierbei ist  $U$  eine unitäre Mischungsmatrix und  $\theta$  der sogenannte Mischungswinkel. Verschiedene Masseneigenzustände propagieren unterschiedlich<sup>4</sup>, daher wird abhängig von der zurückgelegten Wegstrecke im Detektor entweder ein Elektron- oder Myonenneutrino nachgewiesen. Die Übergangswahrscheinlichkeit wird durch folgende Gleichung beschrieben<sup>5</sup>:

$$P(\nu_e \rightarrow \nu_\mu) = \sin^2(2\theta) \cdot \sin^2\left(\frac{\Delta m^2 L}{4E}\right) \quad (2.2)$$

$E$  ist die Energie der Neutrinos,  $L$  die zurückgelegte Wegstrecke und  $\Delta m^2 = |m_2^2 - m_1^2|$  die Differenz der Massenquadrate der Neutrinos  $\nu_1$  und  $\nu_2$ .

Der erste Hinweis auf Neutrinooszillationen kam 1968 vom Homestake-Experiment unter der Leitung von Davis. [Dav94]. Bei Fusionsprozessen innerhalb der Sonne entstehende Elektronantineutrinos wurden mit einem Chlordetektor in der Homestake-Mine aufgrund der Umwandlung von Chlor in Argon gemäß der Reaktion  $\nu_e + {}^{37}\text{Cl} \rightarrow {}^{37}\text{Ar} + e^-$  gemessen. Der nachgewiesene Neutrinofluss war jedoch viel geringer als erwartet.

Da das Sonnenmodell (Abk.: SSM für Standard Solar Model), welches den Neutrinofluss vorhergesagt hatte, immer wieder kritisch überprüft und experimentell bestätigt wurde, konnte das Neutrinodefizit nur in den Eigenschaften der Neutrinos selbst liegen, und es entwickelte sich die Theorie der Neutrinooszillation. Mitte der 60er Jahre war eine Erklärung des reduzierten solaren Neutrinoflusses noch nicht möglich, aber Davis erhielt 2002 den Nobelpreis für seine Beiträge

<sup>4</sup>Die zeitliche Entwicklung der Masseneigenzustände ergibt sich durch Anwendung des Zeitentwicklungsooperators  $|\nu_i(t)\rangle = e^{-iE_i t}|\nu_i\rangle$ .

<sup>5</sup>In diesem Fall wird die Wahrscheinlichkeit berechnet, im Detektor ein Elektronenneutrino nachzuweisen.

## 2 Grundlagen der Neutrinophysik

zur Astrophysik, im Besonderen für die Detektion solarer Neutrinos.

Seit den 1990er Jahren bestätigten weitere Experimente wie GALLEX, SAGE, Kamiokande, Super-Kamiokande und SNO das Ergebnis des Homestake-Experimentes. Experimente wie SNO, die neben dem Elektronenneutrinofluss auch die flavourunabhängige Neutrinointensität messen konnten, bestätigten die These der Neutrinooszillation. Der Super-Kamiokande Kollaboration gelang 1998 ebenfalls der Nachweis von Flavourooszillationen atmosphärischer<sup>6</sup> Neutrinos. Schließlich konnten zu Beginn dieses Jahrtausends Oszillationen von Reaktor- und Beschleunigerneutrinos<sup>7</sup> beim und KamLAND- und K2K-Experiment nachgewiesen werden.

Die experimentelle Nachweis von Neutrinooszillationen zeigt, dass Neutrinos nicht masselos sind. Aus Gleichung (2.2) geht hervor, dass Oszillationsexperimente Massenquadratdifferenzen und damit eine Untergrenze für eine der Neutrinomassen bestimmen können, nicht jedoch die absolute Neutrinomasse  $m_i$ .

### 2.2 Neutrinoquellen

#### 1) Urknallneutrinos

Diese sogenannten *relic*-Neutrinos stammen aus dem thermodynamischen Gleichgewicht, in dem sich das Universum kurz nach dem Urknall befand. Ungefähr 1 s nach dem Urknall entkoppelten die Neutrinos und sind heute genau wie der kosmische Mikrowellenhintergrund über das gesamte Universum verteilt (336 Neutrinos pro  $\text{cm}^3$ ). Wegen ihrer geringen Energie ist der Wirkungsquerschnitt für den inversen  $\beta^-$ -Zerfall  $\bar{\nu}_e + p \rightarrow n + e^+$  oder die elastische Streuung  $\nu + e^- \rightarrow \nu + e^-$  mit  $\sigma \approx 10^{-54} \text{ cm}^2$  [Sch97] so klein, dass Urknallneutrinos bisher nicht nachgewiesen werden konnten.

#### 2) Solare Neutrinos

Sie werden bei der Fusion von Wasserstoff zu Helium in der Sonne erzeugt. Die Fusionsreaktion lässt sich im Wesentlichen mit  $4p \rightarrow {}^4\text{He} + 2e^+ + 2\nu_e$  zusammenfassen.

#### 3) Atmosphärische Neutrinos

Trifft ein hadronisches Teilchen der kosmischen Strahlung auf die Atmosphäre, so entsteht ein Luftschauer, der vorwiegend geladene Pionen und Kaonen sowie Myonen und Elektronen als deren Zerfallsprodukte enthält. Bei jedem Schritt dieser Zerfallskette werden Neutrinos erzeugt mit einem Verhältnis von ca. 2:1 zwischen Myon- und Elektronenneutrinos. Tauneutrinos entstehen praktisch nicht.

#### 4) Neutrinos aus Supernovae

Bei einer Supernovaexplosion wird der größte Teil der Energie in Form von Neutrinos abgegeben. Es entstehen alle drei Neutrinoarten, welche den Stern verlassen, sobald ihre mittlere freie Weglänge größer als die Ausdehnung der Schockfront ist.

---

<sup>6</sup>Die verschiedenen Neutrinoquellen werden im nächsten Abschnitt beschrieben.

<sup>7</sup>Vgl. Fußnote 6

### 5) Natürliche Radioaktivität

Bei  $\beta^\pm$ -Zerfällen werden Elektron- und Elektronantineutrinos emittiert.

### 6) Reaktor- und Beschleunigerneutrinos

Reaktor-neutrinos entstehen in Kernkraftwerken aus  $\beta^-$ -Zerfällen der Spaltprodukte, demnach werden ausschließlich Elektronantineutrinos erzeugt. An Beschleunigern entstehen Neutrinos aus Zerfällen hochenergetischer Pionen und Kaonen.

## 2.3 Bestimmung der Neutrinomasse

Wie bereits in Abschnitt 2.1 erwähnt, konnten eine Reihe von Oszillationsexperimenten zeigen, dass Neutrinos eine von Null verschiedene Masse besitzen. Ergebnisse dieser Experimente sind die Obergrenzen  $\Delta m_{\text{atm}}^2 \lesssim 3 \cdot 10^{-3} \text{ eV}/c^2$  [Ash04] für die Massenquadratdifferenz atmosphärischer und  $\Delta m_{\text{solar}}^2 \lesssim 7.1 \cdot 10^{-5} \text{ eV}/c^2$  [Ahm03] für die Massenquadratdifferenz solarer Neutrinos.

Im Bereich der Kosmologie gibt es die Möglichkeit, über Analysen der beobachteten Strukturbildung im Universum eine Obergrenze für die Summe aller Neutrinomassen festzulegen. Dazu wurde z.B. die bisher genaueste Vermessung des kosmischen Mikrowellenhintergrunds mit dem WMAP-Satelliten (Abk. für Wilkinson Microwave Anisotropy Probe) herangezogen. Diese Grenze ist jedoch stets abhängig von Modellannahmen und/oder weiteren Messungen und liegt bei  $\sum_i m_i \lesssim (0.7 - 2.0) \text{ eV}/c^2$  [Spe03, Han03] bzw. laut einer aktuelleren Studie bei  $\sum_i m_i < 0.62 \text{ eV}/c^2$  [Han06].

Eine weitere Methode zur Abschätzung der Neutrinomasse ist der neutrinolose Doppel- $\beta$ -Zerfall ( $0\nu\beta\beta$ ), bei dem zwei simultane  $\beta$ -Zerfälle in einem Kern stattfinden, für den der einfache  $\beta$ -Zerfall energetisch nicht möglich ist. Der normale Reaktionsweg ist der Doppel- $\beta$ -Zerfall ( $2\nu\beta\beta$ ), bei dem zwei Neutrinos emittiert werden und keine Information über die Neutrinomasse gewonnen werden kann. Beim  $0\nu\beta\beta$  wird ein virtuelles Neutrino ausgetauscht, d.h. das am Zerfallsvertex des ersten  $\beta$ -Zerfalls emittierte Neutrino muss am Zerfallsvertex des zweiten  $\beta$ -Zerfalls als Antineutrino absorbiert werden. Dies ist nur möglich, wenn das Neutrino ein Majoranateilchen ist<sup>8</sup>.

$0\nu\beta\beta$ -Experimente können die effektive Majoranamasse  $m_{ee}$  der Neutrinos bestimmen. Diese ergibt sich aus einer kohärenten Summe der Neutrinomasseneigenzustände  $|\nu_i\rangle$  mit den Eigenwerten  $m_{\nu_i}$  ( $i = 1, 2, 3$ ), die aufgrund der Mischungsmatrix  $U_{ei}$  zu einem Elektronneutrino  $\nu_e$  beitragen<sup>9</sup>:

$$m_{ee} = \left| \sum_i U_{ei}^2 \cdot m_{\nu_i} \right|$$

<sup>8</sup>Teilchen und Antiteilchen müssen identisch sein. Die Idee des Majoranateilchens ist z.B. in [Sch97] beschrieben.

<sup>9</sup>Weitere Details und Erklärungen zum doppelten  $\beta$ -Zerfall können in [Ell04] nachgelesen werden.

## 2 Grundlagen der Neutrinophysik

Das stringenteste Ergebnis lieferte in der Vergangenheit das Heidelberg-Moskau-Experiment, welches zunächst eine Obergrenze von  $m_{ee} < 0.35 \text{ eV}/c^2$  [Kla01] festlegen konnte, da kein eindeutiger Nachweis eines  $0\nu\beta\beta$ -Signals gelang. Ein Teil der Kollaboration veröffentlichte nach alternativer Datenanalyse ein neues Ergebnis [Kla04], nach dem es einen offensichtlichen Hinweis auf einen  $0\nu\beta\beta$ -Zerfall gab. In der Zukunft sollen Experimente mit ausreichender Sensitivität wie GERDA, Majorana oder EXO bestätigen oder widerlegen, dass das beim Heidelberg-Moskau-Experiment gemessene Signal tatsächlich eine Evidenz für den  $0\nu\beta\beta$ -Zerfall darstellt.

Die bisher erwähnten Experimente können nur Massendifferenzen bestimmen oder durch Zusatzannahmen Grenzen für die Neutrinomassen festlegen. Eine direkte Messung der Absolutmasse mindestens einer Neutrinoart ist daher wichtig, um bestehende Modelle zu überprüfen und verbesserte Eingabeparameter für Theorien zu liefern, welche die Neutrinomasse benötigen.

Eine solche direkte Messung der Neutrinomasse kann durch Experimente erfolgen, welche die Kinematik des Tritium- $\beta$ -Zerfalls untersuchen. Die bisher sensitivste direkte Bestimmung der Masse des Elektroneneutrinos  $m_{\nu_e}$  erfolgte durch Experimente in Mainz und Troitsk, die Spektrometer nach dem Prinzip des MAC-E-Filters (vgl. Abschnitt 3.2) verwendeten. Die von den beiden Experimenten bestimmten Obergrenzen liegen bei:

$$\begin{array}{ll} \text{Mainz:} & m_{\nu_e} \leq 2.3 \text{ eV}/c^2 \quad [\text{Kra05}] \\ \text{Troitsk:} & m_{\nu_e} \leq 2.05 \text{ eV}/c^2 \quad [\text{Lob03}] \end{array}$$

Es ist zu beachten, dass bei der Troitsker Analyse eine phänomenologische Korrektur der sogenannten *Troitsk-Anomalie* vorgenommen wurde, daher ist das Ergebnis nur gültig, wenn diese Korrektur richtig ist.

Die beiden Experimente in Mainz und Troitsk haben ihre Sensitivitätsgrenze erreicht. Ergebnisse kosmologischer Beobachtungen (z.B. WMAP) oder auch des Heidelberg-Moskau-Experiments zeigen aber, dass für zukünftige Experimente eine Sensitivität im sub-eV-Bereich notwendig ist. Diese Voraussetzung erfüllt das KATRIN Experiment, welches eine Sensitivität von  $0.2 \text{ eV}/c^2$  erreichen wird und dessen Beschreibung in Kapitel 3 erfolgt.

## 2.4 Motivation für das KATRIN Experiment

Da Neutrinos eine wenn auch sehr kleine Masse besitzen, ist das *Standardmodell* der Elementarteilchenphysik zumindest unvollständig und muss erweitert werden.

Im Falle dreier Masseneigenzustände gibt es drei Massenquadratdifferenzen, welche die Gleichung  $\Delta m_{32}^2 + \Delta m_{21}^2 + \Delta m_{13}^2 = 0$  erfüllen müssen, jedoch ist bisher keine Aussage über die Hierarchie der Masseneigenzustände möglich. Es gibt daher im Bereich der Teilchenphysik zwei unterschiedliche Theorien zur Erklärung der Neutrinomasse. Während eine Gruppe ein quasientartetes Massenspektrum bevorzugt, bei dem die Unterschiede  $\Delta m_{ij}^2$  der Massenquadrate gegenüber den Absolutmassen vernachlässigbar sind, ist die andere Gruppe der Auffassung,

## 2.4 Motivation für das KATRIN Experiment

dass es eine Hierarchie  $m_1 < m_2 < m_3$  mit dem kleinsten Masseneigenwert  $m_1$  gibt. Sollte KATRIN mit einer Sensitivität im Sub-eV-Bereich die Masse des Elektronantineutrinos nachweisen, so kann das Ergebnis einen Beitrag zur Bestimmung des Skalennullpunktes und zur Unterscheidung der Theorien liefern.

Auch im Bereich der Astrophysik und Kosmologie hat die Neutrinomasse eine wichtige Bedeutung. *Relic*-Neutrinos können wegen ihrer hohen Anzahldichte von  $336 \text{ cm}^{-3}$  einen signifikanten Beitrag zur Gesamtmassendichte im Universum liefern. Je nach Größe ihrer Masse ist ihr Beitrag vergleichbar mit dem der gesamten sichtbaren Materie (Sterne und Gas). Unabhängig davon, ob ein Neutrinomassensignal gefunden wird oder ob eine Neutrinomasse festgelegt werden kann, liefert das KATRIN Experiment mit seiner Sensitivität von 0.2 eV einen wichtigen Beitrag zum Verständnis unseres Universums.

Eine ausführliche Zusammenfassung der Neutrinophysik findet sich in [Kra03].

## 3 Das KATRIN Experiment

In diesem Kapitel werden die Charakteristika des Tritium- $\beta$ -Spektrums sowie das Prinzip des MAC-E Filters erläutert, bevor der experimentelle Aufbau des KATRIN Experimentes beschrieben wird. Hierbei liegt der Schwerpunkt auf der Beschreibung der Tritiumquelle, da in der vorliegenden Arbeit die Energieverlustprozesse von  $\beta$ -Elektronen in der Quelle genauer untersucht werden.

### 3.1 Das Tritium- $\beta$ -Spektrum

Beim KATRIN Experiment soll die Ruhemasse des Elektronantineutrinos direkt bestimmt werden. Dazu wird das Energiespektrum der Elektronen vermessen, die beim Tritium- $\beta$ -Zerfall



emittiert werden. Der grundlegende Prozess von (3.1) ist ein  $\beta^-$ -Zerfall, bei dem sich ein Kern der Ladungszahl  $Z$  und Massenzahl  $A$  in einen Kern der Ladungszahl  $Z+1$  und Massenzahl  $A$  umwandelt. Aufgrund des großen Massenunterschiedes zwischen dem verbleibenden  ${}^3\text{He}$ -Kern und dem emittierten Teilchen, kann die Rückstoßenergie vernachlässigt werden. Das Energiespektrum der Elektronen  $dN/dE$  ist dann durch folgende Gleichung gegeben [Boe92]:

$$\frac{dN}{dE} = \frac{G_f^2}{2\pi^3\hbar^7} \cos^2(\Theta_c) |M|^2 F(E, Z+1) \cdot p \cdot (E + m_e c^2) \cdot (E_0 - E) \cdot \sqrt{(E_0 - E)^2 - m_\nu^2 c^4} \cdot \Theta((E_0 - E) - m_\nu c^2)$$

Hierbei sind

$G_f$ :	die Fermikopplungskonstante
$\Theta_c$ :	der Cabibbowinkel
$M$ :	das Kernmatrixelement (Tritium: $ M ^2 = 5.55 \cdot \hbar^6$ )
$F$ :	die Fermifunktion
$E_0$ :	der Endpunkt des Tritium- $\beta$ -Spektrums
$m_e c^2, m_\nu c^2$ :	die Ruhemasse des Elektrons und des Neutrinos

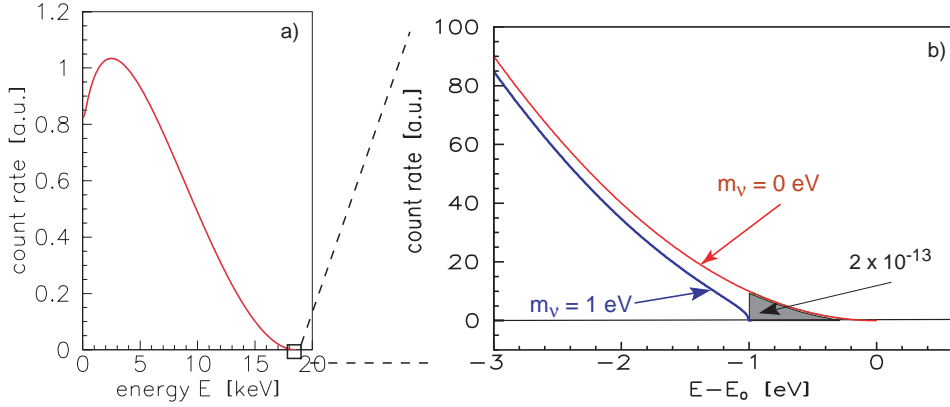
Die Fermifunktion beschreibt die elektromagnetische Wechselwirkung des emittierten  $\beta$ -Elektrons mit dem Tochterkern und ist näherungsweise gegeben durch

$$F(E, Z+1) = \frac{2\pi\eta}{1 - e^{(-2\pi\eta)}}$$

### 3.1 Das Tritium- $\beta$ -Spektrum

mit dem Sommerfeldparameter  $\eta = \alpha(Z+1)/\beta$ .

Abb. 3.1 zeigt das Tritium- $\beta$ -Spektrum für zwei verschiedene Neutrinomassen  $m_\nu = 0$  eV und  $m_\nu = 1$  eV. Die Änderungen der Form des Spektrums können durch eine andere Krümmung am Endpunkt sowie einen Offset über den gesamten Bereich des Spektrums beschrieben werden. Der Einfluss einer von Null verschiedenen Neutrinomasse kann am deutlichsten in der Nähe des Endpunktes



**Abbildung 3.1: Das Energiespektrum des Tritium-Beta-Zerfalls.** In Abb. a) ist das gesamte Energiespektrum der Elektronen dargestellt, während in Abb. b) ein Ausschnitt der Endpunktregion zu sehen ist. Es ist erkennbar, dass die Neutrinomasse Einfluss auf die Form des Spektrums und die Verschiebung des Endpunktes hat.

beobachtet werden.

Es ist daher sinnvoll, im Endbereich des  $\beta$ -Spektrums zu messen, allerdings ist die Zählrate in diesem Bereich sehr gering. So fällt zum Beispiel in den Bereich der letzten 1 eV unterhalb des Endpunktes nur noch ein Anteil von  $2 \cdot 10^{-13}$  aller  $\beta$ -Zerfälle. Aus diesem Grund müssen sowohl die  $\beta$ -Quelle als auch das zu verwendende Spektrometer besondere Anforderungen erfüllen: hohe Luminosität bei gleichzeitig hoher Energieauflösung. Ein Spektrometer, das diese Voraussetzungen erfüllt, ist der MAC-E-Filter, dessen Prinzip in Abschnitt 3.2 erläutert wird.

Tritium als Quellmaterial ist aus folgenden Gründen für die experimentelle Messung der Neutrinomasse geeignet:

- 1) Tritium hat eine geringe Endpunktenergie von  $E_0 = 18.6$  keV, damit ist der Anteil der Zählrate nahe des Endpunktes  $E_0$  relativ hoch<sup>1</sup>.
- 2) Die Halbwertszeit von Tritium ist mit  $t_{1/2} = 12.3$  a vergleichsweise kurz. Daraus ergibt sich eine hohe spezifische Aktivität.
- 3) Das Tritiummolekül und seine Tochtermoleküle haben eine relativ einfache Elektronenschalenkonfiguration, daher ist das Endzustandsspektrum der entstehenden Ionen leicht zu berechnen.

<sup>1</sup>Nur das Isotop  $^{187}\text{Re}$  hat eine noch geringere Endpunktenergie von  $E_0 = 2.4661$  keV [Arn03]. Nachteile von Rhenium sind die hohe Halbwertszeit von  $t_{1/2} = 4.32 \cdot 10^{10}$  a [Arn03] und die komplizierte elektronische Struktur.

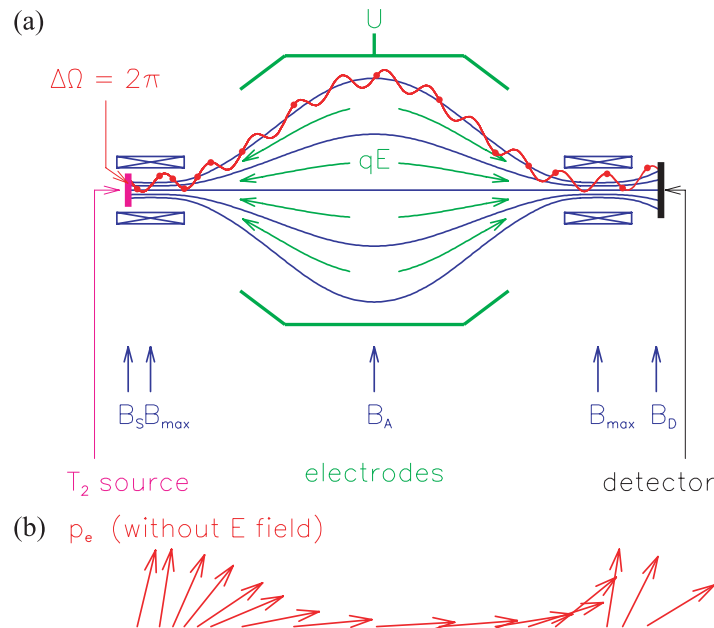
### 3 Das KATRIN Experiment

- 4) Es handelt sich um einen übererlaubten Zerfall, deshalb ist das Kernmatrixelement  $M$  im Wesentlichen eine Konstante.

## 3.2 Der MAC-E-Filter

Im vorangegangenen Abschnitt wurden entscheidende Voraussetzungen genannt, um die Neutrinomasse in der Endpunktregion des  $\beta$ -Spektrums zu vermessen: hohe Luminosität bei gleichzeitig hoher Energieauflösung.

Beide Anforderungen werden durch den Einsatz eines MAC-E-Filters (**M**agnetic **A**diabatic **C**ollimation and **E**lectrostatic Filter) erreicht. Das Prinzip wurde



**Abbildung 3.2: Das Prinzip des MAC-E Filters.** (a) Weg eines Elektrons (rot) entlang der Magnetfeldlinien (blau) im elektrostatischen Feld (grün) von der Tritiumquelle auf der linken Seite zum Detektor auf der rechten Seite. (b) Darstellung der magnetischen adiabatischen Transformation anhand von Impulsvektoren der Elektronen.

erstmalig 1980 vorgeschlagen [Bea80] und die Technik in den darauffolgenden Jahren in Troitsk [Lob85] und Mainz [Pic92] unabhängig voneinander entwickelt.

In Abbildung 3.2 ist das Prinzip des MAC-E-Filters graphisch dargestellt. Zwei Solenoiden auf beiden Seiten des Spektrometers erzeugen ein magnetisches Führungsfeld. Die in der Quelle bei angelegtem Magnetfeld  $B_S$  startenden Elektronen bewegen sich auf Zyklotronbahnen entlang der magnetischen Feldlinien auf das Zentrum des Spektrometers zu. Bei ihrem Start haben die Elektronen einen gewissen Anteil an Longitudinalenergie  $E_{||}$  entlang der Magnetfeldlinie und Transversalenergie  $E_{\perp}$  in der Zyklotronbewegung. Auf dem Weg der Elektronen vom Magnetfeldmaximum  $B_{max}$  zur Analysierebene in der Mitte des



### 3.2 Der MAC-E-Filter

Spektrometers nimmt die Magnetfeldstärke um mehrere Größenordnungen ab, bis es einen minimalen Wert  $B_A$  erreicht.

Für das durch die Zyklotronbewegung der Elektronen hervorgerufene Bahnmoment  $\mu$  gilt bei hinreichend langsamer Änderung der Magnetfeldstärke  $B$  in nicht-relativistischer Näherung<sup>2</sup>:

$$\mu = \frac{E_{\perp}}{B} = \text{const.} \quad \text{mit } E_{\perp} = \frac{p_{\perp}^2}{2m_e} \quad (3.2)$$

Aufgrund des inhomogenen Magnetfeldes wirkt auf das magnetische Moment  $\mu$  die Gradientenkraft  $F_{\nabla}$ , welche die Elektronen parallel zu den Magnetfeldlinien beschleunigt. Da  $\mu$  konstant ist (3.2), wird auf dem Weg zur Spektrometermitte die transversale Energie  $E_{\perp}$  fast vollständig in longitudinale Energie  $E_{\parallel}$  umgewandelt, so dass die Impulse der Elektronen in der Analysierebene parallel zu den magnetischen Feldlinien gerichtet sind. Dieser Prozess wird auch magnetische adiabatische Transformation bzw. Kollimation genannt.

Die Transformation ist notwendige Voraussetzung, um eine elektrostatische Energieanalyse durchzuführen. Zu diesem Zweck wird ein präzises elektrostatisches Feld erzeugt, welches nur auf die longitudinale Komponente der Elektronen wirkt und eine Abbremsung der Elektronen auf dem Weg zur Analysierebene bewirkt. Alle Elektronen, deren Longitudinalenergie  $E_{\parallel}$  an jedem Bahnpunkt größer ist als das angelegte elektrische Potential  $qU$  (auch Retardierungs- bzw. Analysepotential genannt), können den elektrischen Filter überwinden. Die Transmissionsbedingung für die Analysierebene  $A$  lautet:

$$E_{\parallel}^A > qU \quad (3.3)$$

Ein MAC-E-Filter ist somit ein integrierender Hochpassfilter.

Aus Gleichung (3.2) folgt, dass eine Abnahme der Transversalenergie  $E_{\perp}$  auf dem Weg zur Analysierebene erfolgt, die dem Verhältnis der Magnetfeldstärken  $B_A$  und  $B_{\max}$  entspricht. Liegt die gesamte Startenergie  $E$  als Zyklotronenergie vor, so bleibt ein kleiner Energieanteil  $\Delta E$  übrig, der bei der Energieanalyse nicht berücksichtigt wird. Dieser Anteil entspricht der Energieauflösung  $\Delta E$  des Spektrometers, welche somit direkt aus Gleichung (3.2) abgeleitet werden kann:

$$\Delta E = E \cdot \frac{B_A}{B_{\max}} \quad (3.4)$$

Diejenigen Elektronen mit ausreichend hoher Energie werden nach Überwindung des Retardierungspotentials wieder beschleunigt, magnetisch zum Detektor geführt und dort mit ihrer Ursprungsenergie nachgewiesen.

Abhängig vom Verhältnis der Magnetfeldstärke  $B_S$  in der Quelle zur maximalen Magnetfeldstärke  $B_{\max}$  der Strahlführung werden Elektronen, die mit Startwinkeln von bis zu  $90^\circ$  in Richtung der Spektrometer emittiert werden, analysiert. Der akzeptierte Raumwinkel des Spektrometers ist also maximal  $2\pi$ .

---

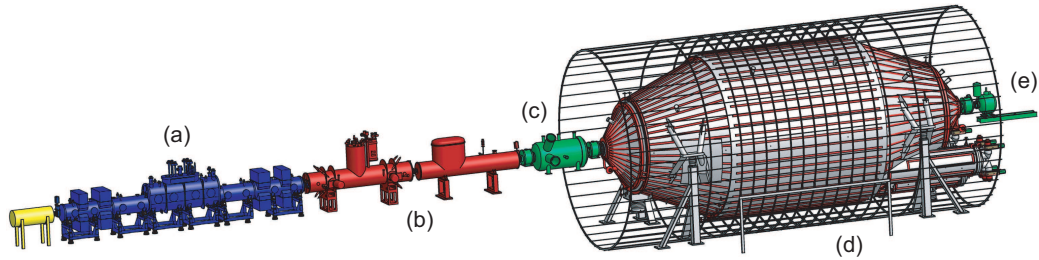
<sup>2</sup>Für relativistische Teilchen ist  $\gamma \cdot \mu$  eine Erhaltungsgröße. Im Falle von Tritium liegt der maximale  $\gamma$ -Wert bei 1.04 und wird hier näherungsweise gleich 1 gesetzt.

### 3 Das KATRIN Experiment

Die Transmissionswahrscheinlichkeit der Elektronen, die abhängig ist von deren Startwinkel und Energie, beschreibt die Transmissionsfunktion, auf die in Abschnitt 4.1 eingegangen wird.

## 3.3 Der experimentelle Aufbau

In Abb. 3.3 ist der ca. 70 m lange Aufbau des KATRIN Experimentes dargestellt, der sich in Tritiumquelle, Transport- und Pumpstrecke, Vorspektrometer, Hauptspektrometer und Detektor aufteilt. Die einzelnen Komponenten werden im Folgenden beschrieben.



**Abbildung 3.3: Experimenteller Aufbau des KATRIN Experiments.** Abgebildet ist der 70 m lange Aufbau mit einer fensterlosen gasförmigen Tritiumquelle (WGTS) (a), dem Transportsystem bestehend aus differentieller und kryogener Pumpstrecke (b), Vor- (c) und Hauptspektrometer (d) sowie dem Elektronendetektor (e). Gelb eingezeichnet ist das hintere System (rear system), in dem sich u.a. die Elektronenkanone für Kalibrationsmessungen befindet.

#### 3.3.1 Die Tritiumquelle

Für das KATRIN Experiment wird eine fensterlose gasförmige Tritiumquelle (Abk.: WGTS für windowless gaseous tritium source) verwendet, die aus einem 10 m langen Rohr mit 90 mm Durchmesser besteht. In die Mitte des Quellrohrs wird molekulares Tritiumgas mit einer Temperatur von  $T = 27$  K und einer Isotopenreinheit von über 95% durch eine Kapillare eingelassen. Nach der Injektion benötigen die Tritiummoleküle für die Diffusion zu beiden Enden des Quellrohrs ca. 1 s, daher beträgt die Zerfallswahrscheinlichkeit für ein einzelnes Tritiummolekül ungefähr  $10^{-9}$ . An den Enden wird das Tritiumgas abgepumpt, gereinigt und erneut mit einer Isotopenreinheit von über 95% in die Quelle eingelassen. Beim  $\beta$ -Zerfall entstehende Elektronen werden durch das an der WGTS anliegende Magnetfeld  $B_S = 3.6$  T adiabatisch zu beiden Enden des Quellrohrs geleitet.

Die Signalrate  $S$  der WGTS wird begrenzt durch den Parameter der Säulendichte<sup>3</sup>  $\rho d$  innerhalb der Quelle und ist proportional zur Anzahl der Tritiummoleküle  $N(T_2)$ , zum akzeptierten Raumwinkel  $\Delta\Omega/2\pi$  und zur Wahrscheinlichkeit

<sup>3</sup>Die Säulendichte gibt die Anzahl der Teilchen pro Fläche an.

### 3.3 Der experimentelle Aufbau

$P_0(\rho d, \theta_{\max})$ , dass ein Elektron ohne inelastische Streuung die Quelle durchquert.  $\theta_{\max}$  ist der maximal akzeptierte Startwinkel der Elektronen<sup>4</sup>. Eine optimale Einstellung der Quellsäulendichte  $\rho d$  ermöglicht eine hohe Signalrate bei einem gleichzeitig geringen Anteil inelastischer Streuung.

Um diesen optimalen Wert zu bestimmen wird eine effektive Säulendichte  $(\rho d)_{\text{eff}}$  eingeführt, die als virtuelle Quelle mit ungestreuten Elektronen beschrieben werden kann:

$$(\rho d)_{\text{eff}} = \frac{1}{1 + \cos \theta_{\max}} \cdot \rho d \cdot P_0(\rho d, \theta_{\max})$$

Analog zur mittleren freien Weglänge gilt mit dem totalen inelastischen Wirkungsquerschnitt  $\sigma_{\text{tot}}$  für die mittlere freie Säulendichte  $(\rho d)_{\text{frei}}$  folgende Gleichung<sup>5</sup>:

$$(\rho d)_{\text{frei}} = \frac{1}{\sigma_{\text{tot}}} \quad (3.5)$$

Im folgenden wird eine Grenzwertbetrachtung  $d \rightarrow \infty$  durchgeführt, um die Eigenschaften von  $(\rho d)_{\text{eff}}$  bei einem Anwachsen von  $\rho d$  zu bestimmen. Es ergibt sich

$$(\rho d)_{\text{eff}} \xrightarrow{d \rightarrow \infty} \frac{(\rho d)_{\text{frei}}}{2} = \frac{1}{2 \cdot \sigma_{\text{tot}}}.$$

Höhere Werte für die Säulendichte  $\rho d$  führen also nicht zu einem Anwachsen der effektiven Säulendichte  $(\rho d)_{\text{eff}}$  für alle  $\theta_{\max}$ , stattdessen erreicht  $(\rho d)_{\text{eff}}$  durch den begrenzenden Faktor  $P_0(\rho d, \theta_{\max})$  ein asymptotisches Maximum (vgl. Abb. 3.4). Als Ergebnis kann festgehalten werden, dass der Wert für  $\rho d$  ungefähr der halben mittleren freien Weglänge entsprechen sollte. Eine ausführliche Herleitung findet sich in [Kat04].

Wie in Abb. 3.4 gezeigt, beträgt die Referenzsäulendichte beim KATRIN Experiment  $\rho d = 5 \cdot 10^{17} \text{ cm}^{-2}$ . Um diesen Referenzwert einzustellen, ist ein Einlassdruck von  $p_{\text{inj}} = 3.4 \cdot 10^{-3} \text{ mbar}$  bei der bereits genannten Temperatur  $T = 27 \text{ K}$  notwendig. Für das Referenzdesign wird eine Gesamtzerfallsrate von  $1.8 \cdot 10^{11} \text{ Zerfällen/s}$  erreicht<sup>6</sup>.

Die hauptsächliche systematische Unsicherheit der WGTS hängt mit der Säulendichte zusammen, die mit einer Präzision von 0.1 % bekannt sein muss.

#### 3.3.2 Das Transportsystem

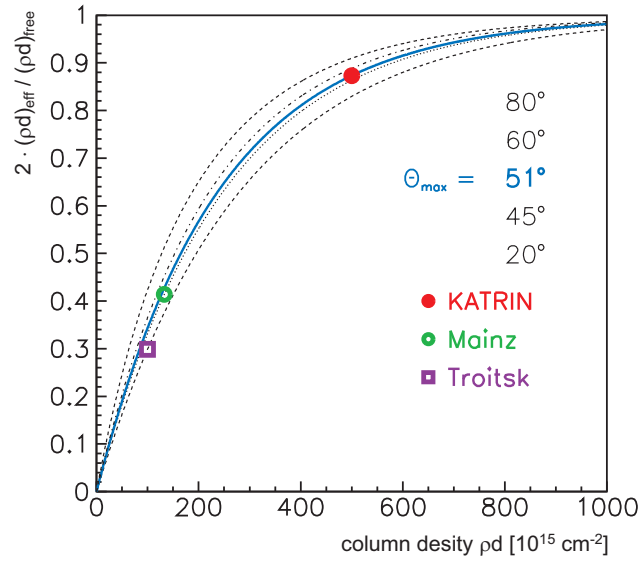
Die Aufgaben des Transportsystems bestehen darin, Signalelektronen adiabatisch zu den Spektrometern zu führen und gleichzeitig vorhandene Tritiummoleküle abzupumpen, welche dann erneut in die WGTS eingelassen werden. Die Eli-

<sup>4</sup>Der Grund für die Verringerung der Raumwinkelakzeptanz von  $2\pi$  auf  $\theta_{\max}$  wird in Abschnitt 4.1 erläutert.

<sup>5</sup>Die mittlere freie Säulendichte wird in Abschnitt 5.2 genauer erläutert.

<sup>6</sup>Hierbei ist zu beachten, dass nur solche Elektronen analysiert werden können, die in Richtung der Spektrometer emittiert werden.

### 3 Das KATRIN Experiment



**Abbildung 3.4: Säulendichte beim KATRIN Experiment.** Aufgetragen ist das Verhältnis zwischen effektiver und freier Säulendichte  $(\rho d)_{\text{eff}} / \frac{1}{2}(\rho d)_{\text{free}}$  als Funktion der Säulendichte  $\rho d$  für verschiedene maximale Startwinkel  $\theta_{\text{max}}$ . Rot eingezeichnet ist die Referenzsäulendichte  $\rho d$  für die WGTs von KATRIN, grün und violett sind die Parameter des Mainzer und Troitsker Experiments. Quelle: [Kat04]

mination der Tritiummoleküle ist wichtig, um eine Untergrunderhöhung durch Zerfälle im Inneren des Spektrometers zu vermeiden, welche die Sensitivität auf die Neutrinomasse verschlechtern würde.

#### 3.3.3 Die Spektrometer

Nachdem die Elektronen die Transportstrecke durchquert haben, erreichen sie zunächst das Vorspektrometer und danach das Hauptspektrometer, beide vom Typ des in Abschnitt 3.2 beschriebenen MAC-E Filters. Das Retardierungspotential in beiden Spektrometern wird durch das Anlegen einer Hochspannung an ein Elektrodensystem, bestehend aus Tank- und Innenelektrode, erzeugt bzw. definiert.

**Das Vorspektrometer** Zunächst müssen die Elektronen auf dem Weg zum Detektor das 3.38 m lange Vorspektrometer, das einen Durchmesser von 1.7 m hat, passieren. Im Aufbau des KATRIN Experimentes dient das Vorspektrometer wegen seiner Hochpasseigenschaften als Vorfilter und lässt nur Elektronen mit einer Energie  $E > 18.3$  keV in das Hauptspektrometer gelangen. Dies ist notwendig, um die Zahl der Untergrundereignisse durch ionisierende Stöße mit Restgasionen im Hauptspektrometer möglichst gering zu halten.

**Das Hauptspektrometer** Nach der Vorfilterung erreichen die Elektronen die zentrale Komponente des Experiments: das 23.3 m lange Hauptspektro-

### 3.3 Der experimentelle Aufbau

meter mit einem Durchmesser von 10 m. Die Aufgabe dieses Spektrometers besteht nun darin, die Energie der hochenergetischen Elektronen genau zu vermessen. Dies ist mit einer Energieauflösung von  $\Delta E = 0.93$  eV ( $B_{\text{max}} = 6$  T und  $B_A = 0.3$  mT) für Elektronen mit der höchsten Energie von 18.6 keV möglich (s. Gl. (3.4)). Um den Untergrund durch ionisierende Stöße so gering wie möglich zu halten, herrscht in beiden Spektrometern ein Ultrahochvakuum von  $p \approx 10^{-11}$  mbar.

#### 3.3.4 Der Detektor

Alle Elektronen, welche die Analysierebene des Hauptspektrometers passiert haben, werden wieder auf ihre ursprüngliche Energie beschleunigt und zum Detektor geführt. Bei diesem Detektor handelt es sich um einen segmentierten Silizium-Halbleiter-Detektor mit 148 Pixeln im Zentrum eines Solenoiden. Anforderungen an den Detektor sind eine gute Energieauflösung mit einer Halbwertsbreite von  $\Delta E \approx 600$  eV für die Detektion von 18.6 keV-Elektronen sowie ein geringes Rauschen.

Eine ausführliche Beschreibung des KATRIN Experimentes kann in [Kat04] und [Thu07] nachgelesen werden.

## 4 Transmission der Elektronen

Zu Beginn dieses Kapitels wird die analytische Transmissionsfunktion hergeleitet, welche die Abhängigkeit der transmittierten Elektronen von deren Startenergie und -winkel beschreibt. Da diese Funktion keine Wechselwirkungen der Elektronen innerhalb der Tritiumquelle berücksichtigt, werden im Anschluss die Streuprozesse beschrieben, bei denen die Elektronen Energie verlieren können. Zum Schluss erfolgt eine Erläuterung der Energieverlustfunktion und der Antwortfunktion, die im Gegensatz zu der Transmissionsfunktion Energieverluste von Elektronen in der WGTS beinhaltet und die Transmission der Elektronen beim KATRIN Experiment realistisch wiedergibt.

### 4.1 Die Transmissionsfunktion

Die Transmission des Spektrometers ist definiert als Verhältnis zwischen

- den Elektronen, die das Retardierungspotential  $qU$  überwinden können
- zur Gesamtzahl aller in den vorderen Halbraum des Spektrometers emittierten Elektronen.

Wie in Abschnitt 3.2 beschrieben, können die Elektronen das Analysierpotential nur dann überwinden, wenn ihre Longitudinalenergie  $E_{\parallel}$  an jedem Bahnpunkt zwischen Quelle und Analysierebene größer als Null ist. Die genaue Abhängigkeit der transmittierten Elektronen von deren Startwinkel  $\theta_S$  und Startenergie  $E$  beschreibt die Transmissionsfunktion  $T(E, qU)$ . Diese wird im Folgenden unter Verwendung der wichtigsten Zusammenhänge hergeleitet<sup>1</sup>.

Elektronen in der Quelle starten unter einem Winkel  $\theta_S$  zwischen Magnetfeldlinien und Geschwindigkeitsvektor und haben somit einen Anteil an Longitudinal-  $E_{\parallel}$  und Transversalenergie  $E_{\perp}$ :

$$E_{\parallel} = E \cdot \cos^2 \theta_S \quad (4.1)$$

$$E_{\perp} = E \cdot \sin^2 \theta_S \quad (4.2)$$

Da das magnetische Moment  $\mu = E_{\perp}/B$  eine Konstante ist (s. Gleichung (3.2)), erfolgt bis zum Erreichen der Analysierebene eine Minimierung der ursprünglichen Transversalenergie, die genau dem Verhältnis der Magnetfeldstärken am Startpunkt und am Ort der Analysierebene entspricht<sup>2</sup>. Unter Verwendung der

---

<sup>1</sup>Eine ausführliche Herleitung der Transmissionsfunktion kann in [Val04] nachgelesen werden.

<sup>2</sup>Die Position der einzelnen Magnetfelder ist in Abb. 3.2 dargestellt

#### 4.1 Die Transmissionsfunktion

Gleichungen (3.3) und (4.2) erhält man mit dem Magnetfeld der Quelle  $B_S$  und dem Magnetfeld in der Mitte des Spektrometers  $B_A$  als Transmissionsbedingung für die Analysierebene  $A$ :

$$E_{\parallel}^A - qU = (E - E_{\perp}^A) - qU = \left( E - \left( E \cdot \sin^2 \theta_S \cdot \frac{B_A}{B_S} \right) \right) - qU \geq 0$$

Aus dieser Gleichung geht hervor, dass alle Elektronen, die mit  $E > qU$  unter dem Winkel

$$\theta_S \leq \theta_{S,\max} = \arcsin \left( \sqrt{\frac{E - qU}{E} \cdot \frac{B_S}{B_A}} \right)$$

starten, die Transmissionsbedingung erfüllen.

Es muss jedoch ein weiterer limitierender Faktor berücksichtigt werden: Das Magnetfeld  $B_S$  ist deutlich kleiner als das maximale Magnetfeld  $B_{\max}$  der Strahlführung. Aus dieser Positionierung folgt, dass nicht alle startenden Elektronen das Spektrometer erreichen können, sondern nur diejenigen, deren Startwinkel kleiner ist als der maximal akzeptierte Startwinkel

$$\theta_{\max} = \arcsin \left( \sqrt{\frac{B_S}{B_{\max}}} \right). \quad (4.3)$$

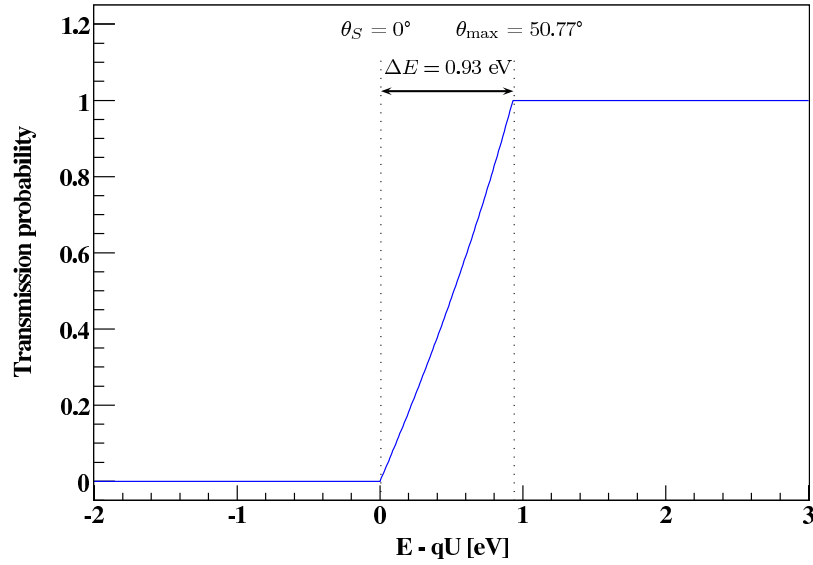
Die Positionierung der Quelle in dem schwächeren Magnetfeld  $B_S < B_{\max}$  wird bewusst vorgenommen, um Elektronen mit großen Startwinkeln zu reflektieren, da diese einen längeren Weg innerhalb der Quelle zurücklegen und daher mit höherer Wahrscheinlichkeit Energie durch inelastische Stöße verlieren können.

Die genannten Bedingungen ergeben zusammen mit der Energieauflösung  $\Delta E = E \cdot B_A/B_{\max}$  des Spektrometers (vgl. (3.4)) die normierte Transmissionsfunktion  $T(E, qU)$ :

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

Der Verlauf der Transmissionsfunktion für das KATRIN Experiment ist in Abb. 4.1 dargestellt. Ein großer Vorzug des Mac-E-Filters ist die analytisch berechenbare Transmissionsfunktion, die keine Ausläufer zu höheren oder niedrigeren Energien aufweist und allein von den Magnetfeldverhältnissen  $B_A/B_{\max}$  sowie  $B_S/B_A$  abhängt.

Es ist wichtig zu erwähnen, dass die Funktion keine Wechselwirkungen der Elektronen innerhalb der Tritiumquelle berücksichtigt. Da die Elektronen aber Energie durch inelastische Stöße verlieren können, muss die Transmissionsfunktion modifiziert werden.



**Abbildung 4.1: Die analytische Transmissionfunktion des KATRIN Experimentes.** Dargestellt ist der Verlauf der normierten Transmissionfunktion für Elektronen mit fester Startenergie  $E = 18.6$  keV als Funktion der Retardierungsenergie  $qU$ . Für die Standardparameter des KATRIN Experimentes  $B_S = 3.6$  T,  $B_{\max} = 6$  T und  $B_A = 3 \cdot 10^{-4}$  T erhält man die Energieauflösung  $\Delta E = 0.93$  eV. Während Elektronen mit kleinen Startwinkeln  $\theta_S$  schon bei geringen Überschussenergien die Filterschwelle überwinden können, werden Elektronen mit maximalem Startwinkel  $\theta_{\max} = 50.77^\circ$  erst bei einer Überschussenergie von 0.93 eV durchgelassen.

Im nächsten Abschnitt erfolgt eine Beschreibung der auftretenden Energieverluste und danach in Abschnitt 4.3.2 die Darstellung der modifizierten Transmissionfunktion.

## 4.2 Inelastische Streuung von Elektronen an molekularem Tritium

Das Tritiummolekül setzt sich aus zwei Tritiumatomen zusammen, deren Kerne einen Abstand haben, der wegen der Bewegung der Kerne variiert. Die atomaren Valenzelektronen ordnen sich zwischen den Kernen an und sind für die chemische Bindung des Moleküls verantwortlich. Aufgrund ihrer Bewegung haben die Kerne eine kinetische Energie, die zur Gesamtenergie beiträgt. Bei dieser Energie handelt es sich um Schwingungen der Kerne gegeneinander und Rotationen der Kerne umeinander, nicht aber um eine translatorische Bewegung des Moleküls. Diese Energie muss bei der Lösung der Schrödingergleichung und damit der Bestimmung der einzelnen Energieniveaus berücksichtigt werden.

Quantenmechanische Zustände von Molekülen werden durch gebundene Wel-



## 4.2 Inelastische Streuung von Elektronen an molekularem Tritium

lenfunktionen (Molekülorbitale) sowie deren Symmetrieeigenschaften charakterisiert.

- Es gibt für jedes Atomorbital eine Hauptquantenzahl  $n$ , die das grundlegende Energieniveau (im Schalenmodell die Schale) beschreibt.  $n$  kann beliebige natürliche Zahlen größer als Null annehmen:

$$n = 1, 2, 3, \dots$$

- Weiterhin gibt es für jeden Zustand der einzelnen Atome des Moleküls eine Neben- bzw. Drehimpulsquantenzahl  $l$  mit  $l = 0, 1, 2, \dots$ , welche den Bahndrehimpuls eines Elektrons beschreibt. Sie ist abhängig von der Hauptquantenzahl  $n$ , da folgende Relation gilt:  $l \leq n - 1$ . Es ist üblich, die Drehimpulse durch kleine lateinische Buchstaben zu bezeichnen, und zwar:

$$s, p, d, \dots \quad \text{für} \quad l = 0, 1, 2, \dots$$

Für Molekülorbitale wird der Bahndrehimpuls im allgemeinen als Vektorsumme  $L = \sum l_i$  der Atomzustände geschrieben, in die der Molekülzustand dissoziieren kann.

- Die magnetische Quantenzahl  $m_l$  eines Atomzustandes, für die  $-l \leq m_l \leq +l$  gilt, beschreibt die räumliche Orientierung Elektronbahndrehimpulses bzw. die Projektion von  $m_l \hbar$  auf  $l_z$ , wobei die  $z$ -Achse die Verbindungsachse der beiden Kerne ist. Sie wird häufig durch kleine griechische Buchstaben bezeichnet:

$$\sigma, \pi, \delta, \dots \quad \text{für} \quad |m_l| = 0, 1, 2, \dots$$

Für Moleküle mit mehreren Elektronen ist nur die Projektion  $m_l \hbar$  von  $l_z$  auf die Kernverbindungsachse eine gute Quantenzahl. Alle Zustände werden durch die Quantenzahlen  $\lambda = 0, 1, 2, \dots$  gekennzeichnet. Für Moleküle verwendet man statt griechischer Kleinbuchstaben große griechische Buchstaben, d.h.

$$\Lambda = 0, 1, 2, \dots, \max \sum \lambda_i \quad \text{oder} \quad \Sigma, \Pi, \Delta, \dots$$

- Werden Moleküle an einer Ebene durch die Kernverbindungsachse gespiegelt (o.B.d.A. der  $y$ - $z$ -Ebene), so können sie in sich selbst übergehen oder ihr Vorzeichen wechseln. Ein Zustand ist positiv, wenn

$$\Psi^+(x, y, z) = +\Psi^+(-x, y, z)$$

gilt, ansonsten ist er negativ:

$$\Psi^-(x, y, z) = -\Psi^-(-x, y, z).$$

Die  $\pm$ -Symmetrie ist bedeutsam, da sie auch die Parität des elektronischen Zustands festlegt.

- Bei homonuklearen Molekülen (z.B.  $T_2$ ) muss zusätzlich geprüft werden, ob der Molekülzustand, der durch die Wellenfunktion  $\Psi(\mathbf{r})$  beschrieben wird, gerade oder ungerade ist.  $\mathbf{r}$  steht in diesem Fall als Abkürzung für alle Elektronen- und Kernkoordinaten. Der Zustand wird gerade genannt, wenn die Wellenfunktion bei Spiegelung am Ursprung in sich selbst übergeht:

$$\Psi_g(\mathbf{r}) = +\Psi_g(-\mathbf{r}).$$

Für ungerade Zustände gilt:

$$\Psi_u(\mathbf{r}) = -\Psi_u(-\mathbf{r}).$$

## 4 Transmission der Elektronen

Im Gegensatz zu den Eigenzuständen des Tritiumatoms, sind die Zustände des Tritiummoleküls somit durch zusätzliche Quantenzahlen bzw. Symmetrioperationen definiert. Dementsprechend kann das Molekül eine größere Anzahl von elektronischen Zuständen einnehmen als das Atom.

Das Tritiummolekül besitzt im Gegensatz zu Tritiumatomen noch eine zusätzliche Eigenschaft: Es kann dissoziieren. Unter Dissoziation versteht man die selbständige oder angeregte Zerlegung eines Moleküls in zwei oder mehrere Atome, einfachere Moleküle oder Ionen. Die Dissoziationsenergie ist dann diejenige Energie, die aufgebracht werden muss, um die chemische Bindung zu trennen.

In der Vergangenheit wurden vielfältige Streuexperimente hochenergetischer Elektronen an molekularem Wasserstoff durchgeführt, die repräsentativ sind für die Streuung an molekularem Tritium, da elektronische Anregung und Ionisation unabhängig sind von den einzelnen Isotopen. Vibrations- und Rotationsanregungsprozesse dagegen sind isotopabhängig, jedoch werden die Wirkungsquerschnitte dieser Prozesse mit zunehmender Elektronenenergie immer kleiner (vgl. z.B. [Vro69]) und können für 18.6 keV-Elektronen vernachlässigt werden. Im Rahmen dieser Arbeit werden die Ergebnisse der Experimente daher als Referenz für die Streuprozesse von Elektronen innerhalb der Tritiumquelle herangezogen.

### 4.2.1 Anregung

Der Wirkungsquerschnitt für die Anregung von molekularem Wasserstoff setzt sich zusammen aus dem Wirkungsquerschnitt für diskrete Anregungsprozesse sowie dem Wirkungsquerschnitt für die Dissoziation des Moleküls.

Beim Durchgang von 25 keV-Elektronen durch molekularen Wasserstoff können der  $B(2p\sigma^1\Sigma_u^+)$ -,  $C(2p\pi^1\Pi_u)$  und  $D(3p\pi^1\Pi_u)$ -Zustand des Moleküls angeregt werden. Durch die Anregung der B- und C-Niveaus entsteht im Wesentlichen ein Energieverlust der Elektronen von 12.6 eV. Die Anregung des D-Zustands erfolgt erst ab  $\approx 14$  eV, allerdings ist die Intensität dieser Anregung so gering, dass sie gegenüber dem 12.6 eV Energieverlust vernachlässigt werden kann [Gei64].

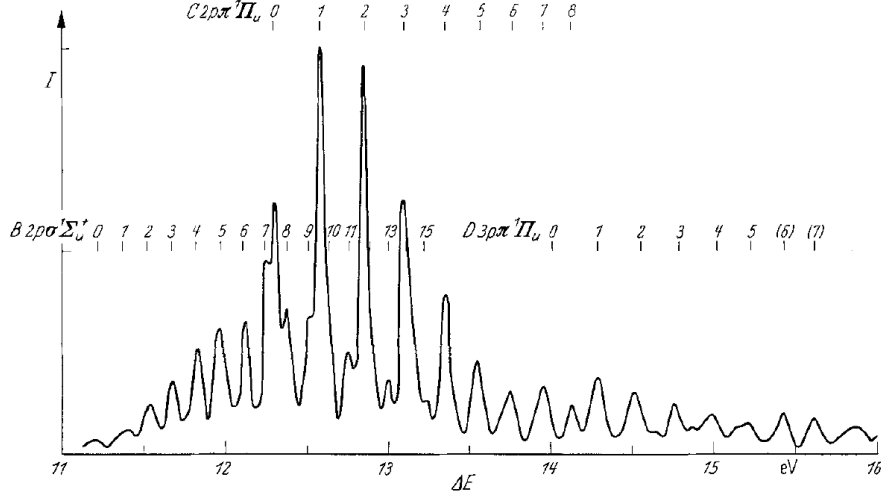
Im Energieverlustspektrum mit einem Auflösungsvermögen von  $\approx 1$  eV zeigt sich die Anregung dieser Zustände als Kurve mit einem schmalen asymmetrischen Maximum bei 12.6 eV. Bei einem erhöhten Auflösungsvermögen von  $\approx 0.04$  eV besteht das Anregungsmaximum aus vielen nahezu äquidistanten Linien [Gei64], wie in Abb. 4.2 zu erkennen ist. Dies ist darauf zurückzuführen, dass die anregbaren Schwingungsterme eines Zustands so dicht beieinander liegen, dass sie erst bei sehr hoher Auflösung einzeln erkennbar sind.

Der Wirkungsquerschnitt für diskrete Anregungen  $\sigma_{\text{exc}}$  ist eine Summe aus den Anregungswirkungsquerschnitten jedes einzelnen Zustands<sup>3</sup>. Er beträgt unge-

---

<sup>3</sup> $\sigma_{\text{exc}}$  beinhaltet somit auch die angeregten Schwingungsterme des D-Zustands.

#### 4.2 Inelastische Streuung von Elektronen an molekularem Tritium



**Abbildung 4.2: Energieverlustspektrum hochenergetischer Elektronen.** Gezeigt ist das Spektrum nach dem Durchgang von 25 keV-Elektronen durch molekularen Wasserstoff bei einem Auflösungsvermögen von  $\approx 0.04$  eV. Quelle: [Gei64]

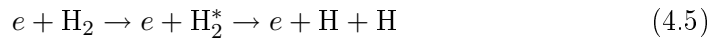
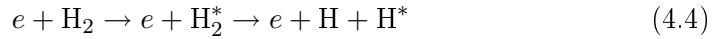
fähr [Liu72]:

$$\sigma_{\text{exc}} = 4\pi a_0^2 z^2 \frac{R}{T} \left( (0.62 \pm 0.087) \ln \left( \frac{T}{R} \right) + (0.03 \pm 0.005) \right).$$

Hierbei sind  $a_0$  der Bohr'sche Radius,  $z$  die Ladung des einfallenden Teilchens,  $R$  die Rydbergenergie und  $T = \frac{1}{2} m_e v^2$  die kinetische Energie des einfallenden Teilchens mit der Elektronenmasse  $m_e$ .

Es gibt auch Vibrations- und Rotationsanregungen von Tritiummolekülen im Bereich  $\Delta E \lesssim 2$  eV. Die Vibrationsanregungen haben bei hohen Elektronenenergien jedoch sehr kleine Wirkungsquerschnitte, und die Rotationseffekte gehen als quasielastische Streuung in den Wirkungsquerschnitt elastischer Streuung ein. Daher können die Molekülanregungen in diesem Energiebereich vernachlässigt werden [Glu03].

Bei der dissoziativen Anregung erfolgt eine Anregung des Wasserstoffmoleküls, gefolgt von Dissoziation:



Die Schwellenenergie für den Prozess gemäß Gleichung (4.4) beträgt  $\approx 15.3$  eV, während die Energie für den zweiten Prozess (4.5) bei  $\approx 10$  eV liegt. Der Wirkungsquerschnitt dissoziativer Anregung  $\sigma_{\text{diss}}$  beträgt näherungsweise [Liu72]:

$$\sigma_{\text{diss}} = 4\pi a_0^2 z^2 \frac{R}{T} \left( (0.18 \pm 0.02) \ln \left( \frac{T}{R} \right) + (0.25 \pm 0.06) \right).$$

## 4 Transmission der Elektronen

Diese Gleichung enthält ebenfalls den Wirkungsquerschnitt dissoziativer Ionisation, bei der ein angeregtes  $\text{H}_2^{+*}$ -Ion in  $\text{H}^+$  und  $\text{H}^*$  zerfällt. Für hochenergetische Elektronen ist jedoch nur der Prozess (4.4) bedeutsam, dessen Wirkungsquerschnitt mit sinkender Energie rapide abnimmt [Vro69]. Bei hohen Elektronenenergien kann der Mechanismus der dissoziativen Ionisation somit vernachlässigt werden.

Der Wirkungsquerschnitt der gesamten Anregung  $\sigma_{\text{exc}_{\text{tot}}}$  beträgt nun:

$$\sigma_{\text{exc}_{\text{tot}}} = \sigma_{\text{exc}} + \sigma_{\text{diss}}.$$

### 4.2.2 Ionisation

Neben der Anregung des Wasserstoffmoleküls ist auch Ionisation von Molekülen möglich. Die Ionisierungsenergie beginnt bei  $\approx 15.4$  eV und zeigt sich im Energieverlustspektrum als schwaches Kontinuum [Gei64].

Bei der Ionisierung von  $\text{H}_2$  entstehen entweder negative Ionen  $\text{H}_2^-$  durch Aufnahme eines Elektrons oder positive Ionen  $\text{H}_2^+$  durch Entfernen eines Elektrons. Der Ionisierungsprozess negativer Ionen kann jedoch für hochenergetische Elektronen vernachlässigt werden, so dass nur die Bildung positiver Ionen berücksichtigt werden muss [Gold65].

Näherungsweise gilt für den Wirkungsquerschnitt  $\sigma_{\text{ion}}$  der Ionisation [Liu72]:

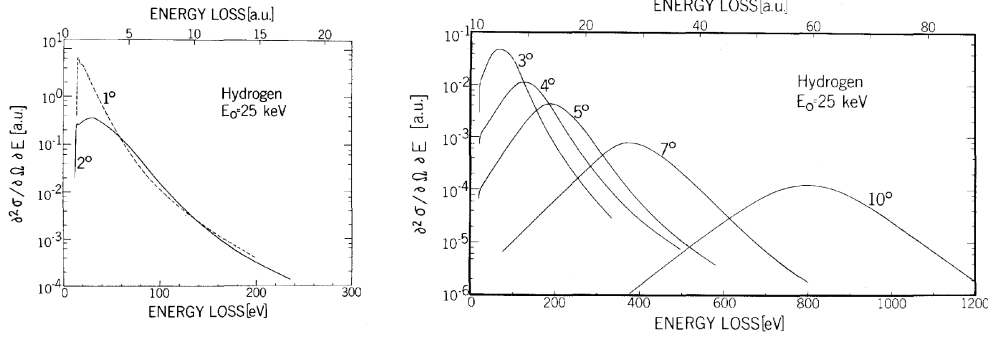
$$\sigma_{\text{ion}} = 4\pi a_0^2 z^2 \frac{R}{T} \left( (0.71 \pm 0.02) \ln \left( \frac{T}{R} \right) + (1.30 \pm 0.40) \right).$$

### 4.2.3 Winkeländerung nach einem Stoß

Ulsh et al. führten Experimente durch, bei denen 25 keV-Elektronen an molekularem Wasserstoff streuten. Bei diesen Experimenten wurden normierte differentielle Wirkungsquerschnitte gemessen für Streuwinkel von  $1^\circ$ ,  $2^\circ$ ,  $3^\circ$ ,  $4^\circ$ ,  $5^\circ$ ,  $7^\circ$  und  $10^\circ$ . Als Ergebnis dieser Messungen kann festgehalten werden, dass die Wirkungsquerschnitte umso größer sind, je kleiner die Streuwinkel sind. Außerdem existieren große Streuwinkel erst bei höheren Energieverlusten, wie in Abb. 4.3 zu erkennen ist [Uls72]. Bei höheren Streuwinkeln entspricht der Streuprozess einer quasifreien Elektronstreuung ähnlich dem Comptoneffekt, da der Energieverlust  $\Delta E$  deutlich größer ist als die Bindungsenergie des Elektrons im Molekül.

Innerhalb der letzten 30 eV unterhalb der Endpunktsenergie, die beim KATRIN Experiment im Wesentlichen gemessen werden, sind lediglich Streuwinkel bis zu  $5^\circ$  von Bedeutung. Den größten Wirkungsquerschnitt in diesem Bereich erhält man für die Winkel  $1^\circ$  und  $2^\circ$ , die ein scharfes Anregungsmaximum bei einem Energieverlust von  $\approx 13$  eV haben.

### 4.3 Berücksichtigung der Energieverluste



**Abbildung 4.3: Winkeländerung nach einem Stoß.** Dargestellt ist der differentielle Wirkungsquerschnitt als Funktion des Energieverlustes für verschiedene Streuwinkel. Im linken Diagramm ist für die Winkel  $1^\circ$  und  $2^\circ$  das Anregungsmaximum bei  $\approx 13$  eV und das bei  $\approx 15$  eV beginnende Ionisationskontinuum zu erkennen. Weiterhin ist in beiden Diagrammen zu sehen, dass der differentielle Wirkungsquerschnitt für größere Winkel immer kleiner wird und sich zu höheren Energieverlusten verschiebt. Bei den größeren Winkeln handelt es sich um quasi-freie Elektronenstreuung. Quelle: [Uls72]

## 4.3 Berücksichtigung der Energieverluste

Wie in Abschnitt 4.1 bereits erwähnt, muss eine Modifizierung der analytischen Transmissionsfunktion aufgrund der Anregung und Ionisation der Tritiummoleküle durch die  $\beta$ -Elektronen erfolgen. Die abgewandelte Funktion wird Antwortfunktion  $f_{\text{res}}(E, qU)$  genannt und ist eine  $i$ -fache ( $i = 0, 1, 2, \dots$ ) Faltung der Energieverlustverteilung der Elektronen in der Tritiumquelle mit der analytischen Transmissionsfunktion  $T(E, qU)$ . Die Energieverlustverteilung wird durch die Energieverlustfunktion  $f(\Delta E)$  beschrieben (s. Abb. 4.2), die im Folgenden erläutert wird.

### 4.3.1 Die Energieverlustfunktion

Beim Tritium- $\beta$ -Zerfall entstehen Elektronen, die beim Durchqueren der Quelle Energie durch inelastische Stöße verlieren können. Dies hat zur Folge, dass die Elektronen, falls sie den Detektor erreichen, mit einer geringeren Energie als ihrer Startenergie nachgewiesen werden. Der Energieverlust wird durch die normierte Energieverlustfunktion  $f(\Delta E)$  beschrieben, welche den totalen inelastischen Wirkungsquerschnitt  $\sigma_{\text{tot}}$  und den energiedifferentiellen Wirkungsquerschnitt  $d\sigma/d\Delta E$  beinhaltet [Ase00]:

$$f(\Delta E) = \frac{1}{\sigma_{\text{tot}}} \cdot \frac{d\sigma}{d\Delta E} \quad (4.6)$$

$$1 = \int_0^{E/2} f(\Delta E) d\Delta E$$

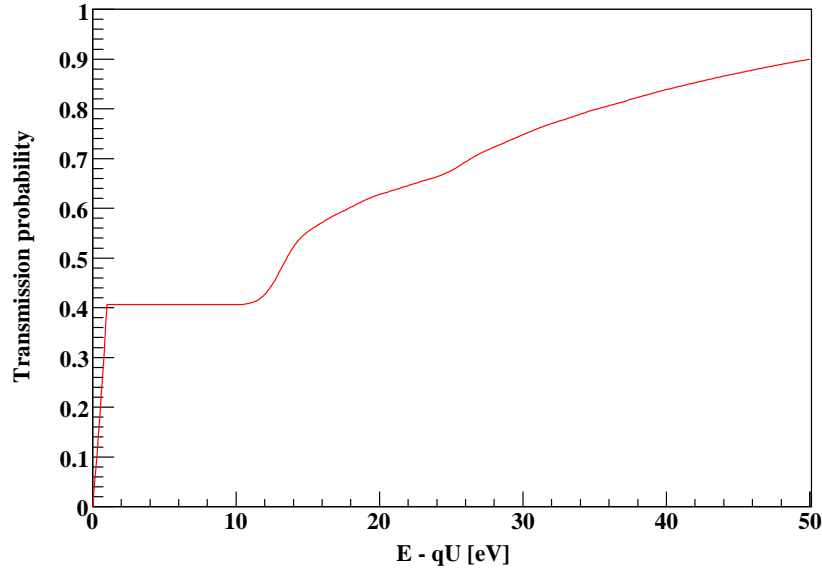
## 4 Transmission der Elektronen

$\Delta E$  beschreibt den Energieverlust der Elektronen.

Wie in der Einleitung erwähnt, besteht das Ziel dieser Arbeit darin, eine Methode zu entwickeln, mit der die Energieverluste der Elektronen innerhalb der Quelle – und damit die Form der Energieverlustfunktion – präzise bestimmt werden können.

### 4.3.2 Die Antwortfunktion

Die normierte Antwortfunktion  $f_{\text{res}}(E, qU)$  ist in Abb. 4.4 als Funktion der Retardierungsenergie  $qU$  für monoenergetische, isotrop emittierte  $\beta$ -Elektronen dargestellt. Sie basiert auf den Standardparametern des KATRIN Experimentes: Die Energieauflösung beträgt  $\Delta E = 0.93$  eV, die Quellsäulendichte  $\rho d = 5 \cdot$



**Abbildung 4.4: Die Antwortfunktion des KATRIN Experiments.** Dargestellt ist der Verlauf der normierten Antwortfunktion für isotrop emittierte  $\beta$ -Elektronen mit fester Startenergie  $E = 18.6$  keV als Funktion der Retardierungsenergie  $qU$ . Die Energieverlustverteilung der Elektronen in der Quelle für eine Säulendichte  $\rho d = 5 \cdot 10^{17} \text{ cm}^{-2}$  wird hierfür mit der Transmissionsfunktion gefaltet. Die Transmissionswahrscheinlichkeit ungestreuter Elektronen liegt bei  $P_0 = 41.3\%$  und definiert das Plateau der Funktion. Wie bei der Transmissionsfunktion beträgt die Energieauflösung  $\Delta E = 0.93$  eV, und der maximale Startwinkel ist auf  $\theta = 50.77^\circ$  begrenzt.

$10^{17} \text{ cm}^{-2}$ , und der maximal akzeptierte Startwinkel ist  $\theta_{\text{max}} = 50.77^\circ$ .

Wegen der scharfen Energieauflösung und der hohen Schwelle für die Anregung von  $T_2$  lassen sich in der Funktion zwei Bereiche unterscheiden:

- Im Bereich von 0 eV bis  $\approx 12$  eV verlieren die Elektronen keine Energie durch inelastische Stöße. Dieser Bereich ist charakterisiert durch den

### 4.3 Berücksichtigung der Energieverluste

scharfen Anstieg und das Plateau, welches den Prozentsatz der ungestreuten Elektronen angibt.

- Ab  $\approx 12$  eV gibt es einen weiteren Anstieg der Antwortfunktion, und dieser Teil der Funktion repräsentiert den Anteil der inelastisch gestreuten Elektronen, die aufgrund ihres Energieverlustes erst bei geringeren Retardierungsspannungen transmittiert werden.

Das relative Verhältnis zwischen gestreuten und ungestreuten Elektronen – und damit auch die relative Höhe des Plateaus – wird durch die Quellsäulendichte festgelegt.

Mathematisch kann die Antwortfunktion unter Berücksichtigung der Streuwahrscheinlichkeiten  $P_0, P_1, P_2, \dots$  folgendermaßen dargestellt werden:

$$\begin{aligned}
 f_{\text{res}}(E, qU) = & T(E, qU) \otimes P_0 & + \\
 & T(E, qU) \otimes P_1 \cdot f(\Delta E) & + \\
 & T(E, qU) \otimes P_2 \cdot (f(\Delta E) \otimes f(\Delta E)) & + \\
 & \dots & 
 \end{aligned} \tag{4.7}$$

Dies bedeutet, dass für  $i$ -fache Streuung ( $i = 0, 1, 2, \dots$ ) die Energieverlustfunktion  $i$ -fach mit der Transmissionsfunktion gefaltet wird. In der Gleichung werden keine winkeländernden Stöße berücksichtigt, sonst gäbe es eine Korrelation zwischen  $f(\Delta E)$  und  $T(E, qU)$ .

Die Antwortfunktion des KATRIN Experimentes beinhaltet, dass die letzten  $\approx 10$  eV unterhalb der Endpunktenergie  $E_0$ , d.h. der Bereich mit der höchsten Sensitivität auf die Neutrinomasse  $m_\nu$ , nicht durch inelastische Streuung beeinflusst werden. Auch für größere Messintervalle von 20 eV (25 eV) unterhalb der Endpunktenergie beträgt der Anteil inelastischer Streuung an der gesamten Signalrate nur 1% (2%) [Osi01].

## 5 Experimentelle Bestimmung der Energieverlustfunktion

In diesem Kapitel wird erläutert, wie die Energieverlustfunktion mit experimentellen Messungen bestimmt werden kann. Die Messungen werden unter Verwendung einer Elektronenkanone durchgeführt und mit einer Monte-Carlo-Simulation nachgebildet. Das Simulationsprogramm liefert realitätsnahe Daten, die verwendet werden können, um die Energieverlustfunktion  $f(\Delta E)$  aus den Messergebnissen zu extrahieren. Nach der Beschreibung des Simulationsprogramms werden die Analyseschritte erläutert, mit denen die Einfachstreuungsfunktion  $\varepsilon_1(\Delta E)$  ermittelt werden kann. Die Bestimmung der eigentlichen Energieverlustfunktion ist Thema des nächsten Kapitels.

### 5.1 Die Elektronenkanone

Die Energieverlustfunktion  $f(\Delta E)$ , die als Faltung mit der Transmissionsfunktion  $T(E, qU)$  Bestandteil der Antwortfunktion  $f_{\text{res}}(E, qU)$  ist, soll vor Beginn der eigentlichen Messungen des KATRIN Experimentes experimentell bestimmt werden.

Zu diesem Zweck wird eine Elektronenkanone verwendet, die hinter der WGTS (rear system) in einem Magnetfeld  $B_{\text{egun}}$  steht, das schwächer ist als das Magnetfeld  $B_S$  der Quelle. Aus diesem Grund gilt für die Elektronen vor dem Eintritt in die Quelle das gleiche Prinzip wie vor dem Eintritt in das Spektrometer: Elektronen mit zu großen Startwinkeln werden magnetisch reflektiert. Analog zu Gleichung (4.3) gilt somit für den maximal akzeptierten Startwinkel:

$$\theta_{\text{egun}} = \text{asin} \left( \sqrt{\frac{B_{\text{egun}}}{B_S}} \right) \quad (5.1)$$

Durch Messungen der Antwortfunktionen für verschiedene Werte der Säulendichte  $\rho d$  kann man die Energieverlustfunktion experimentell bestimmen<sup>1</sup>.

### 5.2 Das Simulationsprogramm

Die Simulation der Messungen, welche Grundlage für alle weiteren Berechnungen ist, erfolgt mit numerischen Monte-Carlo-Methoden. Im Simulationsprogramm

---

<sup>1</sup>Das theoretische Verfahren kann in [Kat04] nachgelesen werden.



## 5.2 Das Simulationsprogramm

hat die Elektronenkanone eine konstante Intensität sowie ein gaußförmiges Energiespektrum. Da zum jetzigen Zeitpunkt keine Details über die tatsächliche Winkelverteilung der Elektronenkanone bekannt sind, wird eine isotrope Winkelverteilung am Eingang der WGTS angenommen.

Innerhalb des Simulationsprogramms durchläuft jedes Elektron auf dem Weg von der Elektronenkanone zum Detektor bestimmte Stationen, die im Folgenden erläutert werden.

**Start der Elektronen** Zunächst werden Startwinkel  $\theta$  und Energie  $E$  des Elektrons durch Zufallszahlen bestimmt. Die Energie wird gaußverteilt gewürfelt mit dem Erwartungswert  $\mu = 18600$  eV und der Standardabweichung  $\sigma = 0.5$  eV. Der Winkel kann am Eingang der WGTS Werte zwischen  $0 \leq \theta \leq 6^\circ$  einnehmen. Dieser Wert wird gewählt, da zu diesem Zeitpunkt keine Aussage über das Design der Elektronenkanone gemacht werden kann. Sowohl der Energiewert als auch die Größe des Winkels werden mit dem Zufallszahlengenerator *TRandom* erzeugt, der Teil der am Cern entwickelten, objektorientierten Software *Root* ist. Auch alle weiteren Zufallszahlen werden mit diesem Programm generiert.

**Wechselwirkungen in der Quelle** Danach wird überprüft, ob das Elektron beim Durchgang durch die WGTS mit einem oder mehreren Tritiummolekülen wechselwirkt und Energie durch inelastische Stöße verliert. Dies geschieht wie folgt:

Die gesamte Länge der Tritiumquelle wird durch die Säulendichte  $\rho d$  ausgedrückt (s. Abb. 5.2). Gemäß Gleichung (3.5) gilt für die mittlere freie Säulendichte:

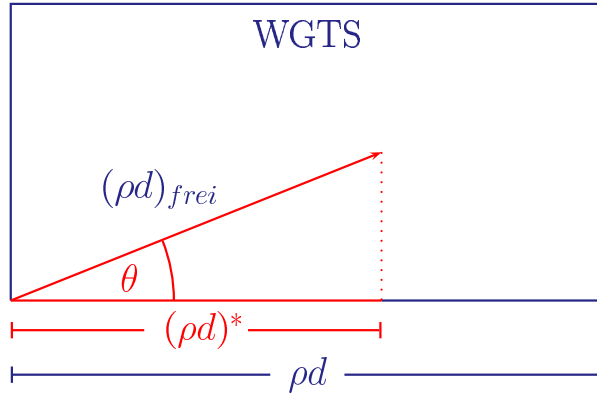
$$(\rho d)_{\text{frei}} = \frac{1}{\sigma_{\text{tot}}}.$$

Diese gibt die durchschnittliche Weglänge an, die ein Elektron ohne Wechselwirkung mit einem Tritiummolekül innerhalb der Quelle zurücklegt. Da der Wechselwirkungspunkt eines Stoßes abhängig ist von der mittleren freien Säulendichte und zusätzlich von dem Winkel  $\theta$ , unter dem das Elektron in die Quelle eintritt, muss dies bei der Berechnung berücksichtigt werden. Daher gilt für den Ort der Wechselwirkung  $(\rho d)^*$ :

$$(\rho d)^* = \frac{1}{\sigma_{\text{tot}}} \cdot \cos \theta.$$

Im Computerprogramm wird der Weg durch die Quelle nun wie folgt simuliert:

Der im Mittel zurückgelegte Weg eines Elektrons in der WGTS folgt einer Exponentialverteilung mit dem Erwartungswert der mittleren freien Säulendichte  $(\rho d)_{\text{frei}}$  und wird daher exponentialverteilt gewürfelt. Danach wird überprüft, ob der Ort der Wechselwirkung noch innerhalb der Quelle liegt, d.h.  $(\rho d)^* \leq \rho d$ . Ist dies nicht der Fall, so kann das Elektron die Quelle ungestört durchqueren. Findet eine Wechselwirkung innerhalb



**Abbildung 5.1: Wechselwirkung in der Tritiumquelle.** In der Abbildung ist die WGTS dargestellt, deren Länge in der Einheit der Säulendichte  $\rho d$  angegeben wird. Ein Elektron, das unter dem Winkel  $\theta$  in die Quelle eintritt, stößt mit einem Tritiummolekül zusammen, nachdem es eine Strecke, die der mittleren freien Säulendichte  $(\rho d)_{\text{frei}}$  entspricht, zurückgelegt hat. Im dargestellten Fall wird die Bedingung  $(\rho d)^* \leq \rho d$  für eine Wechselwirkung innerhalb der Quelle erfüllt.

der Quelle statt, so verliert das Elektron Energie und ändert seinen Winkel.

**Energieverlust und Winkeländerung** Mit Hilfe der Energieverlustfunktion des Troitsker Experimentes, das in Kapitel 2 erwähnt worden ist, wird der Energieverlust der Elektronen festgelegt. Beim Troitsker Aufbau wurde im Gegensatz zum Mainzer Experiment eine gasförmige Tritiumquelle verwendet. Auch beim KATRIN Experiment kommt eine gasförmige Quelle zum Einsatz, daher wird für das Simulationsprogramm die Troitsker Funktion als Modell genommen.

An das bei diesem Experiment gemessene Transmissionsspektrum wurde eine Energieverlustfunktion bestehend aus einer Gauß- und einer Lorentzkurve angepasst, so dass die Energieverluste durch die normierte Funktion

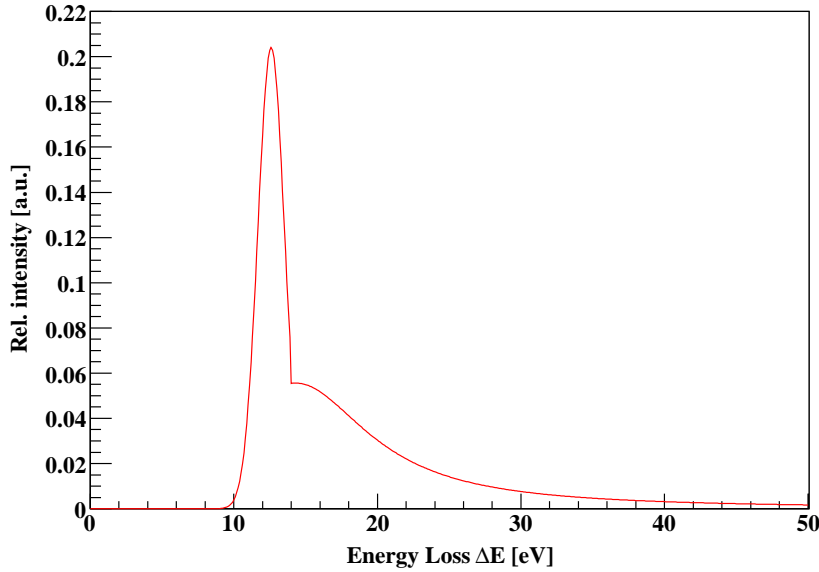
$$f(\Delta E) = \begin{cases} A_1 \cdot \exp\left(-\frac{2(\Delta E - \epsilon_1)^2}{\omega_1^2}\right) & \text{für } \Delta E < \epsilon_c \\ A_2 \cdot \frac{\omega_2^2}{\omega_2^2 + 4(\Delta E - \epsilon_2)^2} & \text{für } \Delta E \geq \epsilon_c \end{cases} \quad (5.2)$$

beschrieben werden können [Ase00]<sup>2</sup>, die in Abb. 5.2 dargestellt ist. Die Gaußkurve beschreibt das Anregungsspektrum der Elektronen mit einem Maximum bei 12.6 eV, während die Lorentzkurve das Kontinuum wiedergibt, das vorwiegend durch die bei 15.4 eV beginnende Ionisierung des Tritiummoleküls hervorgerufen wird.

Da die Energieverlustfunktion eine kontinuierliche Funktion ist, wird in der Simulation das Von Neumann-Verfahren verwendet, um diskrete Energieverluste zu würfeln.

Bei diesem Verfahren wird zunächst eine imaginäre Box um die Funktion gelegt und dann je eine Zufallszahl für den Energieverlust  $\Delta E^*$  und die Amplitude  $A$  der Funktion innerhalb dieser Box gewürfelt. Für die

<sup>2</sup>Der Referenz [Ase00] können ebenfalls die Parameter der Funktion entnommen werden.



**Abbildung 5.2: Energieverlustfunktion des Troitsker Experimentes.** Dargestellt ist das an die Troitsker Daten angepasste Energieverlustspektrum als Funktion des Energieverlustes  $\Delta E$ . Es besteht aus einer Gauß- und einer Lorentzkurve, die entsprechend das Anregungsspektrum mit einem Maximum bei 12.6 eV und das Kontinuum, hervorgerufen durch die bei 15.4 eV beginnende Ionisierungsenergie, zeigen.

Funktion gemäß Gleichung (5.2) bedeutet dies, dass  $\Delta E^*$ -Werte zwischen  $\Delta E^* = 0$  und  $\Delta E^* = 50$  sowie  $A$ -Werte zwischen  $A = 0$  und  $A = 0.204$  zufällig bestimmt werden.

Danach wird überprüft, ob die Energieverlustfunktion gemäß Gleichung (5.2) in Abhängigkeit des gewürfelten  $\Delta E^*$ -Wertes kleiner oder gleich der gewürfelten Amplitude  $A$ -Wert ist, d.h.

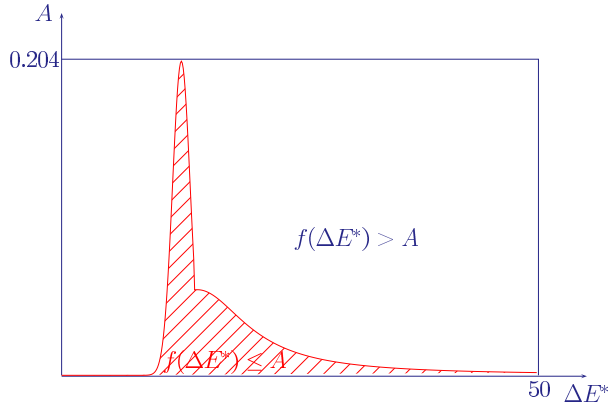
$$f(\Delta E^*) \leq A. \quad (5.3)$$

Ist diese Gleichung erfüllt, so liegt der zufällige Funktionswert unterhalb der analytischen Funktion. Der gewürfelte  $\Delta E^*$ -Wert bestimmt den Energieverlust, der von der Startenergie subtrahiert wird, so dass das Elektron eine geringere Energie  $E_{\text{neu}}$  besitzt. Für den anderen Fall werden erneut Zufallszahlen gewürfelt, bis Gleichung (5.3) erfüllt ist.

Der beschriebene Prozess wird für jedes Elektron durchgeführt, so dass man mit dem Von Neumann-Verfahren ein Histogramm von Energieverlusten erhält, das die analytische Funktion beschreibt. Das Prinzip dieses Verfahrens wird in Abb. 5.3 noch einmal verdeutlicht.

Neben der Energie ändert sich nach jedem Stoß auch der Winkel, unter dem sich das Elektron auf Zyklotronbahnen um die jeweilige Magnetfeldlinie bewegt. Diese Winkeländerungen werden nicht durch Gleichung (4.7) beschrieben. Das Elektron wird durch den Stoß abgelenkt und danach auf

## 5 Experimentelle Bestimmung der Energieverlustfunktion



**Abbildung 5.3: Von Neumann-Verfahren.** Bei diesem Verfahren werden zunächst Zufallszahlen für  $\Delta E^*$  sowie zufällige Zahlen für die Amplitude  $A$  innerhalb der Box bestimmt. Danach wird geprüft, ob die Energieverlustfunktion in Abhängigkeit des gewürfelten  $\Delta E^*$ -Wertes kleiner oder gleich dem gewürfelten  $A$ -Wert ist, also in dem rot schraffierten Bereich liegt. Für jedes Elektron wird der Prozess so lange wiederholt, bis die Bedingung  $f(\Delta E^*) \leq A$  erfüllt ist.

eine neue Bahn gezwungen, entlang derer es sich dann unter dem neuen Winkel bewegt. Hierbei gibt es eine Korrelation zwischen Energieverlust und Streuwinkel aufgrund der Energie- und Impulserhaltung (s. Abb. 4.3). Innerhalb der letzten 30 eV unterhalb der Endpunktenergie, die im Wesentlichen beim KATRIN Experiment gemessen werden, ist die Änderung des Winkels nach einem Stoß sehr klein (vgl. Abschnitt 4.2).

Im Simulationsprogramm wird die Winkeländerung nicht in Abhängigkeit des Energieverlustes bestimmt, sondern wegen der kleinen Streuwinkel für jedes Elektron zufallsverteilt zwischen  $0^\circ \leq \beta \leq 2^\circ$  gewürfelt. Der gewürfelte Wert des Streuwinkels wird zum jeweiligen Winkel  $\theta$  addiert, und man erhält auf diese Weise den Winkel  $\theta_{\text{neu}}$ .

Nach jedem Stoß wird erneut ein Wechselwirkungspunkt gewürfelt und der zurückgelegte Weg bis zu diesem Punkt zu  $(\rho d)^*$  addiert. Gilt immer noch  $(\rho d)^* \leq \rho d$ , so wird erneut ein Energieverlust und eine Winkeländerung gewürfelt. Der Vorgang wird wiederholt, bis der Ort der Wechselwirkung außerhalb der Quelle liegt, d.h.  $(\rho d)^* > \rho d$ . Wird die letztgenannte Bedingung erfüllt, so erfolgt eine erneute Überprüfung des Winkels, unter dem das Elektron die Quelle verlässt.

**Verlassen der Quelle** Nach dem Durchqueren der Quelle, werden alle Elektronen mit größeren Winkeln  $\theta_{\text{neu}}$  als der maximal akzeptierte Winkel  $\theta_{\text{max}}$  gemäß Gleichung (4.3) magnetisch reflektiert. Mit den bereits erwähnten Standardparametern ergibt sich ein maximal akzeptierter Winkel  $\theta_{\text{max}} = 50.77^\circ$ .

**Überwindung des elektrischen Filters** Zuletzt wird in der Analysierebene des Hauptspektrometers die elektrostatische Energieanalyse nach Gleichung (3.3) durchgeführt. Analysiert wird in diesem Fall die Energie  $E_{\text{neu}}$  des Elektrons beim Verlassen der Quelle – diese muss nicht identisch mit der Startenergie  $E$  sein – nachdem der Anteil an Transversalenergie  $E_\perp$  fast

### 5.3 Vorgehensweise zur Bestimmung der Energieverlustfunktion

vollständig in longitudinale Energie  $E_{\parallel}$  gemäß Gleichung (3.2) umgewandelt worden ist. In der Simulation werden für das elektrische Potential  $qU$  Werte zwischen 18605 eV und 18550 eV gewählt. Eine vorher festgelegte Anzahl an Elektronen durchläuft dann den beschriebenen Weg von der Elektronenkanone zum Detektor für jeden Spannungsschritt, so dass die Werte für die Überschussenergien der detektierten Elektronen zwischen -5 eV und 50 eV liegen.

Jedes Elektron, das Gleichung (3.3) erfüllt, wird nun gezählt. Somit erhält man für alle Spannungsschritte eine gewisse Anzahl an Elektronen, die transmittiert und am Detektor nachgewiesen werden. Innerhalb des beschriebenen Programms werden das Verlassen der Quelle und die Überwindung des elektrischen Filters gleichzeitig geprüft. Die gesamte Simulation ist vereinfacht in einem Flussdiagramm ohne Berücksichtigung der adiabatischen Transformation dargestellt (s. Abb. 5.4).

## 5.3 Vorgehensweise zur Bestimmung der Energieverlustfunktion

Nach der Beschreibung des Simulationsprogramms wird nun erläutert, auf welche Weise die Energieverlustfunktion  $f(\Delta E)$  bestimmt werden kann.

### 5.3.1 Berechnung der Streuwahrscheinlichkeiten

Die Berechnung der Streuwahrscheinlichkeiten  $P_k$  ( $k = 0, 1, 2, \dots$ ) erfolgt mit Hilfe der Poissonverteilung. Die Verteilungsfunktion lautet:

$$f(k; \lambda) = \frac{\lambda^k}{k!} e^{-\lambda} \quad k = 0, 1, 2, \dots$$

Hierbei gibt  $k$  die Anzahl der Ereignisse und  $\lambda$  – gleichzeitig Erwartungswert und Varianz der Verteilung – die Zahl der erwarteten Ereignisse innerhalb eines vorgegebenen Intervalls an.

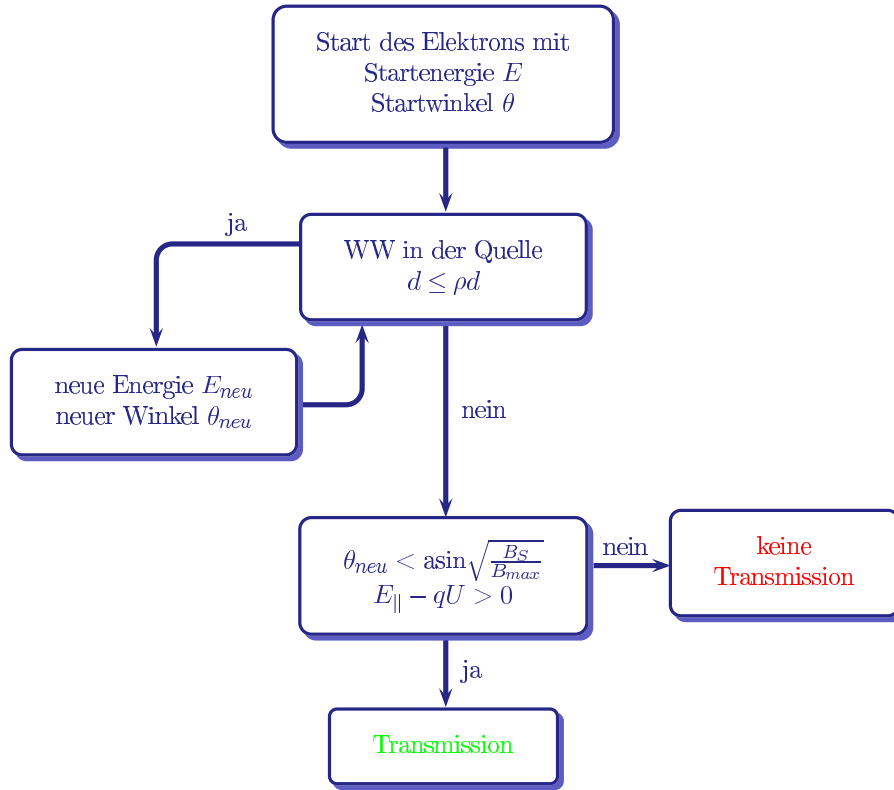
Die zu berechnenden Stoßwahrscheinlichkeiten hängen ab von dem Verhältnis der Säulendichte  $\rho^d / \cos \theta$  und der freien Säulendichte  $(\rho d)_{\text{frei}}$  in Abhängigkeit der Eintrittswinkel  $\theta$  in die Quelle. Für die Anzahl der erwarteten Stoßereignisse  $\mu(\theta)$  gilt somit:

$$\mu(\theta) = \lambda = \frac{\rho d}{(\rho d)_{\text{frei}} \cdot \cos \theta}.$$

Aus dieser Gleichung folgt sofort für die Streuwahrscheinlichkeiten:

$$P_k(\mu(\theta)) = \frac{\mu(\theta)^k}{k!} e^{-\mu(\theta)} \quad k = 0, 1, 2, \dots \quad (5.4)$$

## 5 Experimentelle Bestimmung der Energieverlustfunktion



**Abbildung 5.4: Vereinfachtes Flussdiagramm der Simulation.** Dargestellt ist der Weg eines Elektrons mit einer Startenergie  $E$  und einem Startwinkel  $\theta$  von der Elektronenkanone zum Detektor ohne Berücksichtigung der adiabatischen Transformation. Innerhalb der WGTS wird überprüft, ob das Elektron Energie durch inelastische Stöße verliert. Ist dies der Fall, so erhält es eine geringere Energie  $E_{neu}$  sowie einen neuen Winkel  $\theta_{neu}$ , unter dem es sich auf Zyklotronbahnen entlang der Magnetfeldlinien bewegt. Nach dem Durchqueren der Quelle kann das Elektron das Spektrometer nur dann erreichen, wenn sein Winkel kleiner ist als  $a \sin \sqrt{\frac{B_s}{B_{max}}}$ . Zuletzt erfolgt die Energieanalyse in der Mitte des Spektrometers. Ist die Longitudinalenergie  $E_{||}$  größer als das elektrische Potential  $qU$ , so erfolgt eine Transmission, und das Elektron wird positiv gezählt.

Diese Gleichung ist jedoch nicht ausreichend, da die Winkelverteilung der Elektronenkanone berücksichtigt werden muss, die durch eine normierte Funktion  $f'(\theta)$  ausgedrückt werden kann. Bestimmt wird die Funktion durch die Beschaffenheit der Elektronenkanone. Unter Verwendung der adiabatischen Transformationsregel gemäß Gleichung (3.2) kann dann die normierte Winkelverteilung  $f(\theta)$  der WGTS berechnet werden.

Wie bereits erwähnt, steht das Design der Elektronenkanone noch nicht fest, daher wird innerhalb der Simulation eine isotrope Winkelverteilung am Eingang

### 5.3 Vorgehensweise zur Bestimmung der Energieverlustfunktion

der WGTS angenommen. Es gilt somit:

$$\begin{aligned} f(\theta) &= \sin \theta \\ \text{mit} \quad \int_0^{\pi/2} f(\theta) d\theta &= 1 \end{aligned} \quad (5.5)$$

Werden die Gleichungen (5.4) und (5.5) kombiniert, so können die Streuwahrscheinlichkeiten  $\overline{P}_k$  unter Berücksichtigung der Winkelverteilung berechnet werden:

$$\begin{aligned} \overline{P}_k(\mu(\theta)) &= \int_0^{\pi/2} f(\theta) \cdot P_k(\mu(\theta)) d\theta \\ &= \int_0^{\pi/2} \sin \theta \cdot \frac{\mu(\theta)^k}{k!} e^{-\mu(\theta)} d\theta \quad k = 0, 1, 2, \dots \end{aligned} \quad (5.6)$$

#### 5.3.2 Messung der experimentellen Transmissionsfunktion

Die Transmissionsfunktion  $T_{\text{egun}}(E, qU)$  der Elektronenkanone kann bestimmt werden, indem eine Leermessung ohne Tritiummoleküle in der Quelle ( $\rho d = 0$ ) durchgeführt wird, da die Elektronen in diesem Fall keine Energie durch inelastische Streuung verlieren. Mathematisch ist die Funktion eine Faltung der analytischen Transmissionsfunktion  $T(e, qU)$  mit dem Energiespektrum der Elektronenquelle  $S_{\text{egun}}$ :

$$T_{\text{egun}}(E, qU) = T(E, qU) \otimes S_{\text{egun}} \quad (5.7)$$

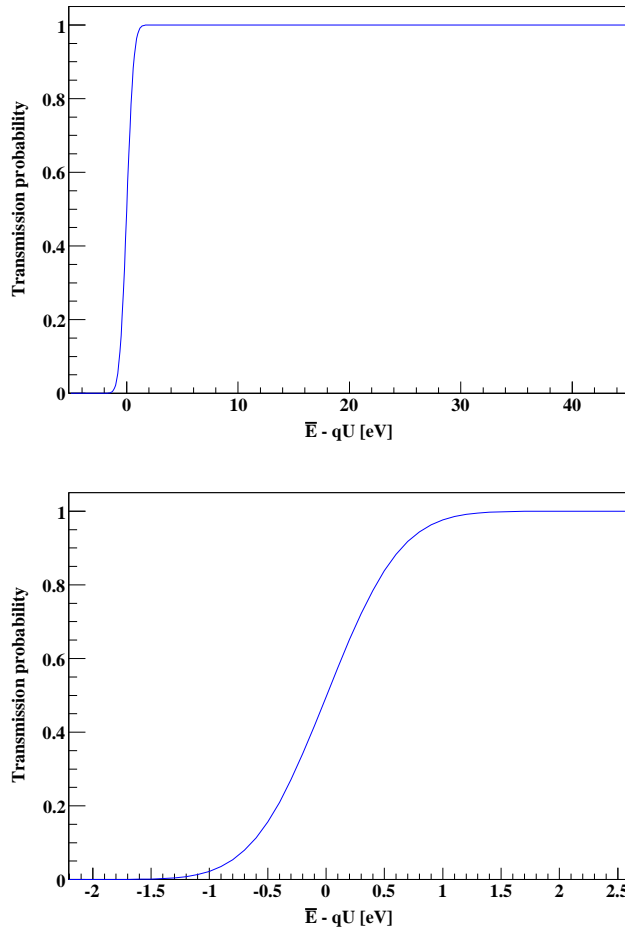
Da die Energie der Elektronenkanone gaußförmig verteilt ist, wird die analytische Transmissionsfunktion mit einer Gaußkurve gefaltet. Hierbei wird eine mögliche Korrelation von Energie und Startwinkel der Elektronen wegen des fehlenden Designs der Elektronenkanone vernachlässigt. Die Faltung führt zu einer Verbreiterung der experimentellen Transmissionsfunktion, außerdem sind der Anfang und das Ende des Anstiegs gaußverschmiert, wie in Abb. 5.5 zu sehen ist.

Eine weitere Besonderheit der experimentellen Transmissionsfunktion besteht darin, dass der Anstieg der Funktion im negativen Bereich beginnt. Zur Erklärung werden folgende Begriffe eingeführt:

$$\begin{aligned} \overline{E} &: \quad \text{mittlere Energie des Elektrons} \\ \eta &:= E - qU: \quad \text{Überschussenergie des Elektrons} \\ \overline{\eta} &:= \overline{E} - qU: \quad \text{mittlere Überschussenergie des Elektrons} \end{aligned}$$

Die Elektronen haben eine mittlere Energie  $\overline{E} = 18.6$  keV, daher gibt es eine mittlere Überschussenergie  $\overline{\eta}$ , die auf der  $x$ -Achse aufgetragen ist. Wegen der gaußförmigen Energieverteilung der Elektronenkanone starten auch Elektronen

## 5 Experimentelle Bestimmung der Energieverlustfunktion



**Abbildung 5.5:**  
**Experimentell**  
**bestimmte Trans-**  
**missionsfunktion.**

In dem oberen Diagramm wird die Funktion  $T_{\text{egun}}$  für Elektronen mit einer mittleren Energie  $\overline{E} = 18.6 \text{ keV}$  als Funktion der Retardierungsenergie  $qU$  gezeigt. Durch die Faltung mit dem gaußverteilten Energiespektrum der Elektronenkanone verbreitert sich die Funktion und ist am Anfang sowie Ende des Anstiegs gaußverschmiert. Dies wird an dem Ausschnitt der Funktion im unteren Diagramm noch einmal verdeutlicht.

mit einer um  $\epsilon \in \mathbb{R} > 0$  höheren Energie  $E = \overline{E} + \epsilon$ , welche damit eine Überschussenergie  $\eta = \overline{\eta} + \epsilon$  besitzen. Da die Überschussenergie größer ist als die mittlere Überschussenergie ( $\eta > \overline{\eta}$ ), können die Elektronen auch bei höheren Retardierungsenergien die Analysierebene überwinden. Dies entspricht in Abb. (5.5) einer Transmission im negativen Bereich.

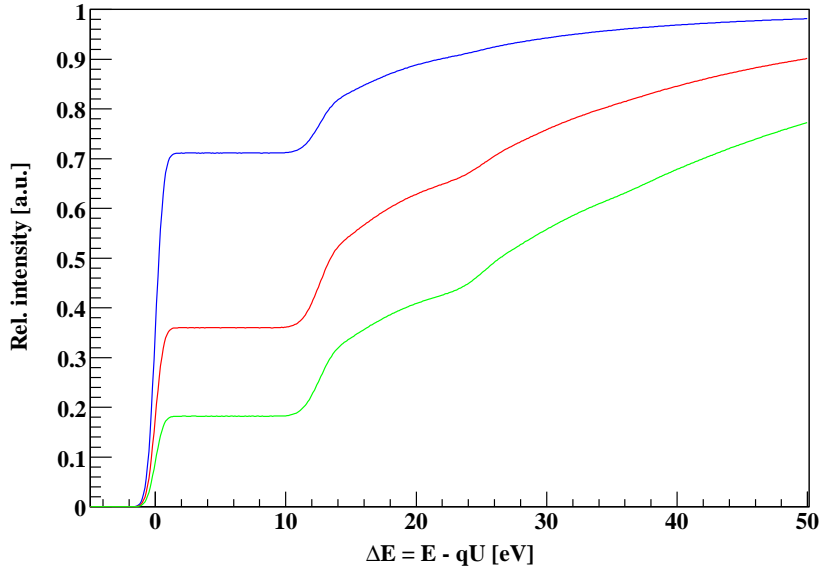
### 5.3.3 Messungen der Antwortfunktionen

Innerhalb des Simulationsprogramms können verschiedene Werte für die Säulendichte  $\rho d$  eingestellt werden. Abhängig von der Wahl des jeweiligen Wertes, erhält man normierte Antwortfunktionen, die in Abb. 5.6 gezeigt sind.

Die Simulationen sind für die Säulendichten  $\rho d = 5 \cdot 10^{-17} \text{ cm}^{-2}$  (grün),  $\rho d = 3 \cdot 10^{-17} \text{ cm}^{-2}$  (rot) und  $\rho d = 1 \cdot 10^{-17} \text{ cm}^{-2}$  (blau) durchgeführt worden. Es ist zu erkennen, dass das Plateau der Funktionen – und damit der Anteil der ungestreuten Elektronen – desto höher ist, je geringer der Wert der Säulendichte gewählt wird. Für die Referenzsäulendichte des KATRIN Experimentes ( $\rho d = 5 \cdot 10^{-17} \text{ cm}^{-2}$ ) beträgt der Anteil ungestreuter Elektronen ungefähr  $P_0 \approx 18\%$  und ist damit geringer als der Referenzwert  $P_0 = 41.3\%$  (s. Kapitel



### 5.3 Vorgehensweise zur Bestimmung der Energieverlustfunktion



**Abbildung 5.6: Messungen der Antwortfunktionen für verschiedene Säulendichten.** Das Diagramm zeigt simulierte Messungen für Elektronen mit einer mittleren Energie  $\bar{E} = 18.6$  keV als Funktion der Retardierungsenergie  $qU$ . Die Säulendichten betragen  $\rho d = 5 \cdot 10^{-17}$  cm $^{-2}$  (grün),  $\rho d = 3 \cdot 10^{-17}$  cm $^{-2}$  (rot) und  $\rho d = 1 \cdot 10^{-17}$  cm $^{-2}$  (blau). Es ist zu erkennen, dass der Anteil ungestreuter Elektronen (definiert durch das jeweilige Plateau) mit abnehmender Säulendichte zunimmt.

4.3.2). Dies ist darauf zurückzuführen, dass bei der eigentlichen Messung das Tritiumgas in die Mitte des Quellrohres eingeleitet wird, und die Elektronen somit im Mittel die Hälfte des Rohres durchlaufen. Dagegen passieren die Elektronen bei der beschriebenen Kalibrationsmessung immer die gesamte WGTS<sup>3</sup>. Weiterhin ist zu erkennen, dass Transmission für Überschussenergien möglich ist, die kleiner als die mittlere Überschussenergie und damit kleiner oder gleich Null sind. Dies liegt an der Gaußverteilung der Startenergie und ist bereits im vorangegangenen Abschnitt erklärt worden.

Wie bereits in Kapitel 4.3 erwähnt, lassen sich innerhalb jeder Antwortfunktion zwei Bereiche unterscheiden: Unterhalb von  $\approx 12$  eV findet keine Streuung statt, oberhalb dieses Wertes verlieren die Elektronen Energie durch inelastische Stoßprozesse.

Der zuletzt genannte Teil der Antwortfunktion lässt sich noch in weitere Bereiche unterteilen. Ab  $\approx 12$  eV ist ein Anstieg der Funktion zu erkennen, der auf einfache Streuprozesse zurückzuführen ist. Danach gibt es einen weiteren Anstieg der Antwortfunktion ab  $\approx 24$  eV, der zusätzlich zu den ionisierenden Einfachstreuungen den Prozess zweifacher Streuung widerspiegelt. Der Beginn der Dreifachstreuung ab  $\approx 36$  eV ist nur bei der grünen Kurve mit der höchsten Säulendichte zu erkennen. Bei den anderen beiden Kurven ist die Dichte der

<sup>3</sup>Der Zusammenhang zwischen dem Anteil ungestreuter Elektronen und Länge der WGTS ist gemäß Gleichung (5.4) nicht linear.

## 5 Experimentelle Bestimmung der Energieverlustfunktion

Tritummoleküle zu gering, um einen weiteren Anstieg erkennen zu lassen.

Die genannten Bereiche können durch die Größen  $\varepsilon_i(\Delta E)$  ( $i = 0, 1, 2, \dots$ ) beschrieben werden, die sich aus der experimentell bestimmte Transmissionsfunktion  $T_{\text{egun}}(E, qU)$  und der Form der Energieverlustfunktion  $d\sigma/d\Delta E$  zusammensetzen:

$$\begin{aligned}\varepsilon_0(\Delta E) &= T_{\text{egun}}(E, qU) \\ \varepsilon_1(\Delta E) &= T_{\text{egun}}(E, qU) \otimes \frac{d\sigma}{d\Delta E} \\ \varepsilon_2(\Delta E) &= T_{\text{egun}}(E, qU) \otimes \frac{d\sigma}{d\Delta E} \otimes \frac{d\sigma}{d\Delta E} \\ &\dots\end{aligned}\tag{5.8}$$

$\varepsilon_0(\Delta E)$  beschreibt den Bereich ohne Streuprozesse,  $\varepsilon_1(\Delta E)$  den Teil der Funktion, der einfache Streuung beinhaltet,  $\varepsilon_2(\Delta E)$  den Bereich, der zusätzlich zweifache Streuprozesse berücksichtigt usw.

Mit den Streuwahrscheinlichkeiten  $P_i(\mu(\theta))$  ( $i = 0, 1, 2, \dots$ ) nach Gleichung (5.6) lässt sich die Antwortfunktion gemäß Gleichung (4.7) umschreiben zu:

$$\begin{aligned}f_{\text{res}}(E, qU) &= T_{\text{egun}} \otimes P_0(\mu(\theta)) + \\ &\quad T_{\text{egun}} \otimes P_1(\mu(\theta)) \cdot \frac{d\sigma}{d\Delta E} + \\ &\quad T_{\text{egun}} \otimes P_2(\mu(\theta)) \cdot \frac{d\sigma}{d\Delta E} \otimes \frac{d\sigma}{d\Delta E} + \dots \\ &= P_0(\mu(\theta)) \cdot \varepsilon_0(\Delta E) + P_1(\mu(\theta)) \cdot \varepsilon_1(\Delta E) + P_2(\mu(\theta)) \cdot \varepsilon_2(\Delta E) + \dots\end{aligned}\tag{5.9}$$

Wie in Abschnitt 5.3.1 beschrieben, geht in die Berechnung der Streuwahrscheinlichkeiten u.a. der totale inelastische Wirkungsquerschnitt über die Relation  $(\rho d)_{\text{frei}} = 1/\sigma_{\text{tot}}$  ein. Die Form der Energieverlustfunktion ist damit normiert, und im weiteren Verlauf dieser Arbeit sind  $f(\Delta E)$  und  $d\sigma/d\Delta E$  als Bezeichnungen der Energieverlustfunktion gleichbedeutend.

Um die Energieverlustfunktion zu bestimmen, müssen zunächst die Funktionen  $\varepsilon_i(\Delta E)$  berechnet werden. Aus diesem Grund werden mehrere Messungen  $\alpha, \beta, \gamma, \dots$  der Antwortfunktion  $f_{\text{res}}(E, qU)$  für verschiedene Säulendichten simuliert, so dass unter Verwendung von Gleichung (5.9) ein lineares Gleichungssystem aufgestellt werden kann:

$$\begin{aligned}f_{\text{res}}^\alpha(E, qU) - P_0^\alpha(\mu(\theta)) \cdot \varepsilon_0(\Delta E) &= P_1^\alpha(\mu(\theta)) \cdot \varepsilon_1(\Delta E) + P_2^\alpha(\mu(\theta)) \cdot \varepsilon_2(\Delta E) + \dots \\ f_{\text{res}}^\beta(E, qU) - P_0^\beta(\mu(\theta)) \cdot \varepsilon_0(\Delta E) &= P_1^\beta(\mu(\theta)) \cdot \varepsilon_1(\Delta E) + P_2^\beta(\mu(\theta)) \cdot \varepsilon_2(\Delta E) + \dots \\ f_{\text{res}}^\gamma(E, qU) - P_0^\gamma(\mu(\theta)) \cdot \varepsilon_0(\Delta E) &= P_1^\gamma(\mu(\theta)) \cdot \varepsilon_1(\Delta E) + P_2^\gamma(\mu(\theta)) \cdot \varepsilon_2(\Delta E) + \dots \\ &\dots\end{aligned}\tag{5.10}$$

Neben den Antwortfunktionen kann auch die Funktion  $\varepsilon_0(\Delta E) = T_{\text{egun}}(E, qU)$  (s. Gleichung (5.8)) auf der linken Seite des Gleichungssystems gemessen werden. Mit den berechneten Streuwahrscheinlichkeiten  $P_i(\mu(\theta))$  können die Funktionen

### 5.3 Vorgehensweise zur Bestimmung der Energieverlustfunktion

$\varepsilon_i(\Delta E)$  dann durch Lösung des Gleichungssystems bestimmt werden.

#### 5.3.4 Lösung des linearen Gleichungssystems

Bevor das Gleichungssystem (5.10) aufgestellt und gelöst wird, muss festgelegt werden, wie viele Messreihen und für welche Säulendichten die Messreihen simuliert werden. Aus diesem Grund gibt es folgende Vorüberlegungen:

Die Säulendichten der einzelnen Simulationen sollten so klein gewählt werden, dass Vierfachstreuung innerhalb der Antwortfunktionen  $f_{\text{res}}(E, qU)$  jeweils vernachlässigt werden kann. Gleichzeitig müssen sie aber ausreichend hoch sein, damit die dreifache Streuung einen messbaren Beitrag liefert.

Nach diesen vorausgehenden Betrachtungen werden fünf verschiedene Messreihen mit den Säulendichten  $\rho d = j \cdot 10^{-17} \text{ cm}^{-2}$  ( $j = 1, 2, 3, 4, 5$ ) simuliert, um daraus dreidimensionale Matrizen  $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{3 \times 3}$  aufzustellen.

Über die Berechnung der Determinanten einer Matrix kann geprüft werden, ob ein lineares Gleichungssystem eindeutig lösbar ist und entsprechend für eine quadratische Matrix die inverse Matrix  $\mathbf{A}^{-1}$  berechnet werden kann. Dies ist nur dann der Fall, wenn die Determinante ungleich Null ist<sup>4</sup>.

Aus diesem Grund erfolgt eine Berechnung der Determinanten für alle möglichen Kombinationen der simulierten Daten und damit der Streuwahrscheinlichkeiten, aus denen sich die Matrix zusammensetzt. Diejenigen Parameter, die den Wert der Determinante maximieren, bestimmen dann die Referenzsäulendichten, für welche die tatsächlichen Messungen später durchgeführt werden sollten.

Das beste Ergebnis erhält man für die Matrix, bestehend aus den Streuwahrscheinlichkeiten für die Säulendichten  $\rho d = j \cdot 10^{-17} \text{ cm}^{-2}$  ( $j = 1, 3, 5$ ), während die Matrix mit den Streuwahrscheinlichkeiten der Säulendichten  $\rho d = j \cdot 10^{-17} \text{ cm}^{-2}$  ( $j = 1, 2, 3$ ) das schlechteste Ergebnis, d.h. die kleinste Determinante, liefert. Dies entspricht der Erwartung, da die letztgenannten Säulendichten zu gering sind, um ausreichend große Werte für die Wahrscheinlichkeit dreifacher Streuung zu erhalten.

#### Die Simulation

Die simulierten Messdaten werden nun folgendermaßen erzeugt:

Zunächst werden drei Messreihen bei Einstellung der Referenzsäulendichten  $\rho d = j \cdot 10^{-17} \text{ cm}^{-2}$  ( $j = 1, 3, 5$ ) sowie eine Leermessung mit  $\rho d = 0 \text{ cm}^{-2}$  durchgeführt. Während einer Messreihe werden Retardierungsenergien zwischen  $qU = 18605 \text{ eV}$  und  $qU = 17550 \text{ eV}$  in Abständen von  $0.1 \text{ eV}$  eingestellt und für jeden Schritt die transmittierten Elektronen gezählt. Die Anzahl der Elektronen, die mit der mittleren Energie  $\overline{E} = 18600 \text{ eV}$  starten, beträgt  $12 \cdot 10^6$  für jeden eingestellten Spannungsschritt. Von diesen Elektronen erreichen  $\approx 10^7$  Elektronen das Hauptspektrometer und werden transmittiert, wenn die einge-

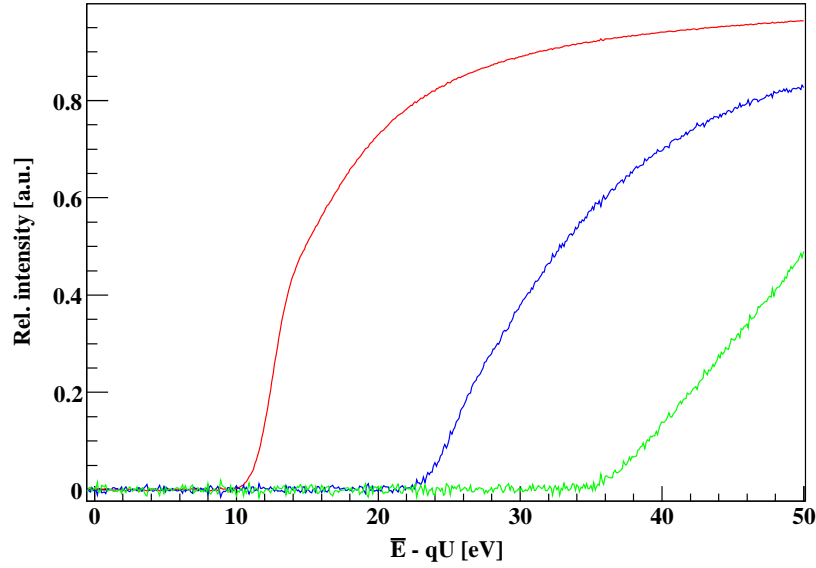
---

<sup>4</sup>Es können numerische Probleme auftreten, wenn die Determinante sehr klein ist, weil die Matrix sehr kleine Eigenwerte hat. Derartige Probleme bei der Berechnung der Inversen werden in Abschnitt 6.3.3 noch ausführlich behandelt.

## 5 Experimentelle Bestimmung der Energieverlustfunktion

stellte Retardierungsenergie klein genug ist<sup>5</sup>.

Das lineare Gleichungssystem (5.10) kann nun, wie in Abschnitt 5.3.3 beschrieben, aufgestellt und durch Multiplikation mit der inversen Matrix gelöst werden. Das Ergebnis ist in Abb. 5.7 dargestellt sind.



**Abbildung 5.7: Lösung des linearen Gleichungssystems.** Dargestellt sind die Funktionen  $\varepsilon_1(\Delta E)$  (rot),  $\varepsilon_2(\Delta E)$  (blau) und  $\varepsilon_3(\Delta E)$  (grün) als Funktion der mittleren Überschussenergie  $\bar{E} - qU$ . Das Gleichungssystem ist für Messreihen mit den Säulendichten  $\rho d = j \cdot 10^{-17} \text{ cm}^{-2}$  ( $j = 1, 3, 5$ ) aufgestellt worden.

In dem Diagramm erkennt man die Funktion  $\varepsilon_1(\Delta E)$  (rot) mit einem Anstieg ab  $\approx 12 \text{ eV}$ , die Funktion  $\varepsilon_2(\Delta E)$  (blau) mit einem Anstieg ab  $\approx 24 \text{ eV}$  und die Funktion  $\varepsilon_3(\Delta E)$  (grün) mit einem Anstieg ab  $\approx 36 \text{ eV}$ .

Während die Einfachstreuungsfunktion  $\varepsilon_1(\Delta E)$  noch experimentell bestimmt werden könnte, z.B. durch Verwendung eines Tritiumgases mit sehr geringer Säulendichte  $\rho d \ll (\rho d)_{\text{frei}}$ , in dem die Elektronen nur einfach streuen, sind experimentelle Messungen der Zweifachstreuungsfunktion  $\varepsilon_2(\Delta E)$  und Dreifachstreuungsfunktion  $\varepsilon_3(\Delta E)$  nicht zu realisieren. Diese Funktionen erhält man lediglich durch die beschriebene Entfaltung.

<sup>5</sup>Bei einer Leermessung werden für  $\bar{E} - qU > 0$  somit  $\approx 10^7$  Elektronen pro Spannungsschritt gezählt, bei den anderen Messreihen ist die Zahl der detektierten Elektronen neben der Retardierungsenergie zusätzlich abhängig vom Energieverlust und dementsprechend geringer.

### 5.3 Vorgehensweise zur Bestimmung der Energieverlustfunktion

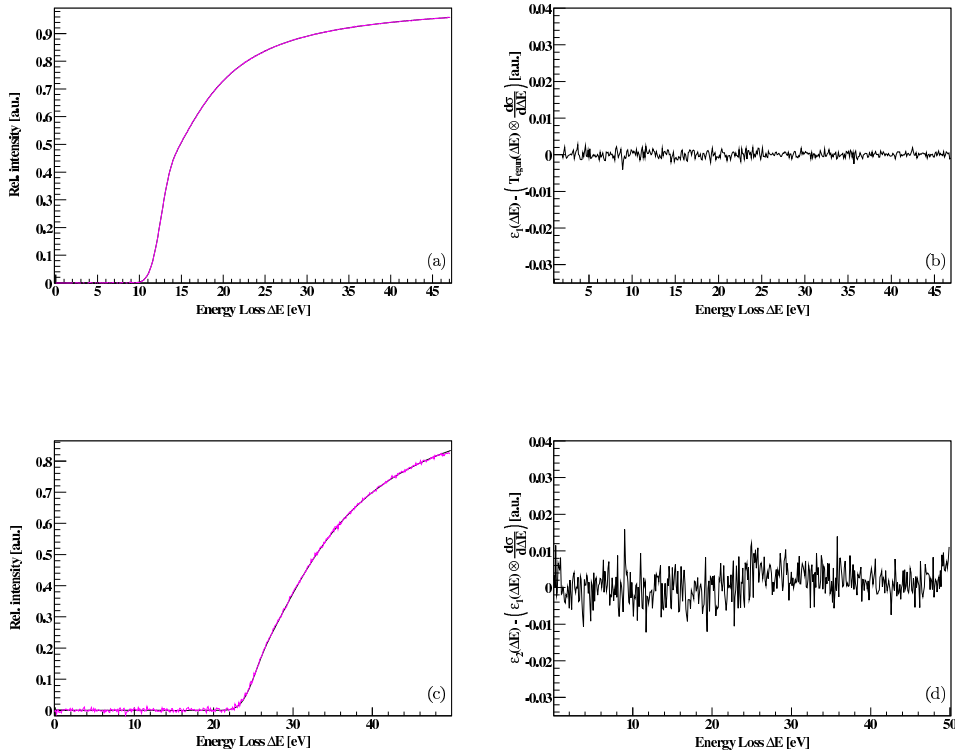
Gemäß Gleichung (5.8) gilt:

$$\varepsilon_1(\Delta E) - T_{\text{egun}}(E, qU) \otimes \frac{d\sigma}{d\Delta E} = 0 \quad (5.11)$$

$$\varepsilon_2(\Delta E) - \varepsilon_1(\Delta E) \otimes \frac{d\sigma}{d\Delta E} = 0. \quad (5.12)$$

Zur Überprüfung des Entfaltungsergebnisses sind daher in Abb. 5.8 (a) die Einfachstreuungsfunktion  $\varepsilon_1(\Delta E)$  und in Abb. 5.8 (c) die Zweifachstreuungsfunktion  $\varepsilon_2(\Delta E)$  (beide violett) dargestellt. Ebenfalls in diesen Digrammen sind entsprechend die Faltungen der zugehörigen Funktionen  $T_{\text{egun}}(\Delta E) \otimes d\sigma/d\Delta E$  und  $\varepsilon_1(\Delta E) \otimes d\sigma/d\Delta E$  (beide schwarz) gezeigt. Die Differenz der Funktionen (5.11) ist in Abb. 5.8 (b), die Differenz der Kurven (5.12) in Abb. 5.8 (d) zu sehen.

Es ist erkennbar, dass die jeweiligen Funktionen sehr gut übereinstimmen und Abweichungen nur auf die höheren Rauschanteile der entfalteten Funktionen zurückzuführen sind, die durch numerische Probleme bei der Lösung des Gleichungssystems mittels Matrixinversion zustande kommen (s.o.).



**Abbildung 5.8: Überprüfung des Entfaltungsergebnisses.** Dargestellt sind in Abb. (a) die Funktionen  $\varepsilon_1(\Delta E)$  (violett) und  $T_{\text{egun}}(E, qU) \otimes d\sigma/d\Delta E$  (schwarz), die nahezu identisch sind. Durch Differenzbildung der beiden Funktionen in Abb. (b) wird gezeigt, dass der Unterschied bedingt durch numerische Probleme auf den höheren Rauschanteil der entfalteten Funktion zurückzuführen ist. Analog sind die Funktionen  $\varepsilon_2(\Delta E)$  (violett) und  $\varepsilon_1(\Delta E) \otimes \frac{d\sigma}{d\Delta E}$  (schwarz) in Abb. (c) dargestellt. Auch in diesem Fall zeigt die Differenzbildung in Abb. (d), dass der Unterschied nur auf numerische Fluktuationen bei der Entfaltung zurückzuführen ist.

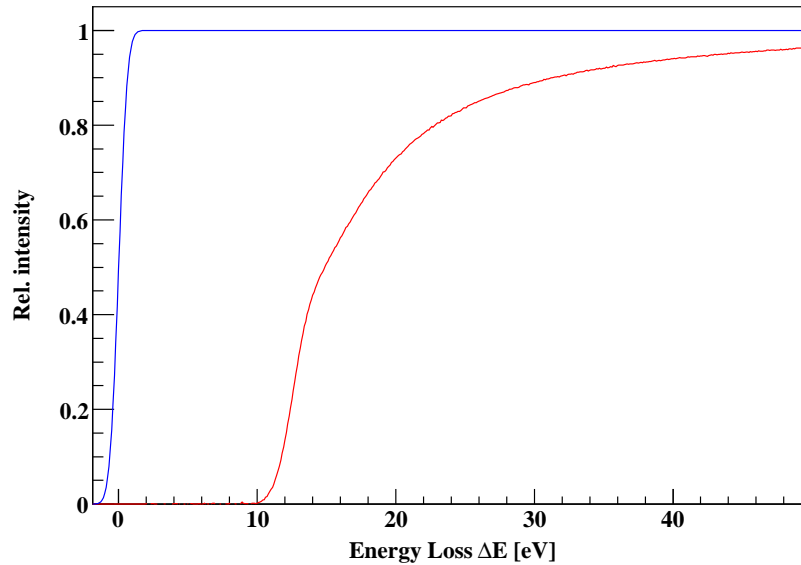
## 5 Experimentelle Bestimmung der Energieverlustfunktion

Wie bereits in Abb. 5.7 erkennbar, ist das Entfaltungsergebnis der Einfachstreu-  
funktion  $\varepsilon_1(\Delta E)$  genauer, da für alle eingestellten Säulendichten die Einfach-  
streuprozesse den größten Beitrag zum Gleichungssystem liefern.

Für das weitere Vorgehen werden nur die Einfachstreu-  
funktion  $\varepsilon_1(\Delta E)$  zusammen mit der experimentellen Transmissionsfunktion  $T_{\text{egun}}(E, qU)$  benötigt, um  
die Gleichung <sup>6</sup>

$$T_{\text{egun}}(E, qU) \otimes \frac{d\sigma}{d\Delta E} = \varepsilon_1(\Delta E) \quad (5.13)$$

zu lösen bzw. die Energieverlustfunktion  $d\sigma/d\Delta E$  zu entfalten. Die beiden Funk-  
tionen können wie beschrieben bestimmt werden und sind in Abb. 5.9 zu sehen.  
Im folgenden Kapitel werden drei verschiedene Methoden vorgestellt, mit denen  
die Energieverlustfunktion entfaltet werden kann. Aus diesem Grund werden  
Definition und Eigenschaften der Faltung noch einmal genauer erläutert.



**Abbildung 5.9: Funktion für Einfachstreuung und Transmissionsfunktion.** Dargestellt sind die Funktionen  $T_{\text{egun}}(E, qU) = \varepsilon_0(\Delta E)$  (blau) und  $\varepsilon_1(\Delta E)$  (rot) als Funktion des Energieverlustes  $\Delta E$ . Durch eine Faltung der Transmissionsfunktion  $T_{\text{egun}}(E, qU)$  mit der zu bestimmenden Energieverlustfunktion  $d\sigma/d\Delta E$  erhält man die Funktion  $\varepsilon_1(\Delta E)$ .

<sup>6</sup>Diese Gleichung folgt direkt aus Gleichung (5.9).

## Die Faltung

**Definition der Faltung** Die Faltung zweier reeller Funktionen  $f(t)$  und  $g(t)$  ( $f, g : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ ) ist folgendermaßen definiert:

$$f(t) \otimes g(t) = \int_{-\infty}^{\infty} f(t - \zeta) g(\zeta) d\zeta \quad (5.14)$$

Es wird über das Produkt von  $g(t)$  mit einer verschobenen und gespiegelten Funktion  $f(t)$  integriert. Anschaulich versteht man unter einer Faltung die Gewichtung einer Funktion mit einer anderen. In Gleichung (5.14) gibt der Funktionswert von  $g(\zeta)$  an, wie stark der um  $\zeta$  zurückliegende Wert von  $f(t - \zeta)$  in den Wert der Ergebnisfunktion  $f(t) \otimes g(t)$  eingeht. Die Faltung ist kommutativ, distributiv und assoziativ. Des Weiteren gilt der Faltungssatz, welcher besagt, dass die Faltung zweier Funktionen im Zeitraum eine Multiplikation der zugehörigen Fouriertransformierten im Frequenzraum ist und umgekehrt:

$$f(t) \otimes g(t) \iff F(f) \cdot G(f) \quad (5.15)$$

Hierbei sind  $F(f)$  und  $G(f)$  die Fouriertransformierten von  $f(t)$  und  $g(t)$ .

Gleichung (5.14) definiert die Faltung zweier kontinuierlicher Funktionen. Oftmals sind Funktionen jedoch nur zu  $N$  diskreten Zeiten  $t_k$  ( $k = 0, 1, \dots, N-1$ ) bekannt, d.h. man hat Werte  $f(t_k)$  zu den Zeiten  $t_k$  genommen. Auf diese Weise erhält man einen Datensatz, der aus einer Zahlenfolge  $f_k = f(t_k)$  besteht. Die Fouriertransformierte  $F_j$  der Zahlenfolge  $f_k$  erhält man über die Diskrete Fouriertransformation:

$$F_j = \frac{1}{N} \sum_{k=0}^{N-1} f_k e^{-2\pi i \cdot \frac{jk}{N}}$$

Die diskrete Faltung zweier Zahlenreihen ist wie folgt definiert:

$$h_k \equiv (f \otimes g)_k = \sum_{l=0}^{N-1} f_{k-l} \cdot g_l \quad (5.16)$$

Für beide Funktionen  $f_k$  und  $g_k$  muss die Anzahl  $N$  der Datenpunkte gleich sein<sup>7</sup>. Ist die Anzahl der Werte bei einer der beiden Funktionen kleiner, so wird die Funktion mit Nullen aufgefüllt.

Die Fouriertransformierte  $H_j$  der Datenreihe  $h_k$  ist das Produkt der Fouriertransformierten von  $F_j$  und  $G_j$ , daher lautet der diskrete Faltungssatz:

$$h_k = (f \otimes g)_k \iff H_j = F_j \cdot G_j$$

Somit ist die Faltung der Folgen  $f_k$  und  $g_k$  im Zeitraum ein Produkt der

---

<sup>7</sup>Gleichung (5.16) wird häufig auch mit dem Vorfaktor  $1/N$  definiert.

## 5 Experimentelle Bestimmung der Energieverlustfunktion

Fouriertransformierten  $F_j$  und  $G_j$  im Frequenzraum.

Im Rahmen dieser Arbeit werden Messungen simuliert, in denen die transmittierten Elektronen bei diskret angelegten Retardierungsspannungen gezählt werden. Aus diesem Grund erhält man ausschließlich diskrete Spektren bzw. Funktionen, so dass im Folgenden nur diskrete Faltungssummen betrachtet werden.

**Entfaltung** Entfaltung ist die Umkehrung der Faltung von zwei Funktionen und wird ebenso wie die Faltung durch Gleichung (5.16) beschrieben. Der Unterschied zur Faltung besteht darin, dass die Funktion  $g_l$  auf der rechten Seite unbekannt ist. Gleichung (5.16) kann auch als lineares Gleichungssystem in allgemeiner Form geschrieben werden:

$$\mathbf{A}\mathbf{x} = \mathbf{b} \quad (\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{n \times n} \wedge \mathbf{x}, \mathbf{b} \in \mathbb{R}^n) \quad (5.17)$$

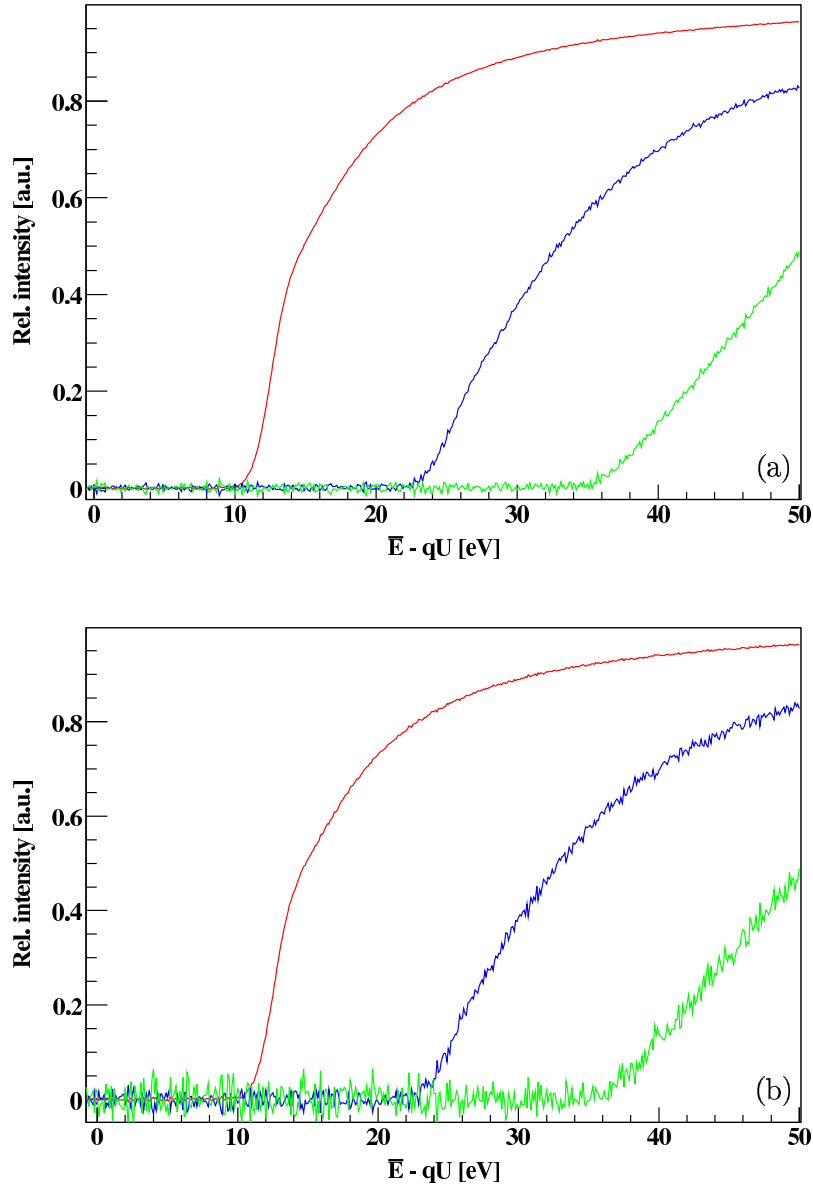
Hierbei sind  $\mathbf{A} = f_{k-l}$  eine bekannte Matrix,  $\mathbf{b} = (f \otimes g)_k$  ein bekannter Spaltenvektor und  $\mathbf{x} = g_l$  der gesuchte Lösungsvektor. Gleichung (5.17) bzw. (5.16) kann auf verschiedene Arten gelöst werden, die im weiteren Verlauf dieser Arbeit aufgezeigt werden.

### 5.4 Ergebnis

Zum Abschluss dieses Kapitels wird noch einmal das bereits bestimmte Ergebnis (s. Abb. 5.7 bzw. 5.10 (a)) mit dem Ergebnis des Gleichungssystems verglichen, das für Messreihen mit den Säulendichten  $\rho d = j \cdot 10^{-17} \text{ cm}^{-2}$  ( $j = 1, 2, 3$ ) aufgestellt worden ist (s. Abb. 5.10 (b)). In Abb. (a) überwiegt das intrinsische Rauschen, verursacht durch die Statistik der Simulation, das auch bei der tatsächlichen Messung auftreten wird. Demgegenüber herrscht in Abb. (b) das numerische Rauschen vor, welches seine Ursache in der schlecht bestimmten Matrix hat. Das schlechtere Signal- zu Rauschverhältnis der ( $j = 1, 2, 3$ ) - Messung entspricht der Erwartung aufgrund der bestimmten Matrixdeterminanten.

Somit können über die Berechnung der Determinanten optimale Werte für die Säulendichten festgelegt werden, welche Referenzwerte für die späteren tatsächlichen Messungen darstellen. Mit der beschriebenen Computersimulation kann außerdem gezeigt werden, dass die Bestimmung der Einfachstreuungsfunktion  $\varepsilon_1(\Delta E)$ , welche die Grundlage zur Entfaltung der Energieverlustfunktion liefert, über experimentelle Messungen möglich ist.





**Abbildung 5.10: Ergebnis der Entfaltung für Gleichungssysteme, aufgestellt für verschiedene Säulendichten.** Abb. (a) zeigt die Lösung des linearen Gleichungssystems, bei der die Matrix für die Referenzsäulendichten  $\rho d = j \cdot 10^{-17} \text{ cm}^{-2}$  ( $j = 1, 3, 5$ ) aufgestellt worden ist. In Abb. (b) setzt sich die Matrix aus den Streuwahrscheinlichkeiten für die Säulendichten  $\rho d = j \cdot 10^{-17} \text{ cm}^{-2}$  ( $j = 1, 2, 3$ ) zusammen. Deutlich erkennbar ist das unterschiedliche Signal- zu Rauschverhältnis der einzelnen Funktionen in den beiden Diagrammen.

## 6 Entfaltung der Energieverlustfunktion

Wie in Abschnitt 5.3 erläutert, kann eine diskrete Faltung gemäß Gleichung (5.16) als lineares Gleichungssystem  $\mathbf{A}\mathbf{x} = \mathbf{b}$  ( $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{n \times n} \wedge \mathbf{x}, \mathbf{b} \in \mathbb{R}^n$ ) dargestellt werden:

$$\sum_{j=0}^{N-1} \underbrace{f_{i-j}}_{=\mathbf{A}} \cdot \underbrace{g_j}_{=\mathbf{x}} = \underbrace{(f \otimes g)_i}_{=\mathbf{b}} \quad (6.1)$$

Für Gleichung (5.13), die durch Entfaltung der Energieverlustfunktion gelöst werden soll, gilt daher:

$$\mathbf{A} \triangleq T_{\text{egun}}(E, qU), \quad \mathbf{b} \triangleq \varepsilon_1(\Delta E), \quad \mathbf{x} \triangleq \frac{d\sigma}{d\Delta E}$$

Dies bedeutet, dass die Funktion  $T_{\text{egun}}(E, qU)$  als Matrix und die Funktionen  $\varepsilon_1(\Delta E)$  und  $d\sigma/d\Delta E$  als Vektoren geschrieben werden, deren Elemente durch die individuellen Messwerte bei verschiedenen Retardierungsspannungen gegeben sind.

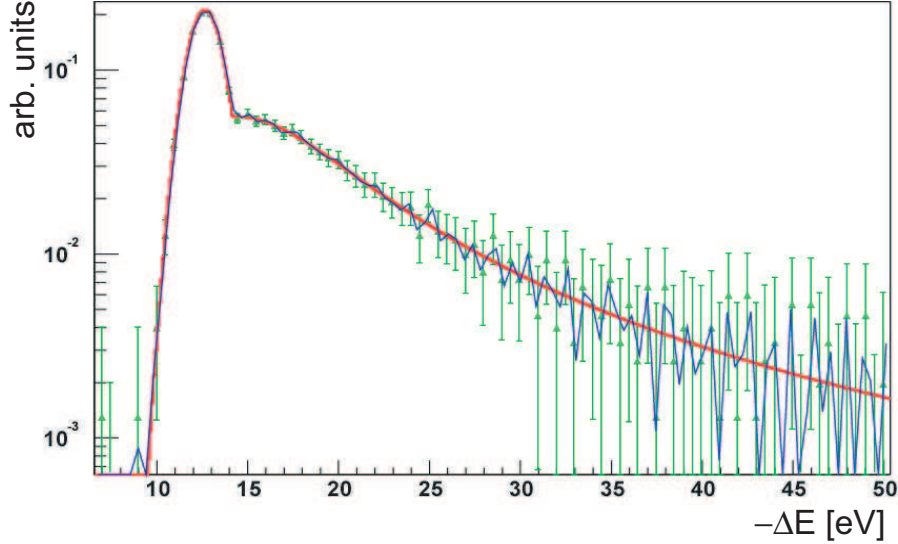
Das lineare Gleichungssystem gemäß Gleichung (6.1) kann im einfachsten Fall durch Multiplikation mit der inversen Matrix  $\mathbf{A}^{-1}$  gelöst werden. Diese Methode wurde bereits getestet [Ste03], führt aber im Allgemeinen zu Problemen mit numerischen Fluktuationen. Diese können unterdrückt werden, wenn man die Messung so durchführt, dass die Breite der Transmissionsfunktion kleiner ist als die Schrittweite der Retardierungsspannung beim Messprozess.

Das Resultat der Entfaltung mittels Matrixinversion ist in Abb. 6.1 zu sehen. In die Simulation gingen ein gaußförmiges Energiespektrum der Elektronenkanone mit  $\sigma = 0.5$  eV, eine Binbreite von 0.5 eV sowie eine Breite der Transmissionsfunktion, die kleiner als 0.5 eV ist, ein.

Dargestellt ist das Ergebnis der Entfaltung (grün) als Funktion des Energieverlustes  $-\Delta E$ . Die rote Kurve ist das Eingangsmodell und die blaue Kurve ein Splinefit an die Daten. Das Ergebnis stimmt bis  $\approx 30$  eV recht gut mit dem Eingangsmodell überein, aber es muss berücksichtigt werden, dass eine Entfaltung mit dieser Methode nur dann möglich ist, wenn die Binbreite, mit der die Transmissionsfunktion abgetastet wird, größer ist als die Breite der Funktion.

Im weiteren Verlauf dieses Kapitels werden drei Verfahren vorgestellt, mit denen die Energieverlustfunktion auch dann entfaltet werden kann, wenn der Abstand der Bins 0.1 eV und die Breite der Transmissionsfunktion größer als 0.1 eV ist. Zunächst wird die stufenweise Entfaltung und in diesem Zusammenhang die

Anwendung digitaler Filter erläutert. Danach wird das iterative BiCG-Verfahren erklärt, bevor zuletzt die Singulärwertzerlegung beschrieben wird.



**Abbildung 6.1: Ergebnis der Entfaltung mittels Matrixinversion.** Dargestellt sind das Eingangsmodell (rot), das Ergebnis der Entfaltung mit Fehlerbalken (grün) und eine Splinekurve an das Ergebnis der Entfaltung (blau) als Funktion des Energieverlustes  $-\Delta E$ . Grundlage für die Entfaltung ist eine Schrittweite der Messungen von 0.5 eV und eine Breite der Transmissionsfunktion von weniger als 0.5 eV. Quelle: [Kat04]

## 6.1 Die stufenweise Entfaltung

Das lineare Gleichungssystem gemäß (6.1) kann gelöst werden, indem für jedes  $i = 1, 2, \dots, N-1$  stufenweise die Werte für  $g_j$  bzw.  $d\sigma/d\Delta E$  berechnet werden:

$$\begin{aligned} i = 1 & \Rightarrow g_0 = \frac{(f \otimes g)_1}{f_1} \\ i = 2 & \Rightarrow g_1 = \frac{(f \otimes g)_2 - f_2 g_0}{f_1} \\ i = 3 & \Rightarrow \dots \end{aligned} \quad (6.2)$$

### 6.1.1 Test mit analytischen Funktionen

Zunächst wird das Verfahren der stufenweisen Entfaltung gemäß Gleichung (6.2) mit der analytischen Transmissionsfunktion  $T(E, qU)$  und der analytischen Funktion für einfache Streuung  $\varepsilon_1^{an}(\Delta E)$  durchgeführt, um die Methode an unverrauschten Daten zu testen.

Die Funktion  $\varepsilon_1^{an}(\Delta E)$  erhält man durch eine diskrete Faltung von  $T(E, qU)$  mit der Funktion  $f(\Delta E)$  des Troitsker Experimentes. Die Faltung erfolgt durch

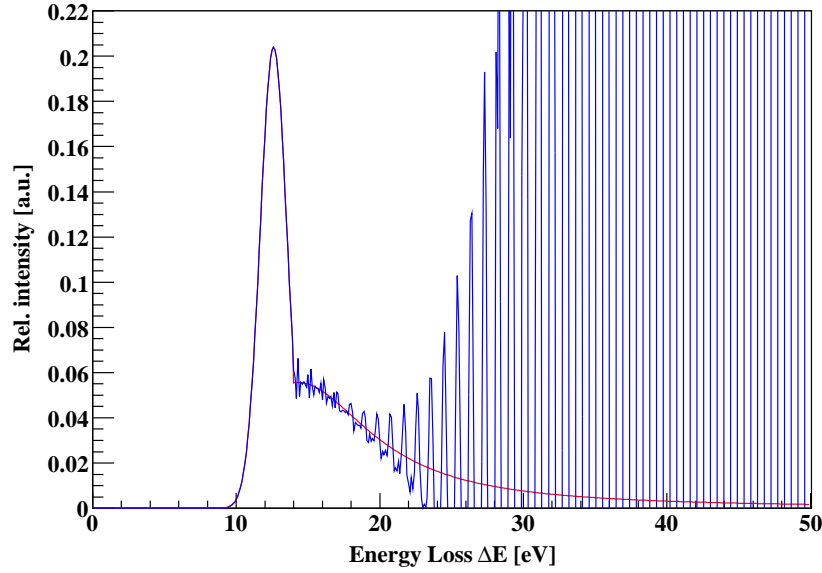
## 6 Entfaltung der Energieverlustfunktion

numerische Integration nach der Simpsonregel, bei der man das Integral einer beliebigen Funktion  $f(x)$  in einem bestimmten Intervall  $[a, b]$  näherungsweise löst, indem die Funktion  $f(x)$  abschnittsweise durch eine Parabel angenähert wird.

Folgende Funktionen werden nun zum Test der stufenweisen Entfaltung verwendet:

$$f = T(E, qU), \quad g = \frac{d\sigma}{d\Delta E}, \quad (f \otimes g) = \varepsilon_1^{an}(\Delta E)$$

Das Ergebnis  $d\sigma/d\Delta E$  der Entfaltung (blau) ist in Abb. 6.2 dargestellt. Es ist zu



**Abbildung 6.2: Stufenweise Entfaltung mit analytischen Funktionen.**

Dargestellt ist das Ergebnis der Entfaltung (blau) und das Eingangsmodell (rot) als Funktion des Energieverlustes  $\Delta E$ . Bis  $\approx 14$  eV ist die blaue Kurve identisch mit der roten, ab  $\approx 14$  eV beginnen Fluktuationen, die sehr schnell anwachsen.

erkennen, dass die Funktion bis  $\approx 14$  eV deckungsgleich mit der Energieverlustfunktion des Troitsker Experimentes (rot) ist, welche durch die Faltung mit der Transmissionsfunktion in das Ergebnis des Faltungsintegrals  $\varepsilon_1^{an}(\Delta E)$  eingeht. Ab  $\approx 14$  eV beginnen Fluktuationen, die mit größeren  $\Delta E$ -Werten immer weiter anwachsen. Da die Fluktuationen in Abb. 6.2 nur auf numerische Probleme zurückzuführen sind, wird im Folgenden geprüft, ob diese durch Anwendung eines digitalen Filters gedämpft werden können.

### 6.1.2 Digitale Filter

Filter werden verwendet, um störendes Rauschen in einem bestimmten Frequenzbereich zu unterdrücken. Auf diese Weise werden nur diejenigen Frequenzen durchgelassen, die relevant sind für das zu untersuchende Signal.

## 6.1 Die stufenweise Enfaltung

Ein allgemeiner Filter nimmt eine Eingangsfolge  $x_k$  auf und erzeugt eine Ausgangsfolge  $y_n$  gemäß der Gleichung:

$$y_n = \sum_{k=0}^M c_k x_{n-k} + \sum_{j=0}^{N-1} d_j y_{n-j-1} \quad (6.3)$$

Jeder Ergebniswert  $y_n$  setzt sich zusammen aus dem aktuellen und  $M$  vorherigen Eingangswerten sowie aus den  $N$  vorhergehenden Ergebniswerten. Die Koeffizienten  $c_k$  und  $d_j$ , welche die Filterantwort definieren, sind Konstanten, die für die jeweilige Anwendung berechnet werden müssen. Bei den digitalen Filtern gibt es zwei Gruppen:

### 1) Nichtrekursive Filter ( $N = 0$ )

Bei diesen Filtern, die auch FIR-Filter (vom Englischen: finite impulse response) genannt werden, entfällt die zweite Summe in Gleichung (6.3). Jeder Ergebniswert hängt nur von den  $M+1$  Eingangswerten ab. Aufgrund der fehlenden Rückkopplung können Fluktuationen nicht anwachsen, und FIR-Filter sind daher immer stabil.

### 2) Rekursive Filter ( $N \neq 0$ )

Diese Filter, bei denen die zweite Summe in Gleichung (6.3) berechnet wird, heißen auch IIR-Filter (vom Englischen: infinite impulse response). Mit ihrer Hilfe lassen sich gewünschte Filterfunktionen mit weniger Koeffizienten realisieren.

Zur Dämpfung der in Abschnitt 6.1.1 beschriebenen Fluktuationen wird ein rekursiver Filter entworfen.

Zwischen den Koeffizienten  $c_k$ ,  $d_j$  und der Filterfunktion (auch Übertragungsfunktion)  $\mathcal{H}(z)$  gilt folgender Zusammenhang (vgl. z.B. [Tie02]):

$$\mathcal{H}(z) = \frac{\sum_{k=0}^M c_k z^{-k}}{1 + \sum_{j=0}^{N-1} d_j z^{-j+1}} \quad (6.4)$$

Die Variable  $z$  ist definiert als  $z = e^{2\pi i f / f_a}$  und wird weiter unten noch genauer erläutert.

Gleichung (6.4) zeigt, wie die Filterfunktion  $\mathcal{H}(z)$  über die Koeffizienten  $c_k$  und  $d_j$  berechnet werden kann. Um einen bestimmten Filter zu entwerfen, muss man jedoch das Umgekehrte machen: die Filterkoeffizienten mit einer gewünschten Übertragungsfunktion berechnen. Es liegt also ein inverses Problem vor, für welches es keine Universallösung gibt.

Das gebräuchlichste Verfahren zur Berechnung der Filterkoeffizienten ist die bilineare Transformation ( $\mathbb{C} \rightarrow \mathbb{C}$ ), bei der die Übertragungsfunktion eines kontinuierlichen (analogen) Filters  $\mathcal{H}(s)$  in der  $s$ -Ebene auf die Übertragungsfunktion

## 6 Entfaltung der Energieverlustfunktion

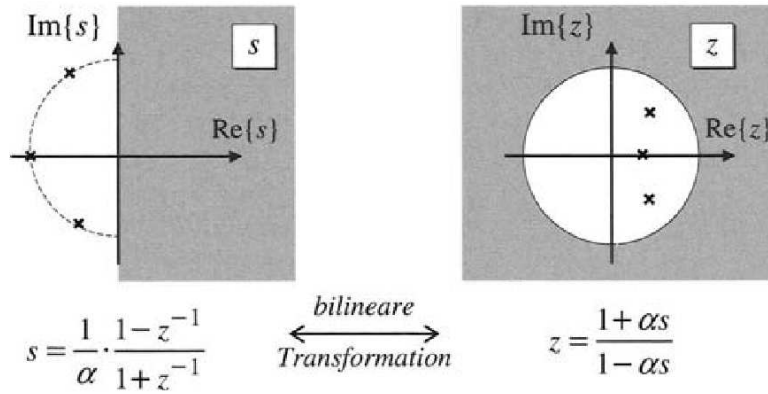
$\mathcal{H}(z)$  eines diskreten (digitalen) Filters in der  $z$ -Ebene abgebildet wird. Durch die Transformation wird die linke Halbebene in  $s$  ( $\text{Re}(s) < 0$ ) auf das Innere des Einheitskreises in  $z$  abgebildet, während die imaginäre Achse ( $\text{Im}(s)$ ) auf den Einheitskreis selbst ( $|z| = 1$ ) transformiert wird.

Analoge Filter sind stabil, wenn ihre Polstellen in der linken Hälfte der  $s$ -Ebene liegen, daher sind digitale Filter dann stabil, wenn ihre Pole im Inneren des Einheitskreises der  $z$ -Ebene liegen [Wer06].

Zwischen den Variablen  $s$  und  $z$  besteht folgender Zusammenhang:

$$\begin{aligned} s &= \frac{1}{\alpha} \cdot \frac{1 - z^{-1}}{1 + z^{-1}} = \frac{1}{\alpha} \cdot \frac{z - 1}{z + 1} \\ z &= \frac{1 + \alpha s}{1 - \alpha s} \end{aligned} \quad \text{mit } \alpha \in \mathbb{R} > 0 \quad (6.5)$$

Die Variable  $\alpha$  ist z.B. die Abtastrate, mit der ein Signal pro Zeitintervall abgetastet wird. In Abb. 6.3 wird die bilineare Transformation noch einmal verdeutlicht. Der Frequenzgang analoger Filter ist auf der imaginären Achse der  $s$ -Ebene



**Abbildung 6.3: Die bilineare Transformation.** In dem Diagramm ist die Transformation der  $s$ -Ebene in die  $z$ -Ebene und umgekehrt veranschaulicht. Quelle: [Wer06]

definiert, daher befindet er sich bei digitalen Filtern auf dem Einheitskreis der  $z$ -Ebene. Der Zusammenhang mit der Frequenz ergibt sich durch Einsetzen von  $z = e^{2\pi i f / f_a}$  ( $f$  ist der Frequenzgang des Analogfilters, der auf die Abtastfrequenz  $f_a$  normiert ist.) bzw.  $s = i\omega$ :

$$\omega = \frac{1}{\alpha} \cdot \tan \left( \pi \cdot \frac{f}{f_a} \right)$$

Bei der Transformation von der  $s$ -Ebene in die  $z$ -Ebene gibt es eine Arcustangens-Verzerrung, da der Übergang von der imaginären Achse ( $-\infty$  bis  $+\infty$ ) der  $s$ -Ebene auf den Einheitskreis in der  $z$ -Ebene nicht linear erfolgen kann [Wer06]. Diese Verzerrung muss beim Filterentwurf berücksichtigt werden.

Der Entwurf des digitalen Filters geschieht nun wie folgt:

Zunächst wird eine Übertragungsfunktion  $|\mathcal{H}(i\omega)|^2 = \mathcal{H}(s)\mathcal{H}(-s)$  bestimmt,

bevor die Polstellen der Funktion berechnet werden. Aus den Polstellen der linken  $s$ -Halbebene wird dann eine stabile Filterfunktion  $\mathcal{H}(s)$  gebildet, bevor die bilineare Transformation gemäß Gleichung (6.5) durchgeführt wird. Durch Koeffizientenvergleich mit Gleichung (6.4) können dann die Filterkoeffizienten  $c_k$  und  $d_j$  bestimmt werden.

### 6.1.2.1 Bestimmung der Rauschfrequenzen

Um die Fluktuationen bzw. das Rauschen zu filtern, müssen zunächst die Rauschfrequenzen bestimmt werden<sup>1</sup>. Aus diesem Grund werden Fouriertransformationen des Faltungsergebnisses (s. Abb. 6.2), der analytischen Energieverlustfunktion und der Differenz der beiden Funktionen durchgeführt.

Jede dieser drei Funktionen wird in Abschnitte der Größe  $\Delta E = 3.2$  eV unterteilt, bevor eine Fouriertransformation jedes einzelnen Abschnitts mit der Bibliothek *four1* [Num02] erfolgt<sup>2</sup>. Danach wird ein dreidimensionales Diagramm erzeugt mit den  $\Delta E$ -Werten auf der  $x$ -Achse, den Frequenzen auf der  $y$ -Achse und den Amplituden der jeweiligen Frequenzanteile auf der  $z$ -Achse. In diesen Diagrammen kann abgelesen werden, welche Frequenzanteile in den verschiedenen Energiebereichen dominieren.

Das Frequenzspektrum für die analytische Energieverlustfunktion ist in Abb. 6.4 dargestellt. Diese Funktion besteht aus einer Gauß- und einer Lorentzkurve. Die Fouriertransformierten  $\mathcal{FT}$  der beiden Funktionen sind im kontinuierlichen Fall entsprechend eine Gauß- und eine beidseitige Exponentialfunktion:

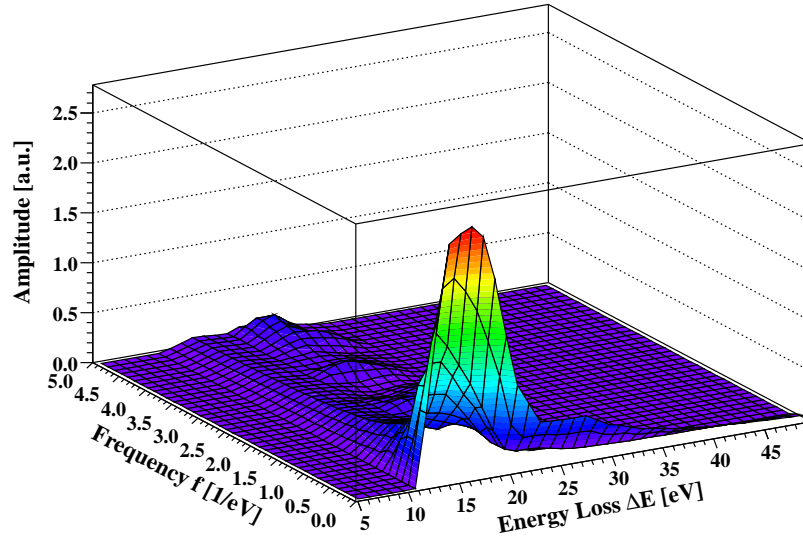
	Funktion $f(t)$	Fouriertransformierte $F(\omega)$
Gaußkurve	$e^{-\frac{1}{2}\frac{t^2}{\sigma^2}}$	$e^{-\frac{1}{2}\sigma^2\omega^2}$
Lorentzkurve	$\frac{a}{a^2+t^2}$	$e^{-a \omega }$

Bei der Gaußkurve  $f(t)$  erscheint die Breite  $\sigma$  der Funktion im Nenner, während sie bei  $F(\omega)$  im Zähler steht. Daher gilt: Je breiter  $f(t)$ , desto schmaler  $F(\omega)$  und umgekehrt. Das Gleiche ist gültig für die Lorentzfunktion: Je breiter die Lorentzkurve, desto steiler fällt die zugehörige Exponentialfunktion ab, umgekehrt gilt Entsprechendes.

Abschnittsweise definierte Funktionen haben abgewandelte Fouriertransformierte. Theoretisch wird die  $\mathcal{FT}$  einer beliebigen Funktion  $f(t)$  durch Integration von  $-\infty$  bis  $+\infty$  berechnet. Da im Allgemeinen bei der Durchführung von Experimenten nur ein Funktionsabschnitt der Länge  $T$  gemessen wird, erfolgt die Integration in diesem Fall von  $-T/2$  bis  $+T/2$ . Dies bedeutet, dass die Funktion

<sup>1</sup>Es handelt sich nicht um Frequenzen im eigentlichen Sinne, sondern um reziproke Werte des Energieverlustes. Der Einfachheit halber werden diese Werte jedoch im weiteren Verlauf als Frequenzen bezeichnet.

<sup>2</sup>Eine Fouriertransformation ist nur möglich, wenn die Anzahl der eingelesenen Werte eine Zweierpotenz ist. Bei einer Binbreite von 0.1 eV und 32 Werten erhält man gerade ein Intervall der Größe  $\Delta E = 3.2$  eV.



**Abbildung 6.4: Frequenzspektrum der analytischen Energieverlustfunktion.** In dem Diagramm ist die Frequenzamplitude als Funktion der jeweiligen Frequenz  $f$  und des Energieverlustes  $\Delta E$  aufgetragen.

$f(t)$  durch eine modifizierte Funktion  $f_m(t)$  ersetzt werden muss [Ohm02]:

$$f_m(t) = f(t) \cdot \text{rect}\left(\frac{t}{T}\right)$$

$\text{rect}(t/T)$  ist die Rechteckfunktion, mit der  $f(t)$  multipliziert wird, da nur ein Teil der Funktion betrachtet wird<sup>3</sup>. Durch Umkehrung des Faltungstheorems gemäß Gleichung (5.15) erhält man nun die  $\mathcal{FT}$  der modifizierten Funktion  $F_m(\omega)$  statt der gesuchten Funktion  $F(\omega)$ :

$$\begin{aligned} F_m(\omega) &= F(\omega) \otimes \mathcal{FT}\left[\text{rect}\left(\frac{t}{T}\right)\right] \\ &= F(\omega) \otimes T \cdot \text{si}(\pi \cdot \omega \cdot T) \end{aligned}$$

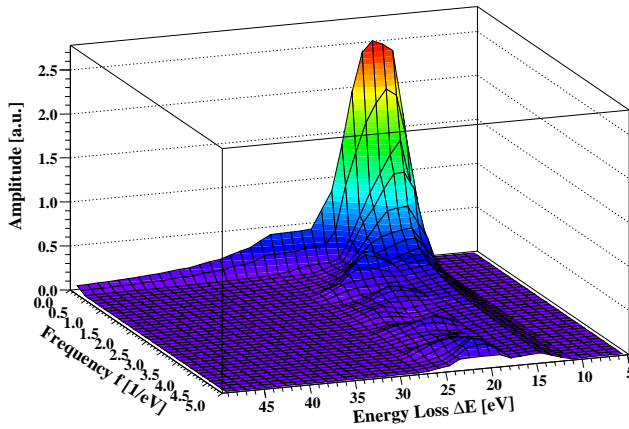
Die Funktion  $\text{si}(x) = \sin x/x$  wird auch Spaltfunktion genannt<sup>4</sup>. Wegen der oszillatorischen Ausläufer der  $\text{si}$ -Funktion treten ebenfalls oszillatorische Anteile in  $F_m(\omega)$  auf, die in  $F(\omega)$  keine Entsprechung haben.

In Abb. 6.5 ist das Frequenzspektrum der analytischen Energieverlustfunktion noch einmal aus einer anderen Perspektive zu sehen. Da lediglich positive Energie- und Frequenzwerte aufgetragen sind, besteht die  $\mathcal{FT}$  aus einseitigen Funktionen. In dem Diagramm sind die breite Gaußfunktion bis  $\approx 16$  eV und

<sup>3</sup>Statt einer Rechteckfunktion werden oft Fensterfunktionen verwendet (z.B. Hamming- oder Gaußfenster). Für die Bestimmung der Rauschfrequenzen reicht jedoch eine Rechteckfunktion aus und wird der Einfachheit halber verwendet.

<sup>4</sup>Sie tritt bei der Beugung am Spalt auf.





**Abbildung 6.5:**  
Frequenzspek-  
trum der analy-  
tischen Energie-  
verlustfunktion  
um  $180^\circ$  gedreht.

Aus dieser Per-  
spektive kann die  
Signalfrequenz für  
jeden  $x$ -Wert  $\Delta E$   
der Energieverlust-  
funktion abgelesen  
werden.

die steil abfallende Exponentialfunktion ab  $\approx 16$  eV zu erkennen, die im Bereich höherer Frequenzen wegen der Multiplikation mit dem Rechteckfenster oszilliert. Normalerweise müsste die Exponentialfunktion schon bei 14 eV beginnen, aber durch die Unterteilung der gesamten Funktion in kleine Abschnitte werden im 4. Abschnitt (12.8 eV - 16 eV) Teile der Gauß- und Lorentzkurve zusammen fouriertransformiert. Aus diesem Grund ist die  $\mathcal{FT}$  eine Mischung aus breiter Gauß- und steiler Exponentialfunktion.

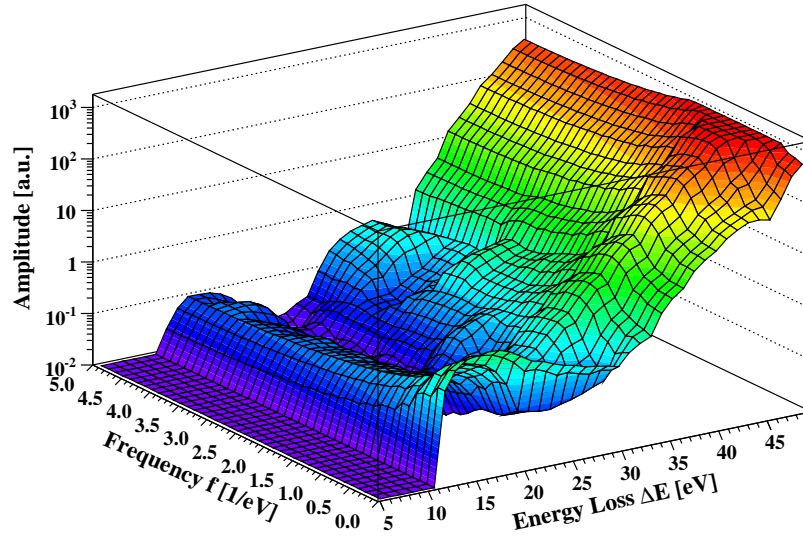
Trotz der beschriebenen Multiplikation mit der Rechteckfunktion treten in der  $\mathcal{FT}$  der Gaußfunktion keine Oszillationen auf. Dies liegt daran, dass die Gaußkurve so schmal ist. Sie kann in zwei Abschnitten transformiert werden, und die Rechteckfunktion beinhaltet daher mindestens die Hälfte der Kurve. Als Ergebnis der Fouriertransformation erhält man eine derart breite Gaußkurve, dass die Oszillationen in dem betrachteten Bereich des Frequenzspektrums nicht enthalten sind.

Nachdem die Signalfrequenzen der analytischen Energieverlustfunktion bestimmt worden sind, erfolgt eine Betrachtung des Frequenzspektrums der entfalteten Funktion (s. Abb. 6.6). Wie erwartet sind in dem Diagramm die numerischen Fluktuationen zu erkennen, die sehr schnell anwachsen und sich über das gesamte Frequenzspektrum verteilen. Wegen des schnellen Anwachsens der Amplituden ist die  $z$ -Achse logarithmisch aufgetragen.

Um die Rauschfrequenzen genau zu bestimmen, wird zuletzt die Differenz der analytischen und entfalteten Funktion gebildet und fouriertransformiert (s. Abb. 6.7). Auch in diesem Diagramm ist die  $z$ -Achse logarithmisch aufgetragen. Es kann abgelesen werden, dass das Rauschen bei höheren Frequenzen schon ab  $\approx 15$  eV beginnt und sich über das gesamte Spektrum verteilt.

Nach Bestimmung der Signal- und Rauschfrequenzen kann nun ein geeigneter Filter entworfen werden, der die numerischen Fluktuationen dämpft.

## 6 Entfaltung der Energieverlustfunktion



**Abbildung 6.6: Frequenzspektrum der entfalteten Energieverlustfunktion.** Dargestellt ist die Frequenzamplitude als Funktion der jeweiligen Frequenz  $f$  und des Energieverlustes  $\Delta E$ . Je größer die  $\Delta E$ -Werte sind, desto größer sind die Frequenzamplituden, die auf die Fluktuationen innerhalb der entfalteten Funktion zurückzuführen sind. Wegen des schnellen Anwachsens der Amplituden sind die  $z$ -Werte logarithmisch aufgetragen.

### 6.1.2.2 Anwendung eines Tiefpassfilters

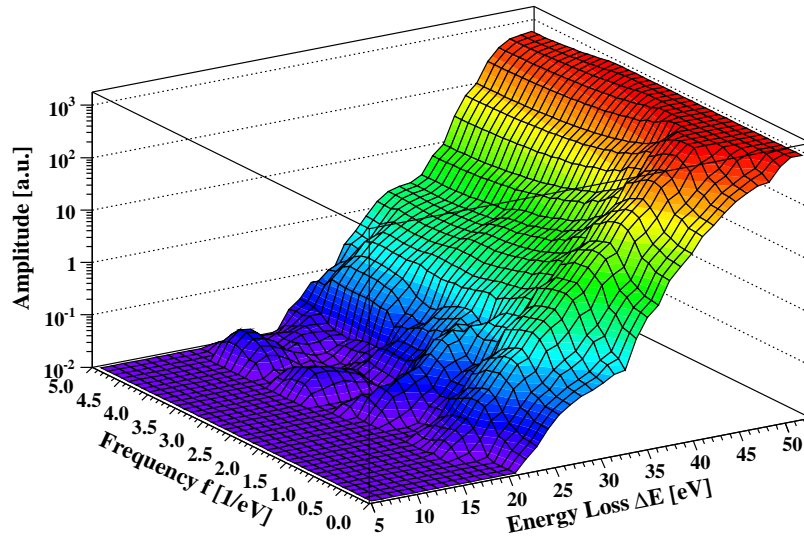
Zusammengefasst lautet das Ergebnis des letzten Abschnitts wie folgt:

Das Signal beginnt bei  $\approx 10$  eV und ist im Frequenzbereich bis  $\approx 14$  eV über das gesamte Frequenzspektrum verteilt. Die Oszillationen bei höheren Energien, die durch das Abschneiden der Funktion entstehen und ebenfalls im gesamten Spektrum zu sehen sind, werden nicht berücksichtigt, da sie keinen Beitrag zum Signal liefern. Ab  $\approx 14$  eV existieren Signalfrequenzen zwischen  $0 \text{ eV}^{-1}$  und  $\approx 1.5 \text{ eV}^{-1}$ , die im weiteren Verlauf kleiner werden und gegen Null gehen. Die Rauschfrequenzen beginnen bei  $\approx 15$  eV und sind gleichmäßig über das Frequenzspektrum verteilt. Im Bereich höherer Energien wachsen sie sehr schnell an und gehen gegen Unendlich.

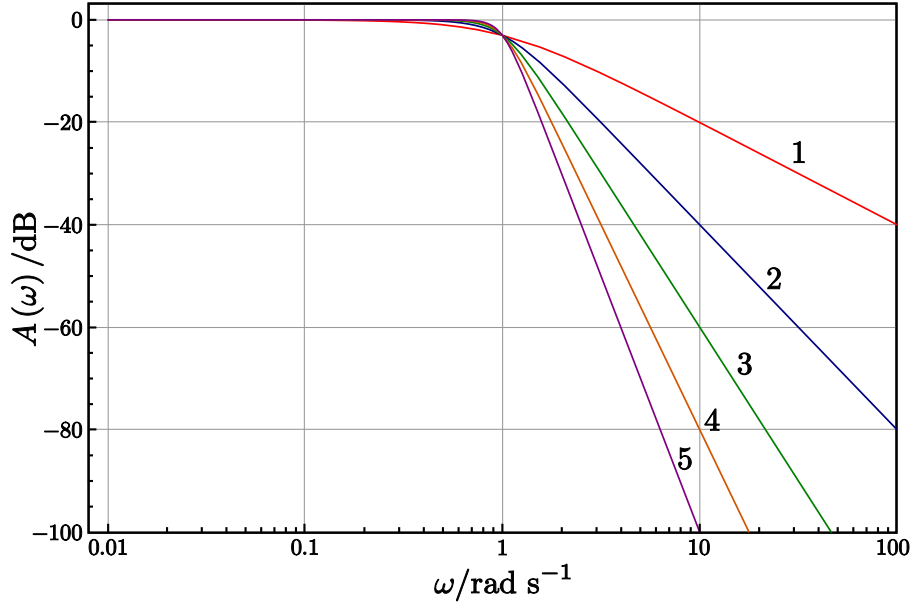
Es ist sofort ein Problem erkennbar: Die Rauschfrequenzen überdecken ab einem Energieverlust von  $\approx 21$  eV die Signalfrequenzen. Jeder Filter, der die Fluktuationen dämpft, wird ebenfalls zumindest einen Teil des Signals dämpfen. Beim KATRIN Experiment sind die letzten  $\approx 10$  eV unterhalb der Endpunktenergie der Bereich mit der größten Sensitivität auf die Neutrinomasse, und in diesem Bereich sollte der Filter noch nicht einsetzen<sup>5</sup>.

Nach dieser einleitenden Betrachtung kann festgehalten werden, dass ein Butterworth-Tiefpassfilter am besten geeignet ist, um die auftretenden numerischen

<sup>5</sup>Die Grenzfrequenz  $\omega_c$  des Filters wird in Abhängigkeit des Energiebereichs bestimmt.



**Abbildung 6.7: Frequenzspektrum der Rauschamplituden.** In dem Diagramm sind die Frequenzamplituden logarithmisch als Funktion der jeweiligen Frequenz  $f$  und des Energieverlustes  $\Delta E$  aufgetragen. Die Frequenzamplituden des Rauschens, die ab  $\approx 15$  eV beginnen, erhält man durch Fouriertransformation der Differenz aus analytischer und entfalteter Energieverlustfunktion.



**Abbildung 6.8: Frequenzgang eines Butterworth Tiefpassfilters.** Dargestellt ist die auf 0 dB normierte Verstärkung  $A(\omega)$  als Funktion der Frequenz  $\omega$  für die Filterordnungen 1 (rot) bis 5 (violett). Die Grenzfrequenz  $\omega_c$  ist auf 1 rad/s normiert. Je geringer die Ordnung ist, desto flacher verläuft der Frequenzgang des Filters. Quelle: Wikipedia

## 6 Entfaltung der Energieverlustfunktion

Fluktuationen zu dämpfen. Butterworthfilter sind kontinuierliche Filter, deren Frequenzgang unterhalb einer festgelegten Grenzfrequenz möglichst flach verläuft. Mit steigender Ordnung des Filters wird dieser immer steiler, wie in Abb. 6.8 zu sehen ist. Das Verfahren zur Bestimmung der Filterkoeffizienten, welches in Abschnitt 6.1.2 beschrieben worden ist, wird anhand eines Beispiels (Entwurf eines Butterworth-Tiefpassfilters  $N$ -ter Ordnung) verdeutlicht.

Zunächst wird das Betragsquadrat der Übertragungsfunktion bestimmt:

$$|\mathcal{H}(i\omega)|^2 = \frac{1}{1 + \left(\frac{\omega}{\omega_c}\right)^{2N}} \quad \text{mit } i\omega=s \quad \mathcal{H}(s) \cdot \mathcal{H}(-s) = \frac{1}{1 + \left(\frac{s}{i\omega_c}\right)^{2N}}$$

Hierbei sind  $\omega_c$  die Abschnidefrequenz und  $N$  die Filterordnung. Nun müssen die Polstellen der Funktion berechnet werden. Nach kurzer Zwischenrechnung erhält man das Ergebnis [Wer06]:

$$s_k = \omega_c \cdot e^{\frac{i\pi(2k+N-1)}{2N}} \quad k = 1, 2, \dots, 2N$$

Die Polstellen liegen verteilt auf dem Mittelpunktkreis der  $s$ -Ebene mit dem Radius  $\omega_c$ . Da nur die stabilen Polstellen in der linken  $s$ -Halbebene in die Transferfunktion eingehen, lautet das Ergebnis damit:

$$\mathcal{H}(s) = \frac{b_0}{\prod_{k=1}^N (s - s_k)}$$

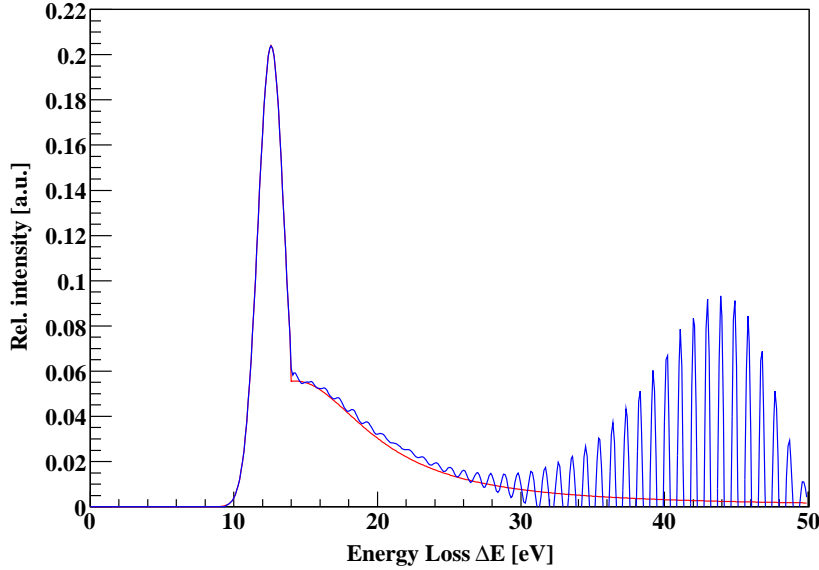
mit dem Skalierungsfaktor  $b_0$ . Nach Durchführung der bilinearen Transformation können die Filterkoeffizienten  $c_k$  und  $d_j$  durch Koeffizientenvergleich bestimmt werden. Danach kann der Filter gemäß Gleichung (6.3) auf die Daten angewandt werden.

Die Berechnung der Koeffizienten erfolgt mit der freien Software *bwlp* [Hol08]. Innerhalb des Programms *bwlp* können für jede Abschnidefrequenz die Koeffizienten des Filters für die gewünschte Ordnung  $N$  berechnet werden.

Der Filter wird nun wie folgt angewandt: Bis 14 eV werden alle Frequenzen bis  $5 \text{ eV}^{-1}$  durchgelassen, bevor ab 14 eV die Abschnidefrequenz auf  $\omega_c = 1.5 \text{ eV}^{-1}$  gesetzt wird und zu höheren Energien hin langsam gegen Null geführt wird. Nach einem Test der verschiedenen Filterordnungen zeigt sich, dass ein Tiefpassfilter 3. Ordnung die Fluktuationen am besten dämpft.

Das Ergebnis ist in Abb. 6.9 zu sehen. Die blaue Kurve ist die gefilterte, entfaltete Funktion. Deutlich ist zu erkennen, dass ab  $\approx 25 \text{ eV}$  die Fluktuationen wieder anwachsen. Ein Filter 5. Ordnung, der in Abb. 6.10 dargestellt ist, dämpft die Fluktuationen auch bei hohen Energien, allerdings gibt es einen Überschwinger, der bei 14 eV liegt und größer ist als beim Filter 3. Ordnung.

Die Ursache dieser Überschwinger liegt in einer Kürzung der unendlich langen Ausgangsfolge des idealen Filters mit einem rechteckförmigen Betrachtungsfenster. Im betrachteten Fall wird zwar keine Rechteckfunktion verwandt, aber für höhere Ordnungen hat der Butterworth-Tiefpassfilter eine immer steilere Flanke. Für einen Filter 5. Ordnung wird also näherungsweise der ideale Frequenzgang des Filters mit der  $\mathcal{FT}$  eines Rechteckfensters gefaltet und man erhält Os-



**Abbildung 6.9: Anwendung eines Butterworth-Tiefpassfilters 3. Ordnung auf die entfaltete Energieverlustfunktion.** Der Filter setzt bei 14 eV ein und dämpft die Fluktuationen der entfalteten Funktion (blau) bis  $\approx 25$  eV. Danach wachsen die Fluktuationen noch einmal an, bevor sie ab  $\approx 45$  eV der analytischen Funktion (rot) annähern.

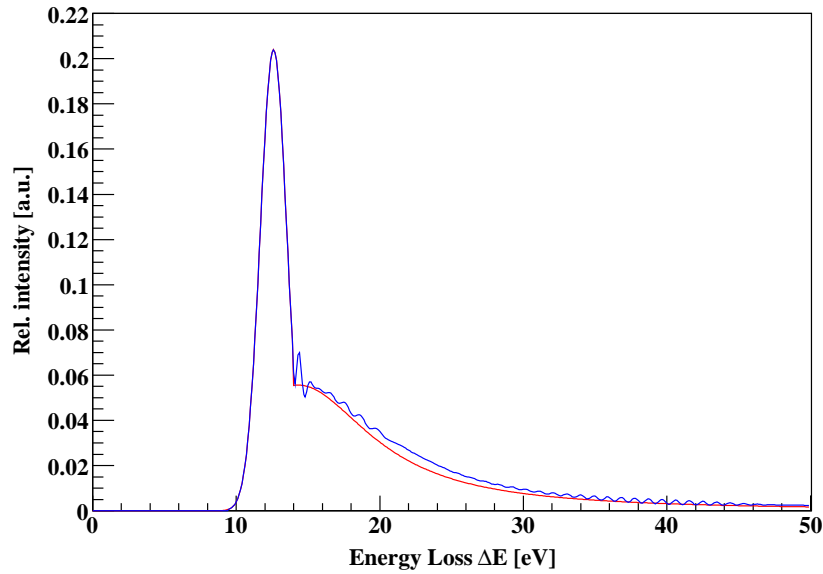
zillationen, die auf die *si*-Funktion zurückzuführen sind (s. Abschnitt 6.1.2.1). Dieser Effekt wird auch als Gibbs'sches Phänomen bezeichnet [But03].

Beim KATRIN Experiment hat der Bereich um 14 eV unterhalb der Endpunktenergie eine höhere Sensitivität auf die Neutrinomasse als der Bereich um 25 eV. Aus diesem Grund eignet sich nach einem Vergleich der beiden Filter beim KATRIN Experiment ein Butterworth-Tiefpassfilter 3. Ordnung für die Dämpfung der Fluktuationen besser als ein Filter höherer Ordnung.

### 6.1.3 Entfaltung der Energieverlustfunktion

Nachdem die stufenweise Entfaltung mit anschließender Filterung an analytischen Funktionen getestet worden ist, soll nun überprüft werden, ob eine Entfaltung auch mit simulierten Daten möglich ist.

Mit den im vorherigen Kapitel bestimmten Funktionen  $T_{\text{egun}}(E, qU)$  und  $\varepsilon_1(\Delta E)$ , die in Abb. 5.9 gezeigt sind, erhält man als Ergebnis der Entfaltung die Energieverlustfunktion  $d\sigma/d\Delta E$ , welche in Abb. 6.11 dargestellt ist. Die entfaltete Kurve (blau) hat die gleiche Form wie die analytische Funktion (rot), aber sie besitzt einen hohen Rauschanteil. Es handelt sich jedoch nicht um numerische Fluktuationen wie bei den analytischen Funktionen, da diese erst bei  $\approx 15$  eV beginnen und immer weiter anwachsen. Stattdessen liegt intrinsisches bzw. stochastisches Rauschen vor, welches bei allen Messprozessen auftritt und nur durch eine Erhöhung der gemessenen Elektronenanzahl verringert werden kann.

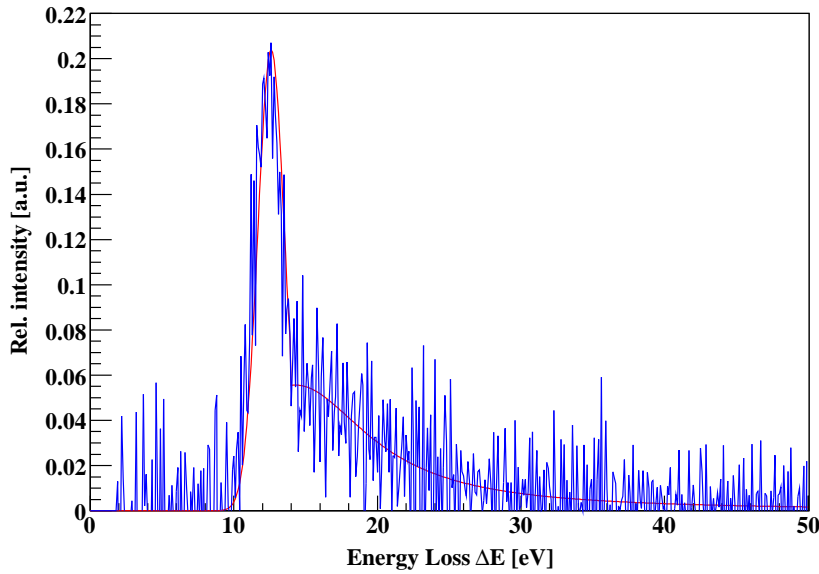


**Abbildung 6.10: Anwendung eines Butterworth-Tiefpassfilters 5. Ordnung auf die entfaltete Energieverlustfunktion.** Der Filter setzt bei 14 eV ein und hat an dieser Stelle einen starken Überschwinger. Danach werden die Fluktuationen der Energieverlustfunktion (blau) gedämpft, so dass sie sich der analytischen Funktion (rot) annähert.

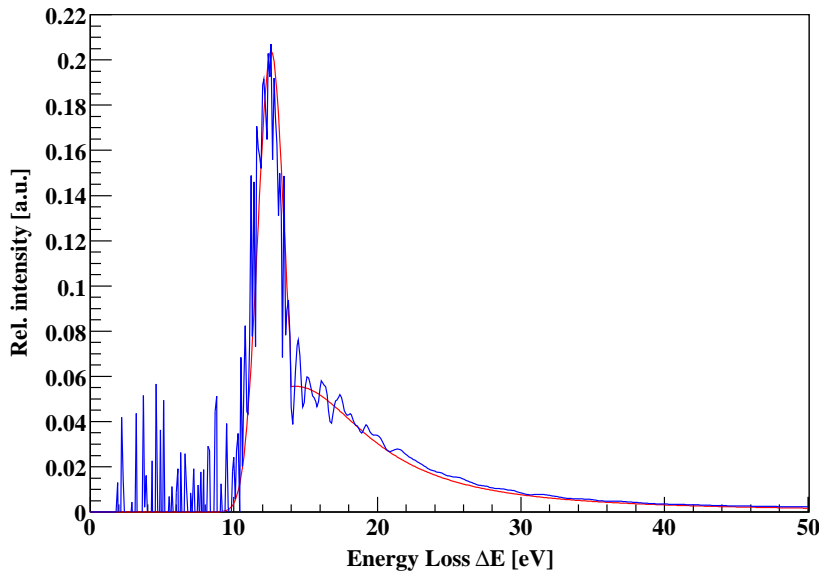
Nach Anwendung des Tiefpassfilters zum Glätten der Daten erhält man das in Abb. 6.12 gezeigte Ergebnis. Da der Filter erst ab 14 eV einsetzt, erfolgt keine Dämpfung der Kurve (blau) unterhalb dieser Energie. Die Oszillationen, die bei 14 eV beginnen (s. Abschnitt 6.1.2.2), bleiben zwischen 14 eV und 18 eV groß. Erst zu höheren Energien hin nähert sich die gefilterte der analytischen Kurve an, bis die Kurven fast identisch sind.

Es kann festgehalten werden, dass die Tests der Entfaltungsmethode an analytischen Funktionen auf der einen und simulierten Messdaten auf der anderen Seite zu qualitativ unterschiedlichen Resultaten führen. Dies liegt vermutlich daran, dass die Matrix im analytischen Fall sehr kleine Eigenwerte und damit eine Determinante nahe Null besitzt. Demgegenüber erhöhen im Falle simulierter Daten die kleinen Rauschanteile der Messungen die Determinante und stabilisieren somit das Ergebnis (vgl. auch Abschnitt 5.3.4).

Da die analytischen Funktionen mit den simulierten Messdaten nicht direkt vergleichbar sind, werden die zwei noch verbleibenden Entfaltungsmethoden nur an den simulierten Daten getestet.



**Abbildung 6.11: Stufenweise Entfaltung mit simulierten Daten.** Dargestellt ist das Ergebnis der Entfaltung (blau) und das Eingangsmodell der Simulation (rot) als Funktion des Energieverlustes  $\Delta E$ . Die blaue Kurve hat die gleiche Form wie die rote, aber sie hat einen erhöhten Rauschanteil, der auf den simulierten Messprozess zurückzuführen ist.



**Abbildung 6.12: Anwendung eines Butterworth-Tiefpassfilters 3. Ordnung auf die entfaltete Energieverlustfunktion.** Der Filter beginnt bei 14 eV und dämpft die Fluktuationen der entfalteten Funktion (blau) daher unterhalb von 14 eV nicht. Zwischen 14 und 18 eV sind Oszillationen zu erkennen, die auf das Einsetzen des Filters zurückzuführen sind.

## 6.2 BiCG-Verfahren

Eine weitere Möglichkeit zur Entfaltung der Energieverlustfunktion ist die BiCG-Methode (vom Englischen: Biconjugate Gradient method). Bei dieser handelt es sich um ein iteratives Verfahren, mit dem lineare Gleichungssysteme der Form  $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$  näherungsweise gelöst werden können. Sie ist eine Erweiterung der CG-Methode (vom Englischen: Conjugate Gradient method). Beide Methoden werden nach einer kurzen Zusammenfassung von iterativen Verfahren allgemein erläutert.

### 6.2.1 Iterative Lösungsverfahren

Iterative Methoden werden benutzt, um lineare Gleichungssysteme zu lösen. Dazu werden die Komponenten eines näherungsweise gegebenen oder aber unbekannten Startvektors  $\mathbf{x}_0$  sukzessiv modifiziert, bis Konvergenz von  $\mathbf{Ax}_j$  ( $j = 0, 1, 2, \dots$ ) mit  $\mathbf{b}$  eintritt. Die Veränderung des Vektors kann abhängig vom jeweiligen Lösungsverfahren unterschiedlich sein, d.h. es können eine oder mehrere Komponenten gleichzeitig oder in bestimmter Reihenfolge abgeändert werden. Es gibt zwei Arten von iterativen Verfahren: Stationäre und Nichtstationäre Methoden.

#### 1) Stationäre Verfahren

Eine Iteration  $x^{(j+1)} := T(x^{(j)})$  heißt stationär, wenn die Iterationsvorschrift  $T$  unabhängig vom jeweiligen Iterationsschritt definiert ist, d.h. die Information zur Berechnung der Lösung bleibt bei jedem Schritt gleich. Mathematisch wird dies in folgender Gleichung ausgedrückt:

$$\mathbf{x}^{(j)} = \mathbf{B}\mathbf{x}^{(j-1)} + \mathbf{c} \quad j = 1, 2, 3 \dots$$

Hierbei sind  $\mathbf{B} \in \mathbb{R}^{n \times n}$  eine Matrix und  $\mathbf{c} \in \mathbb{R}^n$  ein Vektor. Um eine Iterationsvorschrift für die Lösung des Gleichungssystems  $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$  zu erhalten, wird im Allgemeinen die Matrix  $\mathbf{A}$  additiv zerlegt. Zu den stationären Methoden gehören das Jacobi-Verfahren, die Gauss-Seidel-Methode, der SOR-Algorithmus (vom Englischen: Successive Overrelaxation Method) und das SSOR-Verfahren (vom Englischen: Symmetric Successive Overrelaxation method).

#### 2) Nichtstationäre Verfahren

Eine Iteration  $x^{(j+1)} := T_j(x^{(j)})$  heißt nichtstationär, wenn die Iterationsvorschrift  $T_j$  abhängig ist vom jeweiligen Iterationsschritt  $j$ , d.h. jeder Iterationsschritt enthält eine andere Information zur Berechnung der Lösung. Die Information besteht üblicherweise aus inneren Produkten von Residuen oder Vektoren, die aus dem Verfahren selbst stammen. Zu den nichtstationären Methoden gehören neben vielen anderen der bereits genannte CG- und BiCG-Algorithmus.



Stationäre Methoden sind im Normalfall weniger effektiv, können aber einfacher verstanden und implementiert werden. Dagegen sind nichtstationäre Methoden eine relativ moderne Entwicklung, die zwar effektiv sind, aber schwerer zu analysieren.<sup>6</sup>

### 6.2.2 Der CG-Algorithmus

Die CG-Methode wurde von Hestenes [Hes52] und Lanczos [Lan52] unabhängig voneinander entwickelt. Sie löst näherungsweise lineare Gleichungssysteme  $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$ , deren Matrix  $\mathbf{A}$  folgende Voraussetzungen erfüllt.

- $\mathbf{A}$  ist symmetrisch. Dies ist der Fall, wenn für die Koeffizienten der Matrix  $a_{ij} = a_{ji}$  bzw.  $\mathbf{A} = \mathbf{A}^T$  gilt. Eine symmetrische Matrix ist also gleich ihrer Transponierten.
- $\mathbf{A}$  ist positiv definit, wenn für das Skalarprodukt der Matrix mit einem beliebigen Vektor  $\mathbf{x} \neq 0$   $\langle \mathbf{x}, \mathbf{Ax} \rangle > 0$  erfüllt ist.
- Es liegt eine reelle Matrix  $\mathbf{A}$  vor.

Zwei Vektoren  $\mathbf{x}$  und  $\mathbf{y}$  sind orthogonal zueinander, wenn für das Skalarprodukt  $\langle \mathbf{x}, \mathbf{y} \rangle = 0$  gilt. Die beiden Vektoren sind konjugiert oder  $\mathbf{A}$ -orthogonal, wenn zusätzlich die Relation

$$\langle \mathbf{Ax}, \mathbf{y} \rangle = \langle \mathbf{x}, \mathbf{Ay} \rangle = 0$$

im Falle einer symmetrischen Matrix  $\mathbf{A}$  erfüllt ist.

Zur Beschreibung des CG-Algorithmus wird die folgende Notation gebraucht:  $\mathbf{h}$  ist die Lösung des Gleichungssystems  $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$  und  $(\mathbf{h} - \mathbf{x})$  ist der Fehlervektor von  $\mathbf{x}$  als Näherung von  $\mathbf{h}$ . Die Differenz  $\mathbf{r} = \mathbf{b} - \mathbf{Ax}$  ist das Residuum von  $\mathbf{x}$ ,  $|\mathbf{r}|^2$  wird als quantitative Größe quadratisches Residuum genannt. Außerdem wird ein Hilfsvektor  $\mathbf{p}$  eingeführt, der die jeweilige Suchrichtung angibt.

Für den CG-Algorithmus gelten die Relationen

$$\langle \mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j \rangle = 0, \quad \langle \mathbf{p}_i, \mathbf{Ap}_j \rangle = 0 \quad (i \neq j), \quad (6.6)$$

d.h. die Residuen  $\mathbf{r}_0, \mathbf{r}_1, \dots$  sind orthogonal zueinander, und die Richtungsvektoren  $\mathbf{p}_0, \mathbf{p}_1, \dots$  sind konjugiert.<sup>7</sup> Die beiden Gleichungen (6.6) sind wichtig, um den CG-Algorithmus herzuleiten und werden bei dem Verfahren selbst nicht berechnet. Im Folgenden wird die Herleitung kurz erläutert.

Der Vektor  $\mathbf{x}_{j+1}$  kann ausgedrückt werden als

$$\mathbf{x}_{j+1} = \mathbf{x}_j + \alpha_j \mathbf{p}_j \quad (6.7)$$

<sup>6</sup>Weitere Vor- und Nachteile sowie eine ausführliche Beschreibung aller Verfahren können in [Bar06] nachgelesen werden.

<sup>7</sup>Die Beweise finden sich in [Hes52].

## 6 Entfaltung der Energieverlustfunktion

und damit gilt für den Residuumvektor:

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

Da die Residuumvektoren orthogonal zueinander sind (6.6), gilt  $\langle (\mathbf{r}_j - \alpha_j \mathbf{A} \mathbf{p}_j), \mathbf{r}_j \rangle = 0$  und damit für  $\alpha_j$

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

Die Suchrichtung  $\mathbf{p}_{j+1}$  ist eine Linearkombination von  $\mathbf{r}_{j+1}$  und  $\mathbf{p}_j$ , damit folgt

$$\mathbf{p}_{j+1} = \mathbf{r}_{j+1} + \beta_j \mathbf{p}_j \quad \implies \quad \langle \mathbf{A} \mathbf{p}_j, \mathbf{r}_j \rangle = \langle \mathbf{A} \mathbf{p}_j, \mathbf{p}_j \rangle.$$

Durch weitere Berechnungen unter Ausnutzung von Orthogonalitäts- und Konjugationsrelationen erhält man<sup>8</sup>

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

Zusammengefasst lautet der Algorithmus wie folgt:

**Algorithmus :** CG-Verfahren

**Eingabe :** Startvektor  $\mathbf{x}_0$

**Ausgabe :** Ergebnis  $\mathbf{x}_m$  ( $m = 1, 2, \dots$ )

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

**for**  $j = 0, 1, 2, \dots$  **do**

$$\alpha_j = \langle \mathbf{r}_j, \mathbf{r}_j \rangle / \langle \mathbf{A} \mathbf{p}_j, \mathbf{p}_j \rangle$$

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

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

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

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

**if**  $r_m \approx 0$  **then**

**break**

**end**

**end**

Ohne Auftreten von Rundungsfehlern wird nach  $m$  Iterationsschritten ein Wert  $\mathbf{x}_m$  erreicht, für den das Residuum  $\mathbf{r}_m \approx 0$  ist. Dieser Schätzwert  $\mathbf{x}_m$  ist die gesuchte Lösung  $\mathbf{h}$ . Wenn das Residuum deutlich größer als Null ist, so wird derjenige Wert  $\mathbf{x}_m$  als Ergebnis gewählt, für den das Residuum am kleinsten ist.

<sup>8</sup>Eine ausführliche Herleitung des Algorithmus befindet sich in [Saa96].

### 6.2.3 Der BiCG-Algorithmus

Die Orthogonalitäts- und Konjugationsrelationen gemäß Gleichung (6.6) sind notwendige Voraussetzung für die Herleitung des CG-Algorithmus und werden mathematisch nur dann erfüllt, wenn eine reelle, symmetrische und positiv definite Matrix vorliegt. Aus diesem Grund wurde der BiCG-Algorithmus als Erweiterung des CG-Verfahrens entwickelt, der Gleichungssysteme mit allgemeinen Matrizen näherungsweise löst. Er wurde erstmals von Lanczos [Lan52] vorgeschlagen und später von Fletcher [Fle76] weiterentwickelt.

Bei dem BiCG-Algorithmus werden vier Vektoren  $\mathbf{r}_j$ ,  $\bar{\mathbf{r}}_j$ ,  $\mathbf{p}_j$ ,  $\bar{\mathbf{p}}_j$  benötigt, welche die folgenden Biorthogonalitäts- und Bikonjugationseigenschaften besitzen<sup>9</sup>:

$$\begin{aligned}\langle \mathbf{r}_i, \bar{\mathbf{r}}_j \rangle &= \langle \bar{\mathbf{r}}_i, \mathbf{r}_j \rangle = 0 & (j < i) \\ \langle \bar{\mathbf{p}}_i, \mathbf{A}\mathbf{p}_j \rangle &= \langle \mathbf{p}_i, \mathbf{A}^T \bar{\mathbf{p}}_j \rangle = 0 & (j < i)\end{aligned}$$

Der Algorithmus sieht dann folgendermaßen aus:

**Algorithmus : BiCG-Verfahren**

**Eingabe :** Startvektor  $\mathbf{x}_0$

**Ausgabe :** Ergebnis  $\mathbf{x}_m$  ( $m = 1, 2, \dots$ )

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

**Wähle**  $\bar{\mathbf{r}}_0$  derart, dass  $\langle \mathbf{r}_0, \bar{\mathbf{r}}_0 \rangle \neq 0$

**Setze**  $\mathbf{p}_0 = \mathbf{r}_0$  und  $\bar{\mathbf{p}}_0 = \bar{\mathbf{r}}_0$

**for**  $j = 0, 1, 2, \dots$  **do**

$\alpha_j = \langle \mathbf{r}_j, \bar{\mathbf{r}}_j \rangle / \langle \mathbf{A}\mathbf{p}_j, \bar{\mathbf{p}}_j \rangle$

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

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

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

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

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

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

**if**  $\mathbf{r}_m \approx \bar{\mathbf{r}}_m \approx 0$  **then**

**break**

**end**

**end**

Die Iteration bricht ab, wenn nach  $m$  Iterationsschritten für beide Residuumvektoren  $\mathbf{r}_m \approx \bar{\mathbf{r}}_m \approx 0$  gilt. Der zugehörige Vektor  $\mathbf{x}_m$  ist die gesuchte Lösung.

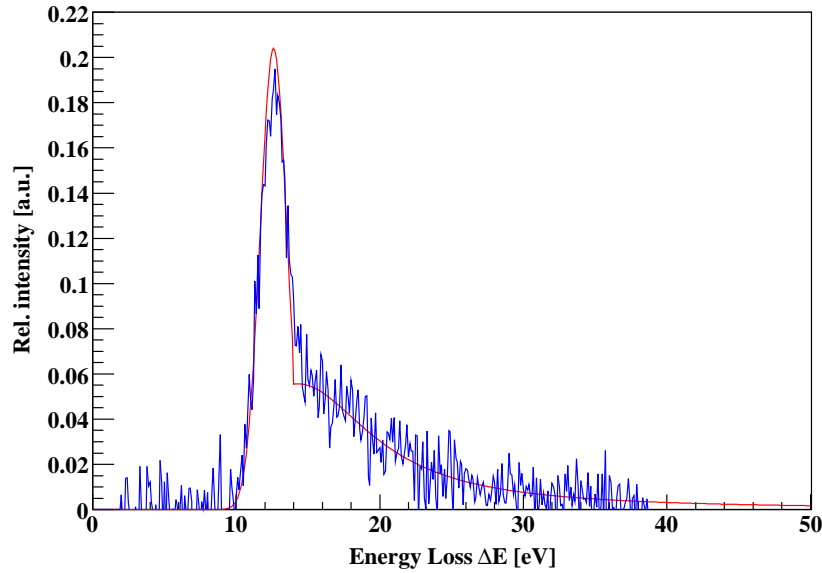
Der CG-Algorithmus ist somit nur ein Spezialfall des BiCG-Algorithmus für reelle, symmetrische und positiv definite Matrizen, bei dem  $\mathbf{r}_j = \bar{\mathbf{r}}_j$  und  $\mathbf{p}_j = \bar{\mathbf{p}}_j$  gesetzt wird.

<sup>9</sup>Die Beweise können in [Fle76] nachgelesen werden.

### 6.2.4 Entfaltung der Energieverlustfunktion

Nach der Beschreibung des Algorithmus wird dieser nun unter Verwendung der simulierten Daten getestet. Dazu wird die Bibliothek *linbcg* [Num02] verwendet, innerhalb derer die Anzahl der Iterationsschritte festgelegt werden muss. Diese ist abhängig von dem Residuum, das bei jedem Schritt berechnet wird. Im Allgemeinen nimmt das Residuum nach einer bestimmten Anzahl von Schritten einen minimalen Wert ein und verändert sich danach nicht mehr, so dass Konvergenz eintritt.

Das Ergebnis der Entfaltung nach Anwendung des BiCG-Algorithmus ist in Abb. 6.13 zu sehen. Als Eingangsvektor  $\mathbf{x}_0$  wird der Nullvektor gewählt, so dass keine Information über die Form der Energieverlustfunktion in den Algorithmus eingeht. Die entfaltete Funktion (blau) hat bis  $\approx 38$  eV die Form des Eingangsmodells (rot), oberhalb dieses Wertes strebt sie zu negativen Werten. Auch bei



**Abbildung 6.13: Entfaltung der Energieverlustfunktion unter Anwendung des BiCG-Algorithmus.** Dargestellt ist das Ergebnis der Entfaltung (blau) als Funktion des Energieverlustes  $\Delta E$ . Bis  $\approx 38$  eV hat die blaue Kurve die Form des Eingangsmodells (rot), bei höheren Energien tritt keine Konvergenz ein. Das Rauschen der Funktion ist auf den simulierten Messprozess zurückzuführen.

einer Erhöhung der Iterationsschritte wird das Residuum nicht kleiner, daher ist die dargestellte Funktion das bestmögliche Ergebnis. Da beim KATRIN Experiment im Wesentlichen die letzten 30 eV unterhalb der Endpunktenergie relevant sind, hat die Form der entfalteten Funktion im Bereich ab 38 eV keine große Bedeutung.

Das Rauschen innerhalb des Lösungsvektors hat die gleiche Ursache, die bei der stufenweisen Entfaltung schon beschrieben worden ist (vgl. Abschnitt 6.1.3). Es

ist zurückzuführen auf statistische Fluktuationen des simulierten Messprozesses und daher stochastisch verteilt.

Der Algorithmus wird noch einmal mit dem Entfaltungsergebnis der stufenweisen Entfaltung als Eingangsvektor  $\mathbf{x}_0$  ausgeführt. Das Ergebnis bleibt jedoch gleich, und es ändert sich nur die Anzahl der Iterationsschritte. Diese wird geringer, da der Eingangsvektor in diesem Fall eine ähnliche Form wie der Lösungsvektor hat.

## 6.3 Die Singulärwertzerlegung

Nachdem bereits zwei Entfaltungsmethoden vorgestellt worden sind, erfolgt eine Beschreibung der Singulärwertzerlegung als dritte Möglichkeit zur Entfaltung der Energieverlustfunktion.

### 6.3.1 Theoretische Grundlagen

Eine quadratische Matrix  $\mathbf{A} \in \mathbb{C}^{n \times n}$ , zu der eine inverse Matrix  $\mathbf{A}^{-1}$  berechnet werden kann, wird in der Linearen Algebra reguläre oder nichtsinguläre Matrix genannt. Dagegen heißt eine Matrix  $\mathbf{A} \in \mathbb{C}^{m \times n}$ , zu der keine inverse Matrix  $\mathbf{A}^{-1}$  existiert, singuläre Matrix. Eine singuläre Matrix besitzt keine Eigenwerte. Jede Matrix lässt sich jedoch als Produkt dreier spezieller Matrizen darstellen, aus dem die sogenannten Singulärwerte der Matrix abgelesen werden können, welche ähnlich den Eigenwerten die Eigenschaften der Matrix charakterisieren. Diese Methode heißt Singulärwertzerlegung (Abk.: SVD für Singular Value Decomposition).

Unter der Annahme, dass die Anzahl der Zeilen gleich der Anzahl der Spalten ist, d.h. o.B.d.A.  $m = n$ , lässt sich die Matrix  $\mathbf{A}$  wie folgt zerlegen [Gol65]:

$$\mathbf{A} = \mathbf{U} \cdot \mathbf{W} \cdot \mathbf{V}^*, \quad (6.8)$$

mit den unitären Matrizen  $\mathbf{U} \in \mathbb{C}^{m \times m}$  und  $\mathbf{V} \in \mathbb{C}^{n \times n}$  -  $\mathbf{V}^*$  ist die Adjungierte von  $\mathbf{V}$  - sowie der Diagonalmatrix  $\mathbf{W} \in \mathbb{R}^{n \times n}$  mit reellen, positiven Diagonalelementen  $w_j$ . Die Diagonalelemente heißen Singulärwerte von  $\mathbf{A}$  und sind nichtnegative Quadratwurzeln der Eigenwerte von  $\mathbf{A}^* \mathbf{A}$  oder  $\mathbf{A} \mathbf{A}^*$ . Die Spalten der Matrizen  $\mathbf{U}$  und  $\mathbf{V}$  sind orthonormal zueinander, d.h. es gilt:

$$\mathbf{U}^* \mathbf{U} = \mathbf{V}^* \mathbf{V} = \mathbf{1}.$$

Bei Matrizen über  $\mathbb{R}$  entspricht die adjungierte Matrix genau der transponierten Matrix. Für reelle Gleichungssysteme lässt sich Gleichung (6.8) somit folgendermaßen schreiben:

$$\mathbf{A} = \mathbf{U} \cdot \mathbf{W} \cdot \mathbf{V}^T \quad \text{mit } \mathbf{W} = \text{diag}(w_j). \quad (6.9)$$

Nach der beschriebenen Zerlegung der Matrix  $\mathbf{A}$ , kann die Pseudoinverse  $\mathbf{A}^{-1}$  berechnet werden. Die inversen Matrizen von  $\mathbf{U}$  und  $\mathbf{V}$  sind wegen der Orthogo-

## 6 Entfaltung der Energieverlustfunktion

nalität ihre Transponierten, die Inverse der Diagonalmatrix  $\mathbf{W}$  ist eine Matrix mit den reziproken Elementen von  $w_j$ . Aus Gleichung (6.9) folgt sofort für die Berechnung von  $\mathbf{A}^{-1}$ :

$$\mathbf{A}^{-1} = \mathbf{V} \cdot \mathbf{W}^{-1} \cdot \mathbf{U}^T \quad \text{mit } \mathbf{W}^{-1} = \text{diag} \left( \frac{1}{w_j} \right). \quad (6.10)$$

Auf die Lösung von linearen Gleichungssystemen mit Hilfe der SVD geht der folgende Abschnitt ein.

### 6.3.2 Lösung des linearen Gleichungssystems

Es soll das lineare Gleichungssystem der Form  $\mathbf{A}\mathbf{x} = \mathbf{b}$  für eine quadratische Matrix  $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{n \times n}$  gelöst werden. Dabei gibt es Unterschiede, je nachdem ob eine reguläre oder singuläre Matrix vorliegt.

Eine reguläre Matrix  $\mathbf{A}$  hat vollen Rang, daher haben auch die Matrizen  $\mathbf{U}$ ,  $\mathbf{V}$ , und  $\mathbf{W}$ , in die  $\mathbf{A}$  gemäß nach (6.8) zerlegt wird, vollen Rang. Die Lösung des Gleichungssystems erfolgt durch Multiplikation mit der inversen Matrix gemäß (6.10). Das Gleichungssystem hat in diesem Fall eine eindeutige Lösung.

Ist die Matrix  $\mathbf{A}$  singulär, so gibt es einen Unterraum des Vektors  $\mathbf{x}$ , der auf Null abgebildet wird, d.h. es gilt  $\mathbf{A}\mathbf{x} = 0$ . Es gibt auch einen Unterraum von  $\mathbf{b}$ , Bildbereich von  $\mathbf{A}$  genannt, auf den  $\mathbf{x}$  abgebildet werden kann. Die Dimension dieses Bildbereichs wird Rang von  $\mathbf{A}$  genannt. Für singuläre Matrizen ist der Rang der Matrix stets kleiner als  $n$ .

$$\begin{pmatrix} a & a & a & a & a \\ 0 & a & a & a & a \\ 0 & 0 & a & a & a \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (6.11)$$

Im Beispiel (6.11) für  $n = 5$  ist der Rang der Matrix  $\text{rg}(\mathbf{A}) = 3$ , die Dimension des Nullraums, auch Kern der Matrix genannt, beträgt  $\dim \ker(\mathbf{A}) = 2$ .

Das beschriebene Gleichungssystem kann mit (6.10) gelöst werden, wenn für alle Singulärwerte  $w_j = 0$  die zugehörigen reziproken Werte  $1/w_j$  gleich Null gesetzt werden:

$$\mathbf{x} = \mathbf{V} \cdot \mathbf{W}^{-1} \cdot \mathbf{U}^T \cdot \mathbf{b} \quad (6.12)$$

Bei der Lösung werden zwei Fälle unterschieden:

1)  $\mathbf{b} = 0$

Dieser Fall ist trivial.

2)  $\mathbf{b} \neq 0$

Es muss herausgefunden werden, ob  $\mathbf{b}$  im Bildbereich von  $\mathbf{A}$  liegt.

### 6.3 Die Singulärwertzerlegung

- a) Ist dies gegeben, so gibt es eine Lösung  $\mathbf{x}$ , tatsächlich sogar mehr als eine, da jeder Vektor im Nullraum als Linearkombination zu  $\mathbf{x}$  addiert werden kann.
- b) Liegt  $\mathbf{b}$  außerhalb des Bildbereichs der singulären Matrix  $\mathbf{A}$ , hat das Gleichungssystem analytisch keine Lösung. Es kann jedoch ein Lösungsvektor  $\mathbf{x}$  konstruiert werden, welcher das Gleichungssystem näherungsweise löst.

Im Fall 2a) wird derjenige Vektor mit der kleinsten Länge  $\|\mathbf{x}\|^2$  als repräsentative Lösung gesucht. Diesen Vektor erhält man durch Anwendung der SVD, da alle reziproken Werte  $1/w_j$  durch Null ersetzt werden, falls  $w_j = 0$  ist.

Im Fall 2b) kann der Vektor  $\mathbf{x}$  konstruiert werden, indem die Summe der Quadrate

$$\|\mathbf{b} - \mathbf{A}\mathbf{x}\|^2 \quad (6.13)$$

minimiert wird. Die Pseudoinverse liefert somit eine Lösung für das Problem der kleinsten Fehlerquadrate [Gre60].

Zusammenfassend wird ein Gleichungssystem nun folgendermaßen gelöst: Zunächst erfolgt die Zerlegung einer beliebigen quadratischen Matrix  $\mathbf{A}$  in drei Matrizen gemäß Gleichung (6.8). Ist einer der Singulärwerte  $w_j = 0$ , so folgt daraus sofort, dass  $\mathbf{A}$  eine singuläre Matrix ist. Die verbleibenden Singulärwerte  $w_j \neq 0$  werden durch die reziproken Werte ersetzt, um die inverse Matrix  $\mathbf{W}^{-1}$  zu bestimmen. Zuletzt wird die Pseudoinverse  $\mathbf{A}^{-1}$  berechnet (6.10), um die Lösung der kleinsten Quadrate gemäß Gleichung (6.12) zu erhalten.

#### 6.3.3 Numerische Anwendung

Wie kann die Singulärwertzerlegung und die Berechnung der Pseudoinversen genutzt werden, um Gleichungssysteme der Form  $\mathbf{A}\mathbf{x} = \mathbf{b}$  numerisch zu lösen? Analytisch ist eine Matrix entweder singulär oder regulär. Numerisch kann jedoch der Fall auftreten, dass einige der  $w_j$  sehr klein aber ungleich Null sind. Je kleiner die  $w_j$  sind, desto größer sind die reziproken Werte  $1/w_j$ , die in die Berechnung der Pseudoinversen  $\mathbf{A}^{-1}$  eingehen. Da Computer nur mit endlich vielen Stellen rechnen können, treten bei großen Zahlen unvermeidliche Rundungsfehler auf. Wird mit gerundeten Zahlen weitergerechnet, so können sich die Fehler verstärken und immer weiter anwachsen.

Um dieses Problem zu umgehen, werden alle Singulärwerte  $w_j$  unterhalb einer gewissen Schwelle  $w_{th}$  auf Null gesetzt und damit der Rang der Matrix verkleinert. Wie beim analytischen Fall werden danach die verbleibenden Singulärwerte  $w_j \neq 0$  durch die reziproken Werte ersetzt, um die Pseudoinverse  $\mathbf{A}^{-1}$  berechnen zu können. Auf den ersten Blick scheint dabei Information verloren zu gehen, die für die Lösung des Gleichungssystems von Bedeutung ist. Tatsächlich werden nur solche Linearkombinationen verworfen, die durch Rundungsfehler

## 6 Entfaltung der Energieverlustfunktion

dominiert sind. Diese Kombinationen sind für die Lösung wertlos und können einen Lösungsvektor  $\mathbf{x}$  erzeugen, der über alle Grenzen wächst. Gleichzeitig wird dabei die euklidische Norm (6.13) größer mit der Folge, dass das Ergebnis eine schlechte Näherung darstellt. Ein besseres Ergebnis erhält man also, indem alle  $w_j$  unterhalb einer bestimmten Grenze durch Null ersetzt werden. Dies führt jedoch zu einem anderen Problem: Wie soll die Grenze bestimmt werden, unterhalb derer die Singulärwerte vernachlässigt werden?

Zunächst einmal ist die Bestimmung der Schwelle von dem jeweiligen Computerprogramm abhängig, da in manchen Fällen Rundungsprobleme durch geschickte Umstellung des Codes umgangen werden können. Liegt jedoch ein hinsichtlich dieser Problematik optimiertes Programm vor, so lässt sich die Grenze für dieses spezielle Programm mit Hilfe der euklidischen Norm (6.13) festlegen: Nachdem verschiedene Lösungsvektoren  $\mathbf{x}$  für die verschiedenen Schwellwerte  $w_{th}$  berechnet worden sind, wird derjenige Schwellwert herausgesucht, welcher die euklidische Norm minimiert. Bei der Entfaltung der Energieverlustfunktion mit Hilfe der SVD ist somit kein Vorwissen über den Lösungsvektor  $\mathbf{x}$  erforderlich, welcher allein aufgrund der Werte  $\mathbf{A}$  und  $\mathbf{b}$  bestimmt wird.

### 6.3.4 Entfaltung der Energieverlustfunktion

Die konkrete Anwendung der Singulärwertzerlegung erfolgt mit der Bibliothek *svbksb* [Num02]. In Abb. 6.14 ist die Energieverlustfunktion als Ergebnis der Entfaltung dargestellt. Die Grenze, unterhalb derer alle Singulärwerte auf Null gesetzt werden, liegt bei  $w_{th}^{ref} = 2.69$ .<sup>10</sup> Berechnet wird die Schwelle mit Hilfe der euklidischen Norm gemäß Gleichung (6.13). Die entfaltete Kurve (blau) ist zum größten Teil deckungsgleich mit dem Eingangsmodell der Simulation (rot), außerdem wird die Funktion nicht durch Rauschen überlagert.

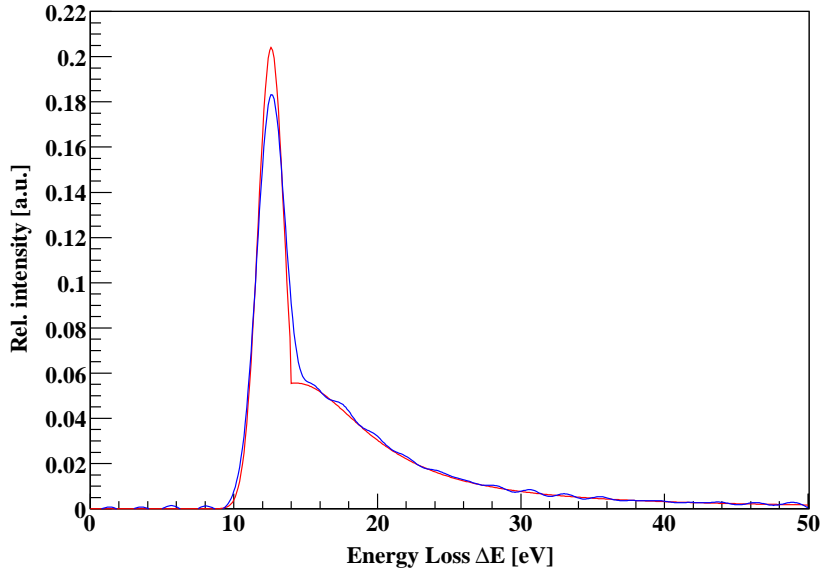
Ist der Schwellwert niedriger als der optimale Wert und liegt z.B. bei  $w_{th} = 0.95$ , so werden die Rauschterme nicht ausreichend gefiltert und gehen somit in die Lösung ein (s. Abb. 6.15 (a)). Liegt der Grenzwert oberhalb des optimalen Wertes, z.B. bei  $w_{th} = 5.39$ , wird Information gefiltert, die für die Lösung des Gleichungssystems von Bedeutung ist (s. Abb. 6.15 (b)). In Abb. 6.15 (c) ist schließlich das Ergebnis einer Simulation gezeigt, bei der nur halb so viele Elektronen starten. Der optimale Schwellwert in diesem Fall liegt bei  $w_{th} = 3.14$  und ist damit höher als der bestimmte Referenzwert  $w_{th}^{ref} = 2.69$ . Dies führt dazu, dass das Eingangsmodell der Simulation bei einer geringeren Statistik nicht so gut reproduziert wird (vgl. mit Abb. 6.14).

Insgesamt hängt das Ergebnis der Singulärwertzerlegung sehr empfindlich von der gewählten Schwelle und zusätzlich von der Anzahl der detektierten Elektronen ab.

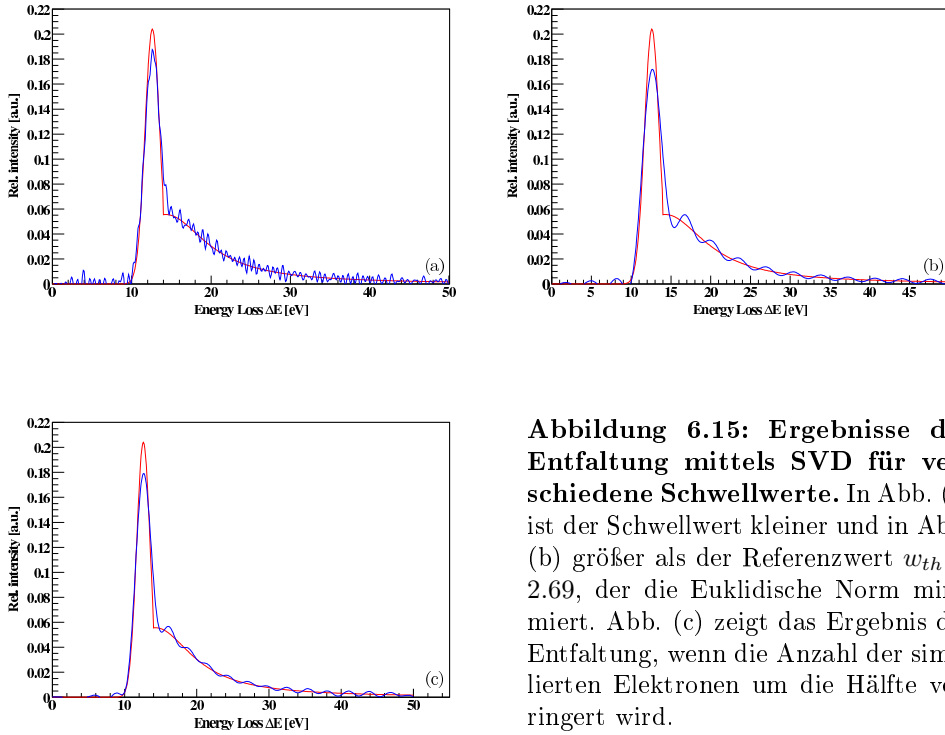
---

<sup>10</sup>Innerhalb des Simulationsprogramms *svbksb* wird die Schwelle  $w_{th}$  berechnet, indem der größte Singulärwert  $w_{max}$  mit einem Eingabewert  $x$  multipliziert wird, d.h.  $w_{th} = w_{max} \cdot x$ .





**Abbildung 6.14: Entfaltung der Energieverlustfunktion mittels Singulärwertzerlegung.** Das Diagramm zeigt das Ergebnis der Entfaltung (blau) als Funktion des Energieverlustes  $\Delta E$ . Es ist zu erkennen, dass die Form des Eingangsmodells (rot) sehr gut reproduziert wird.



**Abbildung 6.15: Ergebnisse der Entfaltung mittels SVD für verschiedene Schwellwerte.** In Abb. (a) ist der Schwellwert kleiner und in Abb. (b) größer als der Referenzwert  $w_{th} = 2.69$ , der die Euklidische Norm minimiert. Abb. (c) zeigt das Ergebnis der Entfaltung, wenn die Anzahl der simulierten Elektronen um die Hälfte verringert wird.

## 6.4 Ergebnis

In Abb. 6.16 sind noch einmal die Ergebnisse der drei Entfaltungsmethoden im direkten Vergleich zu sehen. Alle drei entfalteten Funktionen folgen der Form der analytischen Troitsker Energieverlustfunktion.

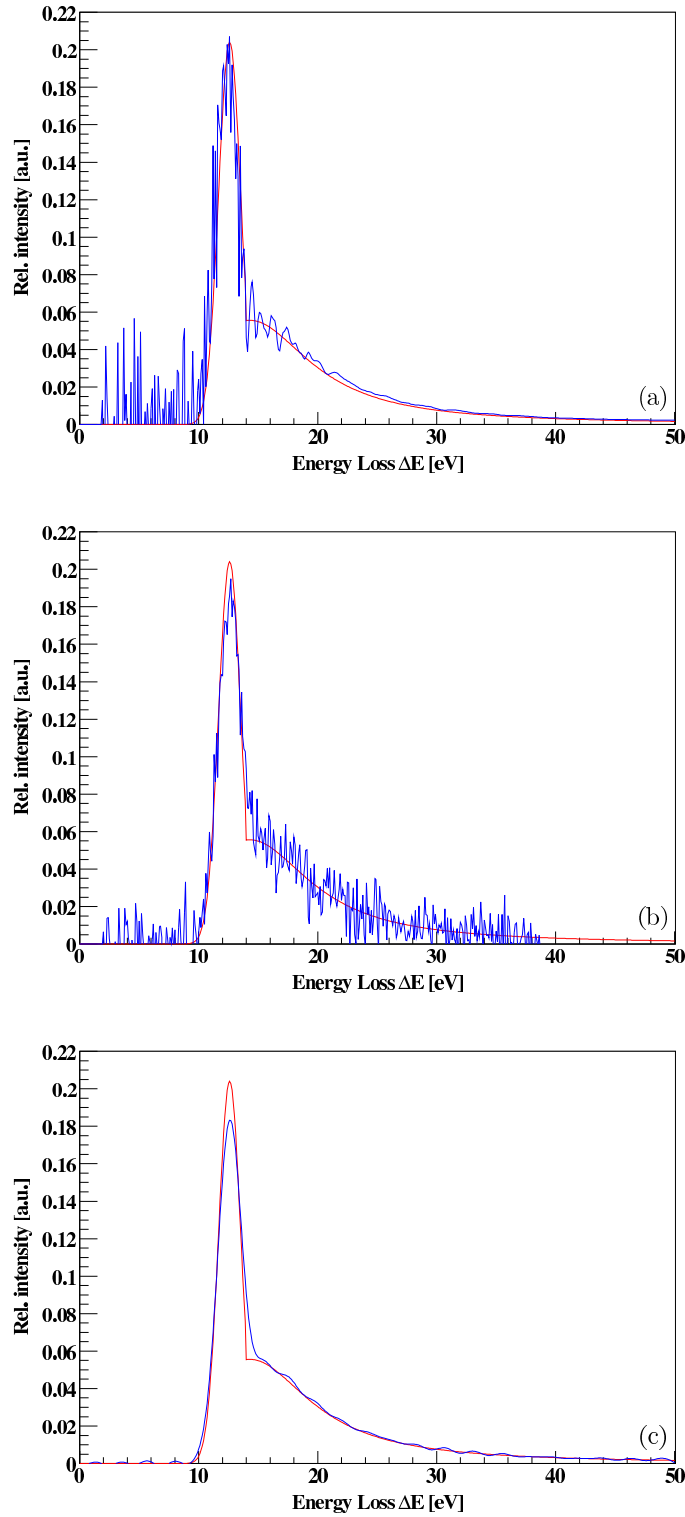
Während man mit der stufenweisen Entfaltung (6.16 (a)) und dem BiCG-Verfahren (6.16 (b)) das Rauschen innerhalb der Energieverlustfunktion nur durch eine signifikante Erhöhung der Anzahl gemessener Elektronen verringern kann, wird es bei der Singulärwertzerlegung (6.16 (c)) durch das Verfahren selbst eliminiert. Das heißt jedoch nicht, dass die Anzahl der gemessenen Elektronen für die Entfaltung mit der SVD beliebig verringert werden darf. Das stochastische Rauschen wird durch Festlegung der Schwelle  $w_{th}$  effektiv gefiltert, und der Schwellwert ist bei höherer Statistik kleiner. Das wiederum bedeutet, dass weniger Information verloren geht und die Detailtreue größer ist (vgl. Abb. 6.14 und Abb. 6.15 (c) sowie Kapitel 7).

Ein Vergleich der Methoden (a) und (b) zeigt, dass das Rauschen, abgesehen von dem gefilterten Bereich ab 14 eV in Abb. 6.16 (a), bei einer Entfaltung mit dem BiCG-Verfahren geringer ausfällt.

Zudem muss berücksichtigt werden, dass die Rauschfrequenzen zur Anpassung des digitalen Filters im Rahmen der Simulation genau bestimmt werden können, da die analytische Energieverlustfunktion als Eingangsmodell bekannt ist. Die genaue Form des Energieverlustspektrums beim KATRIN Experiment ist jedoch unbekannt, so dass der entworfene Filter bei Anwendung auf die Messdaten möglicherweise auch in den Frequenzbereich des zu messenden Energieverlustspektrums schneidet.

Im Gegensatz dazu ist bei den Methoden (b) und (c) vorab keine Information über die Form des Spektrums nötig. Da das Ergebnis bei Anwendung der Singulärwertzerlegung zudem nicht durch Rauschen gestört wird, scheint diese Methode auf den ersten Blick am besten geeignet zu sein, um die Energieverlustfunktion zu entfalten.

Es muss jedoch auch quantitativ überprüft werden, welche der drei Methoden in ihrer Genauigkeit ausreichend für das KATRIN Experiment ist. Diese Überprüfung erfolgt im nächsten Kapitel.



**Abbildung 6.16: Vergleich der drei vorgestellten Entfaltungsmethoden.** Dargestellt sind die Ergebnisse der Entfaltungen (blau) bei Anwendung der stufenweisen Entfaltung (a), des BiCG-Algorithmus (b) und der Singulärwertzerlegung (c). Zudem ist in jedem Diagramm die Troitsker Energieverlustfunktion (rot) gezeigt, die das Eingangsmodell der Simulation bildet.

## 7 Vergleich der drei Entfaltungsmethoden

In diesem Kapitel wird nach einer kurzen Beschreibung der systematischen Unsicherheiten des KATRIN Experimentes ein Programmpaket vorgestellt, mit dem überprüft werden kann, wie groß der Einfluss der drei im vorangegangenen Kapitel vorgestellten Methoden zur Entfaltung der Energieverlustfunktion auf die Messung des Neutrinomassenquadrates  $m^2(\nu_e)$  ist. Zusätzlich zur bisher beschriebenen analytischen Energieverlustfunktion des Troitsker Experimentes wird ein weiteres Modell vorgestellt, das die erwarteten Energieverluste der Elektronen in der Tritiumquelle detailliert beschreibt. Unter Verwendung dieses Modells in der Simulation der Messdaten erfolgt erneut ein Test der drei Entfaltungsmethoden und eine Analyse der Ergebnisse.

### 7.1 Systematische Unsicherheiten

Die systematischen Unsicherheiten beim KATRIN Experiment bestimmen den systematischen Fehler der Observablen  $m^2(\nu_e)$ . Von den neun wichtigsten Unsicherheiten<sup>1</sup> liefert keine einen Beitrag, der größer ist als  $\Delta m^2(\nu_e) = 0.0075 \text{ eV}^2$  [Kat04], die meisten liegen signifikant unter diesem Wert. Für die Abschätzung der totalen systematischen Unsicherheit  $\Delta m^2(\nu_e)_{\text{syst,tot}}$  werden daher fünf hauptsächliche systematische Effekte betrachtet, von denen jeder einen maximalen Beitrag von  $\Delta m^2(\nu_e) = 0.0075 \text{ eV}^2$  liefert. Aus der quadratischen Addition dieser Unsicherheiten ergibt sich ein totaler systematischer Fehler von:

$$\Delta m^2(\nu_e)_{\text{syst,tot}} \leq 0.017 \text{ eV}^2.$$

Eine der systematischen Unsicherheiten sind Energieverluste von Elektronen in der Tritiumquelle, die durch die Energieverlustfunktion  $f(\Delta E)$  beschrieben werden. In Kapitel 6 sind drei Entfaltungsmethoden vorgestellt worden, mit Hilfe derer sich die Energieverlustfunktion aus experimentellen Daten bestimmen lässt.

---

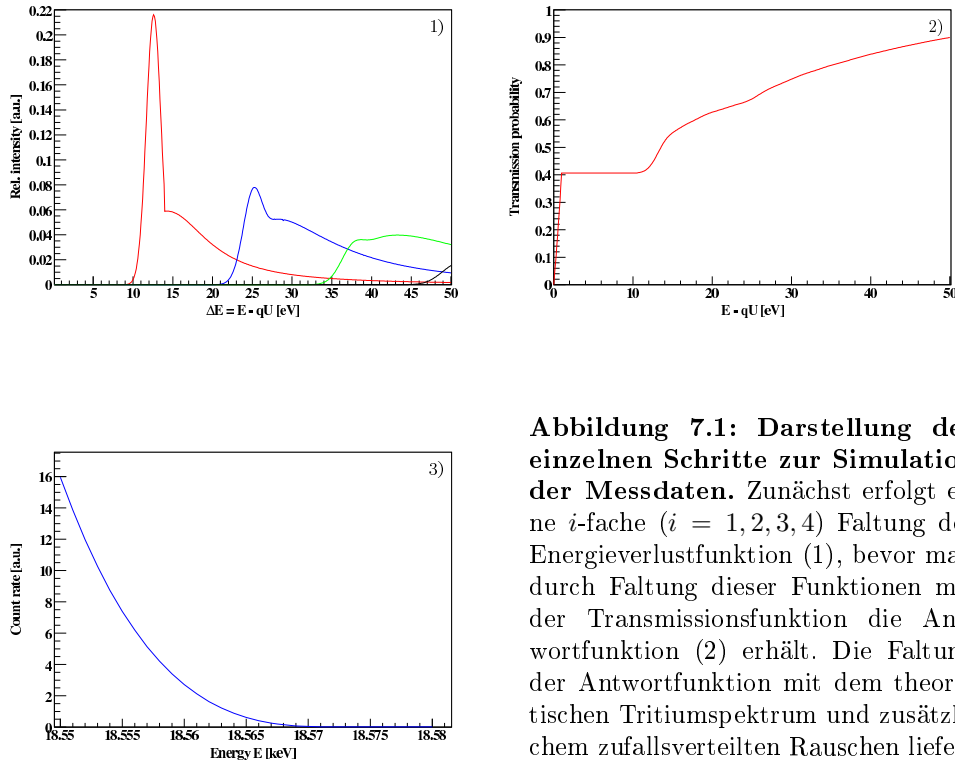
<sup>1</sup>Diese können in [Kat04] nachgelesen werden.

## 7.2 Simulation und Analyse der Messungen des KATRIN Experimentes

Um den Einfluss der entfalteten Funktionen auf die Messung des Neutrinomassenquadrates  $m^2(\nu_e)$  zu bestimmen, werden mit dem Programmpaket *eloss\_fits* [Wei08] Messdaten des KATRIN Experimentes simuliert. Mit Hilfe dieser simulierten Messungen kann dann die Größe der systematischen Unsicherheit abgeschätzt werden, die aus der unvollständigen Kenntnis der Energieverlustfunktion herrührt.

Zunächst wird die Energieverlustfunktion des Troitsker Experimentes als Histogramm eingelesen und eine  $i$ -fache ( $i = 1, 2, 3, 4$ ) Faltung dieser Funktion mit sich selbst durchgeführt. Danach wird die Antwortfunktion  $f_{\text{res}}(E, qU)$  durch  $i$ -fache ( $i = 1, 2, 3, 4$ ) Faltung der zuvor erhaltenen Funktionen mit der analytischen Transmissionsfunktion  $T(E, qU)$  bestimmt (vgl. auch Kapitel 4).

Im Anschluss daran wird der theoretische Verlauf, mit der das gemessene  $\beta$ -Spektrum beschrieben wird, durch Faltung der Antwortfunktion mit dem theoretischen Tritium- $\beta$ -Spektrum festgelegt. Da die Antwortfunktion durch die Faltung analytischer Funktionen zustande kommt, wird die theoretische Messkurve durch generierte Zufallszahlen verrauscht, so dass man auf diese Weise simulierte Messdaten erhält. Für der Simulation der Messung können verschiedene Parameter festgelegt werden, von denen einer das Neutrinomassenquadrat ist, welches o.B.d.A. auf Null gesetzt wird. Der beschriebene Weg zur Gewinnung



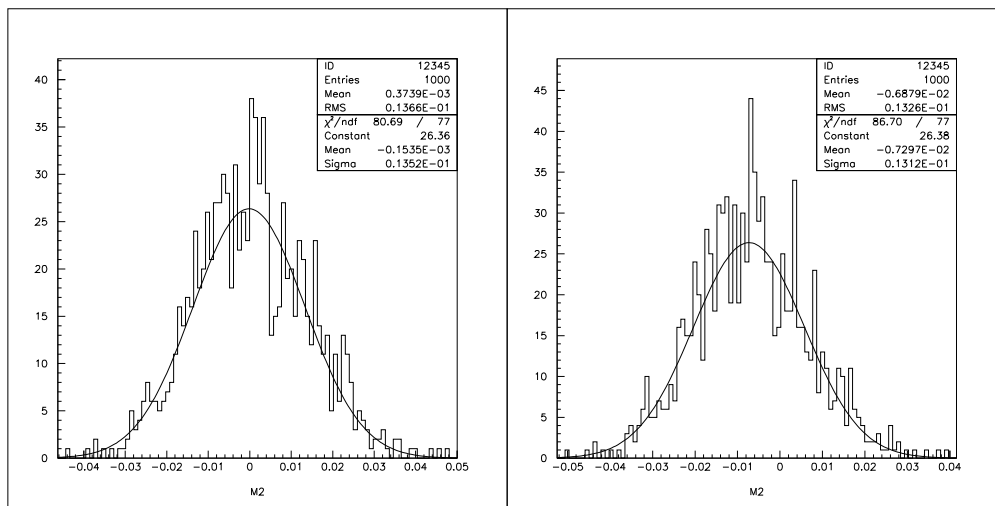
**Abbildung 7.1: Darstellung der einzelnen Schritte zur Simulation der Messdaten.** Zunächst erfolgt eine  $i$ -fache ( $i = 1, 2, 3, 4$ ) Faltung der Energieverlustfunktion (1), bevor man durch Faltung dieser Funktionen mit der Transmissionsfunktion die Antwortfunktion (2) erhält. Die Faltung der Antwortfunktion mit dem theoretischen Tritiumspektrum und zusätzlichem zufallsverteilten Rauschen liefert die simulierten Messdaten (3).

## 7 Vergleich der drei Entfaltungsmethoden

der Daten ist in Abb. 7.1 noch einmal schematisch verdeutlicht.

An die gewonnenen Messdaten werden danach bei einem Standardfit<sup>2</sup> vier freie Parameter angepasst: die Amplitude  $A$ , der konstante Untergrund  $B$ , der Endpunkt des Tritium- $\beta$ -Spektrums  $E_0$  und das Neutrinomassenquadrat  $m^2(\nu_e)$ . Es existieren noch weitere Größen<sup>3</sup>, welche für die Anpassung benötigt werden, z.B. die entfaltete Energieverlustfunktion, die vor der Durchführung des Fits eingelesen werden muss.

Ergibt sich als Ergebnis des Fits ein Neutrinomassenquadrat ungleich Null, so ist dieses Ergebnis auf den durch das hinzugefügte Rauschen resultierenden statistischen Fehler, sowie auf die durch die entfaltete Energieverlustfunktion verursachte systematische Unsicherheit zurückzuführen. Um diese Fehlerquellen zu trennen, werden insgesamt 1000 Messungen simuliert und für jede Messung das Neutrinomassenquadrat ermittelt. Auf diese Weise erhält man eine Nor-



**Abbildung 7.2: Bestimmung der systematischen Unsicherheit.** Im linken Diagramm ist die Normalverteilung der ermittelten  $m^2(\nu_e)$ -Werte dargestellt, im rechten Diagramm kann aus der Verschiebung des Erwartungswertes von Null der systematische Fehler bestimmt werden.

malverteilung der ermittelten  $m^2(\nu_e)$ -Werte und kann aus der Verschiebung des Mittelwertes von Null den Beitrag der entfalteten Energieverlustfunktion zur gesamten systematischen Unsicherheit bestimmen, da die Verschiebung aufgrund des statistischen Fehlers durch die Mittelung entfällt (vgl. Abb. 7.2).

Die innerhalb dieses Programmpakets simulierten Messprozesse werden vereinfacht erzeugt, indem der aus analytischen Funktionen gewonnene theoretische Verlauf der Messkurve mit Hilfe von Zufallszahlen verrauscht wird. Dies hat den Vorteil, dass viele Messdaten in sehr kurzer Zeit erzeugt werden und eine Bestimmung der systematischen Unsicherheiten relativ schnell möglich ist. Hierin unterscheidet sich das Programm also von der in Kapitel 5 vorgestellten

<sup>2</sup>Eine ausführliche Beschreibung des Standardfits kann in [Kra03] nachgelesen werden.

<sup>3</sup>Bei einer späteren realen Analyse müssen diese Größen berechnet, in systematischen Messungen bestimmt oder der Literatur entnommen werden.

### 7.3 Analyse der entfalteten Energieverlustfunktionen

Simulation, da bei dieser für verschiedene Retardierungsspannungen der Weg jedes einzelnen Elektrons von der Elektronenkanone zum Detektor beschrieben wird.

### 7.3 Analyse der entfalteten Energieverlustfunktionen

Nach Anwendung der in Abschnitt 7.2 beschriebenen Methode ergeben sich für die verschiedenen Entfaltungsmethoden für die systematische Unsicherheit des Neutrinomassenquadrates folgende Werte:

Stufenweise Entfaltung	$\Delta m^2(\nu_e) = 0.0771 \pm 0.0004 \text{ eV}^2$
BiCG-Verfahren	$\Delta m^2(\nu_e) = 0.0622 \pm 0.0004 \text{ eV}^2$
Singulärwertzerlegung	$\Delta m^2(\nu_e) = 0.0399 \pm 0.0004 \text{ eV}^2$

Hierbei sind innerhalb der entfalteten Funktionen alle Werte  $\Delta E \leq 9.5 \text{ eV}$  vor der Analyse auf Null gesetzt worden, da in diesem Bereich keine Energieverluste möglich sind und die systematische Unsicherheit damit verringert wird. Zusätzlich werden bei der BiCG-Methode alle Werte ab 38 eV auf Null gesetzt, um die drei Methoden quantitativ zu vergleichen.

Die Ergebnisse zeigen, dass die systematische Unsicherheit wie erwartet bei Anwendung der Singulärwertzerlegung am kleinsten ist. Außerdem liegen alle Ergebnisse noch nicht im erlaubten Unsicherheitsbereich von  $\Delta m^2(\nu_e) = 0.0075 \text{ eV}^2$ .

Da die Singulärwertzerlegung auch an simulierten Daten getestet worden ist, bei denen die Elektronenzahl um die Hälfte verringert wurde (vgl. Abschnitt 6.3.4), wird für diesen Fall ebenfalls der Beitrag zur gesamten systematischen Unsicherheit berechnet. Es ergibt sich folgender Wert:

Singulärwertzerlegung	$\Delta m^2(\nu_e) = 0.0419 \pm 0.0004 \text{ eV}^2$
-----------------------	--

Somit wird deutlich, dass der Beitrag zur gesamten systematischen Unsicherheit bei einer Verringerung der Elektronenzahl höher ist.

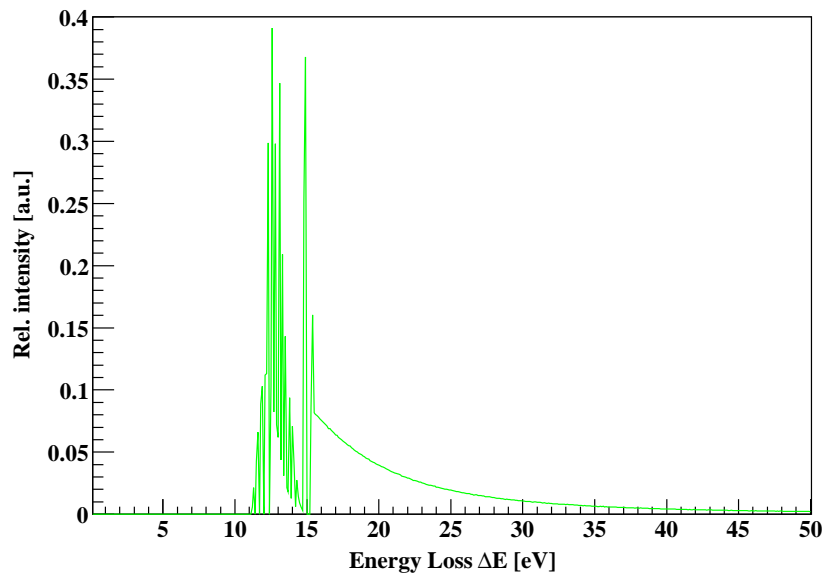
### 7.4 Alternatives Modell zur Beschreibung der Energieverluste

Das bisher verwendete Modell zur Beschreibung der Energieverluste ist eine an die Troitsker Daten angepasste Energieverlustfunktion bestehend aus einer Gauß- und einer Lorentzkurve, die nur grob die einzelnen Strukturen der Anregung und Ionisation des Tritiummoleküls wiedergeben. Im Folgenden werden die drei vorgestellten Entfaltungsmethoden noch einmal an einem detaillierteren Modell getestet und analysiert.

### 7.4.1 Beschreibung des Modells

In Abschnitt 4.2 sind alle Ionisations- und Anregungsprozesse beschrieben worden, bei denen Elektronen durch Wechselwirkungen mit Tritiummolekülen Energie verlieren können. Wie in diesem Abschnitt erwähnt, gibt es diskrete Anregungen des Moleküls bei im Mittel 12.6 eV, dissoziative Anregung bei  $\approx 15$  eV sowie eine Ionisation des Moleküls mit einer bei 15.4 eV beginnenden Ionisierungsenergie.

Das in Abb. 7.3 dargestellte Energieverlustspektrum wird mit dem Computerprogramm *scatter.c* [Glu03] erzeugt und berücksichtigt alle beschriebenen Reaktionen von Elektronen in molekularem Wasserstoff. Diskretisiert man das Anregungsspektrum mit einer Binbreite von 0.1 eV, so sind die einzelnen Energieniveaus, die aufgrund von Molekülschwingungen aufgespaltet werden, sehr gut erkennbar. Neben dem Maximum der diskreten Anregung bei 12.6 eV ist auch die dissoziative Anregung bei 15 eV sehr stark ausgeprägt. Ebenfalls in dem Energieverlustspektrum zu sehen ist das bei  $\approx 15.4$  eV beginnende Kontinuum, das die Ionisation des Moleküls widerspiegelt.



**Abbildung 7.3: Detailliertes Energieverlustspektrum.** Das Spektrum zeigt die Energieverluste von Elektronen als Funktion des Energieverlustes  $\Delta E$ . Erkennbar sind die einzelnen Energieniveaus zwischen  $\approx 11$  eV und  $\approx 15$  eV, die angeregt werden können sowie das bei 15.4 eV beginnende Kontinuum, das die Ionisation des Moleküls widerspiegelt.

### 7.4.2 Entfaltung des Energieverlustspektrums

Die Vorgehensweise zur Entfaltung des Energieverlustspektrums ist die gleiche, die in Kapitel 5 beschrieben worden ist. Der einzige Unterschied besteht darin,



## 7.4 Alternatives Modell zur Beschreibung der Energieverluste

dass die Energieverluste mit dem im vorherigen Abschnitt beschriebenen Modell simuliert werden und nicht mit der Funktion des Troitsker Experimentes. Aus diesem Grund sollten die entfalteten Funktionen die Form des Spektrums, das in Abb. 7.3 gezeigt ist, wiedergeben.

Bereits an dieser Stelle soll erwähnt werden, dass die Ergebnisse der Entfaltung aufgrund der begrenzten Energieauflösung des Spektrometers sowie der begrenzten Anzahl von  $\approx 10^6$  Elektronen, die durch die Simulation vorgegeben worden ist, nicht die einzelnen Strukturen des Modells reproduzieren können.

In Abb. 7.4 sind die Entfaltungsergebnisse unter Anwendung der stufenweisen Entfaltung (a), der BiCG-Methode (b) und der Singulärwertzerlegung (c) dargestellt. Bei der Singulärwertzerlegung beträgt der Schwellwert, unterhalb dessen alle Singulärwerte gleich Null gesetzt werden,  $w_{th} = 3.80$ .

Ein Vergleich der drei Methoden zeigt, dass die Form des Eingangsmodells (grün) in allen drei Ergebnissen (blau) wiedergegeben wird. Wie erwartet bestehen die entfalteten Funktionen im Wesentlichen aus zwei Peaks, die den Maxima der diskreten Anregung bei 12.6 eV sowie der dissoziativen Anregung bei 15 eV entsprechen.

In Abb. 7.4 (a) ist zu erkennen, dass keine Anwendung des digitalen Tiefpassfilters auf das Ergebnis der stufenweisen Entfaltung erfolgt, da dieser Filter für ein spezielles Problem, nämlich die Dämpfung der numerischen Fluktuationen (s. Abb. 6.2) entworfen worden ist. Jedoch liegt dieses Problem zum einen im betrachteten Fall nicht vor, zum anderen unterscheidet sich das Eingangsmodell von der Troitsker Energieverlustfunktion  $f(\Delta E)$ .

Vergleicht man die Methoden 7.4 (a) und 7.4 (b), so zeigt sich, dass das Rauschen bei Verwendung des BiCG-Verfahrens etwas geringer ist als bei der stufenweisen Entfaltung. Weiterhin hebt sich auch bei verändertem Eingangsmodell die Singulärwertzerlegung von den anderen beiden Verfahren ab, da bei Anwendung dieser Methode stochastische und numerische Fluktuationen unterdrückt werden.

### 7.4.3 Analyse des entfalteten Energieverlustspektrums

Für die drei Ergebnisse werden erneut die systematischen Unsicherheiten berechnet. Es ergeben sich folgende Werte:

Stufenweise Entfaltung	$\Delta m^2(\nu_e) = +0.0160 \pm 0.0004 \text{ eV}^2$
BiCG-Verfahren	$\Delta m^2(\nu_e) = -0.0179 \pm 0.0004 \text{ eV}^2$
Singulärwertzerlegung	$\Delta m^2(\nu_e) = -0.0072 \pm 0.0004 \text{ eV}^2$

Innerhalb der entfalteten Funktionen werden auch in diesem Fall alle Werte  $\Delta E \leq 9.5 \text{ eV}$  vor der Analyse auf Null gesetzt (vgl. Abschnitt 7.3).

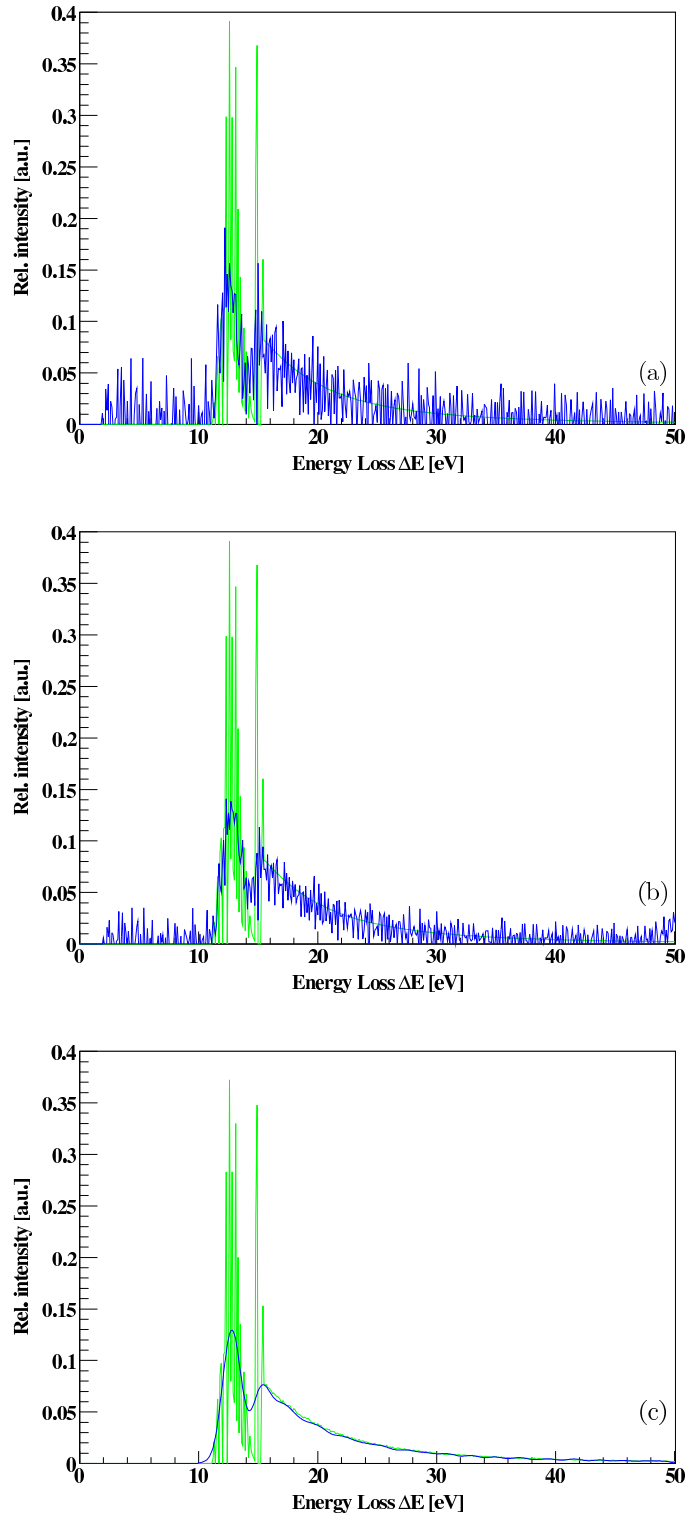
Die systematische Unsicherheit ist wie erwartet bei Anwendung der Singulärwertzerlegung am kleinsten. Die Unsicherheiten bei der Entfaltung mit dem BiCG-Verfahren und der stufenweisen Entfaltung unterscheiden sich nur minimal.

## 7.5 Ergebnis

Mit dem Programmpaket *eloss-fits*, welches im Rahmen des Mainzer Neutrinomassenexperimentes entwickelt wurde, können die entfalteten Energieverlustfunktionen quantitativ miteinander verglichen werden. Jede der drei Entfaltungsmethoden wird an zwei unterschiedlichen Energieverlustmodellen getestet, bevor die systematischen Unsicherheiten berechnet werden.

Zunächst kann festgehalten werden, dass die systematischen Unsicherheiten für alle drei Entfaltungsmethoden größer sind, wenn die analytische Energieverlustfunktion des Troitsker Experimentes als Modell für die Energieverluste verwendet wird. Tests, bei denen die Troitsker Energieverlustfunktion durch Faltung mit einer schmalen Gaußkurve ( $\sigma = 0.1$  eV) verbreitert worden ist, deuten darauf hin, dass dieses Ergebnis auf die Form der Funktion zurückzuführen ist. Der Bereich um das Maximum der schmalen Gaußkurve bei 12.6 eV sowie die Nichtdifferenzierbarkeit bei 14 eV, an der Gauß- und Lorentzkurve aufeinandertreffen, kann von der entfalteten Energieverlustfunktion nicht geeignet reproduziert werden.

Ein Vergleich der drei Entfaltungsmethoden untereinander zeigt, dass man für beide Eingangsmodelle mit der Singulärwertzerlegung das beste Ergebnis erzielt, da die systematischen Unsicherheiten am kleinsten sind. Für das Energieverlustspektrum, das die Wirkungsquerschnitte aller Ionisations- und Anregungsprozesse berücksichtigt, wird ein Wert  $\Delta m^2(\nu_e) = -0.0072 \pm 0.0004$  eV<sup>2</sup> erreicht, der gerade ausreichend für das KATRIN Experiment ist.



**Abbildung 7.4: Ergebnis der Entfaltung.** Dargestellt sind die entfalteten Funktionen (blau) nach Anwendung der stufenweisen Entfaltung (a), des BiCG-Algorithmus (b) und der Singulärwertzerlegung (c). Zusätzlich ist in jedem Diagramm das Eingangsmodell der Simulation (grün) gezeigt.

## 8 Zusammenfassung und Ausblick

### 8.1 Zusammenfassung

Seit den 1990er Jahren konnten Oszillationsexperimente zeigen, dass Neutrinos eine Masse tragen. Das KATRIN Experiment, welches sich zur Zeit im Aufbau befindet, ist in der Lage, die Neutrinomasse im sub-eV-Bereich direkt und modellunabhängig zu bestimmen. Mit Hilfe eines hochauflösenden MAC-E-Filters und der Weiterentwicklung experimenteller Technologien aus den Vorgängerexperimenten in Mainz und Troitsk wird die Endpunktregion des Tritium- $\beta$ -Spektrums präzise vermessen. Eine Neutrinomasse von  $m^2(\nu_e) = 0.35$  eV kann mit einer Signifikanz von  $5\sigma$  nachgewiesen werden; wird kein Neutrinomassensignal beobachtet, so lässt sich eine Massenobergrenze von 0.2 eV mit 90% C.L. festlegen. Um dieses Ziel zu erreichen, müssen die systematischen Unsicherheiten des Experimentes sehr klein sein.

Eine dieser systematischen Unsicherheiten sind Energieverlustprozesse von  $\beta$ -Elektronen in der Quelle, die einen Beitrag zur gesamten systematischen Unsicherheit liefern. Beschrieben werden diese durch die Energieverlustfunktion  $f(\Delta E)$ , die aus gemessenen Spektren von transmittierten Elektronen einer Elektronenkanone bestimmt werden muss.

Im Rahmen dieser Arbeit wurde zunächst ein Computerprogramm entwickelt, das den Weg jedes einzelnen Elektrons von der Elektronenkanone zum Detektor für verschiedene Retardierungsspannungen simuliert. Mit dieser Simulation konnte gezeigt werden, dass die Einfachstreuungsfunktion  $\varepsilon_1(\Delta E)$ , welche die Grundlage zur Entfaltung der Energieverlustfunktion  $f(\Delta E)$  bildet, über experimentelle Messungen bestimmt werden kann. Dazu werden mit einer Elektronenkanone Testmessungen für verschiedene Säulendichten  $\rho d$  in der WGTS durchgeführt, mit Hilfe derer ein lineares Gleichungssystem aufgestellt und mittels Matrixinversion gelöst werden kann.

Um optimale Werte für die Säulendichten der Testmessungen festzulegen, wurde die Determinante der aufgestellten Gleichungssysteme berechnet. Das beste Ergebnis erhält man für Säulendichten  $\rho d = j \cdot 10^{-17} \text{ cm}^{-2}$  mit  $j = 1, 3, 5$ , welche Referenzwerte für die späteren tatsächlichen Messungen darstellen.

Weiterhin wurden drei verschiedene Methoden vorgestellt, mit denen die Energieverlustfunktion unter realistischen Bedingungen mit einer Schrittweite der Retardierungsspannung von 0.1 eV entfaltet werden kann. Die Methoden wurden mit Hilfe von zwei verschiedenen und unterschiedlich detaillierten Energieverlustmodellen getestet, die beide als Modell für die Energieverluste der Elektronen innerhalb der Simulation herangezogen wurden.

Mit dem bereits existierenden Programmpaket aus dem Mainzer Experiment konnte der Einfluss der entfalteten Funktionen auf die gesamte systematische Unsicherheit des KATRIN Experimentes bestimmt werden. Das beste Ergebnis erhält man unabhängig von dem in der Simulation verwendeten Energieverlustmodell bei Anwendung der Singulärwertzerlegung.

Bei Verwendung des Modells, das nach bisheriger Kenntnis die Energieverluste am besten wiedergibt [Glu03], liegt der Beitrag der systematischen Unsicherheit der entfalteten Funktion auf das Neutrinomassenquadrat bei  $\Delta m^2(\nu_e) = -0.0072 \pm 0.0004 \text{ eV}^2$  und ist damit gerade ausreichend für das KATRIN Experiment.

Bei dem stark vereinfachten Energieverlustmodell bestehend aus einer Gauß- und einer Lorentzkurve mit jeweils zwei freien Parametern, das an die Messdaten des Troitsker Experimentes angepasst wurde, ist der Wert der systematischen Unsicherheit etwas höher. Dies liegt vermutlich an der Form der Kurve, die von der entfalteten Energieverlustfunktion nicht reproduziert werden kann.

Insgesamt konnte in dieser Arbeit gezeigt werden, dass auch für ein breites Energiespektrum der Elektronenkanone und ohne eine Winkelselektion ein ausreichendes Ergebnis erzielt werden konnte. Durch Erhöhung der Elektronenrate sowie einer schärferen Energieverteilung durch zusätzliche Winkelselektion kann das Entfaltungsergebnis vermutlich noch weiter verbessert werden.

## 8.2 Ausblick

Im Rahmen dieser Arbeit wurde eine Entfaltungsmethode beschrieben und getestet, mit Hilfe derer sich die Energieverlustfunktion  $f(\Delta E)$  der Elektronen im KATRIN Experiment aus Messungen der Transmissionsspektren von monoenergetischen Elektronen bestimmen lässt. Die auf diesem Wege gewonnene Energieverlustfunktion liefert einen Beitrag zum systematischen Fehler des Experimentes, der mit den KATRIN Anforderungen verträglich ist.

In der Zukunft sollte das verwendete Simulationsprogramm weiterentwickelt werden, da einige Parameter und experimentelle Gegebenheiten zum Zeitpunkt dieser Arbeit noch nicht bekannt waren, wie z.B. das Design der Elektronenkanone. Sobald dieses feststeht, können die Energie- und Winkelverteilung in der Simulation an die experimentellen Vorgaben angepasst werden.

Weiterhin kann die Verteilung der Säulendichte in der Tritiumquelle präzisiert werden, da eine homogene Verteilung der Tritiummoleküle innerhalb der WGTS in die Simulation einging und diese Annahme nur näherungsweise erfüllt ist.

Um den Beitrag der entfalteten Energieverlustfunktion zur gesamten systematischen Unsicherheit weiter zu minimieren, sollte die Zahl der Elektronen in der Simulation erhöht werden. Da die Elektronenzahl von experimentellen Gegebenheiten wie z.B. der Elektronenkanone abhängig ist, müssen diese Gegebenheiten bei der Simulation berücksichtigt werden. Die Elektronenkanone, die für die Kalibrationsmessungen verwendet werden soll, wird am MIT entwickelt. Sie beruht auf dem Prinzip einer Penningfalle, in der durch Einstrahlung von Radiofrequenzsignalen verschiedene scharfe Energiezustände der Elektronen präpariert

## 8 Zusammenfassung und Ausblick

werden können. Somit ist eine Winkelselektion möglich und insgesamt mehr Information vorhanden als in der vorliegenden Arbeit berücksichtigt wurde. Ob dieses neuartige Konzept der Elektronenkanone erfolgreich sein wird, ist zum jetzigen Zeitpunkt noch nicht abzusehen.

In einem alternativen Konzept für eine Elektronenkanone wird UV-Licht einer LED auf die Rückseite eines dünnen Metallfilms geleitet und löst dort Sekundärelektronen aus. Auch hier könnte eine Winkelselektion zusätzlich erfolgen, indem die Photoemission nur von sehr kleinen Flächen einer Kugeloberfläche bei verschiedenen Radien geschieht. Die Richtung des elektrischen Feldes relativ zum Magnetfeld hängt empfindlich von diesem Emissionsort ab und definiert den transversalen Energieanteil beim Start der Elektronen. Erste Tests mit mehreren durch Lichtfasern definierten Photoemissionspunkten sind vielversprechend. Die begonnenen Untersuchungen deuten außerdem darauf hin, dass mit diesem Prinzip die Elektronenrate bis in den am Detektor noch nachweisbaren Bereich optimiert werden kann [Val08] , [Hei09].

Um den Zeitaufwand für die Kalibrationsmessungen beim KATRIN Experiment zu begrenzen, besteht die Möglichkeit, die Anzahl der startenden Elektronen für die einzelnen Retardierungsschritte zu verbessern. Zusätzlich sollte überprüft werden, ob die Schrittweite der Retardierungsspannungen im Bereich unterhalb von 10 eV sowie in dem Ionisationsbereich ab 15.4 eV vergrößert werden kann, ohne dass dabei Information verloren geht.

Im Weiteren sollten Vibrations- und Rotationsanregungen von Tritiummolekülen im Bereich  $\Delta E \lesssim 2$  eV des Energieverlustspektrums näher betrachtet werden. Diese wurden aufgrund ihrer kleinen Wirkungsquerschnitte, die mit zunehmender Elektronenenergie abnehmen, für 18.6 keV-Elektronen im Mainzer und Troitsker Experiment sowie in der vorliegenden Simulation vernachlässigt.

Es gibt somit mehrere Möglichkeiten, die Simulation des systematischen Messprozesses der Energieverlustfunktion auf der Grundlage dieser Arbeit zu präzisieren.

# A Anwendung der Simulations- und Analyseprogramme

## A.1 Simulationsprogramm

Mit dem Programm *energy.cpp* wird der Weg eines einzelnen Elektrons von der Elektronenkanone zum Detektor simuliert. Zu Beginn muss die Anzahl der startenden Elektronen *Ntot* sowie die Säulendichte *rho\_d* festgelegt werden. Ebenfalls müssen die zwei Dateinamen bestimmt werden, in welche die Antwortfunktion sowie die Streuwahrscheinlichkeiten geschrieben werden. Der Bereich für die Startwinkel *t\_min* und *t\_max* sowie die Winkeländerung *b\_min* und *b\_max* nach einem Stoß, die bisher unabhängig vom Energieverlust gewürfelt wird, muss ebenfalls festgelegt werden<sup>1</sup>. Die Energie der Elektronen *E0* wird gaußverteilt gewürfelt, Erwartungswert und Standardabweichung müssen zuvor festgelegt werden.

Zunächst wird der Winkel beim Eintritt in die WGTS überprüft, bevor die Energieverluste unter Verwendung der Troitsker Energieverlustfunktion mit Hilfe des von Neumann-Verfahrens bestimmt werden. Nach Verlassen der Quelle erfolgt eine erneute Winkelüberprüfung und gleichzeitig wird die Energieanalyse durchgeführt. Die adiabatische Transformation nach Verlassen der WGTS ist bereits programmiert, während die adiabatische Transformation vor dem Eintritt in die Quelle noch in das Programm eingefügt werden muss.

Das Simulationsprogramm greift auf ROOT-Bibliotheken zurück, die zuvor eingebunden werden müssen.

Das Programm *energy\_cs.cpp* unterscheidet sich hinsichtlich der Bestimmung der Energieverluste, die mit der Routine *scatter.c* bestimmt werden. Der Rest des Programms ist identisch mit *energy.cpp*.

## A.2 Matrixinversion

Mit dem Macro *MatrixInv.C* erhält man als Lösung des aufgestellten Gleichungssystems die Einfachstreu-, Zweifachstreu- und Dreifachstreufunction. Eingelassen werden die Antwortfunktionen sowie die Streuwahrscheinlichkeiten, die man als Ergebnis des Simulationsprogramms erhält. Zum jetzigen Zeitpunkt müssen die Antwortfunktionen bereits normiert sein, und die experimentelle

---

<sup>1</sup>Änderungsvorschlag: Anzahl der Elektronen, Säulendichte und Dateinamen sollten dem Programm zu Beginn als Parameter übergeben werden.

Transmissionsfunktion multipliziert mit der Streuwahrscheinlichkeit  $P_0$  muss zuvor subtrahiert werden (s. Gleichung 5.10).  $P_0$  erhält man, indem ein Mittelwert aus den Werten gebildet wird, die das Plateau der jeweiligen Antwortfunktion definieren.

### A.3 Stufenweise Entfaltung und Digitaler Filter

Das Programm *falteps1.c* wird benutzt, um die stufenweise Entfaltung durchzuführen. Verwendet werden die analytische Energieverlust- und Transmissionsfunktion. Um eine Entfaltung mit simulierten Daten durchzuführen, muss die Routine abgeändert oder das Programm *x* verwendet werden (s. Abschnitt A.5).

Der in Abschnitt 6.1.2.2 beschriebene Filter wird mit dem Programm *digfilter.cpp* auf die ungefilterten Daten angewendet, die man als Ergebnis der stufenweisen Entfaltung erhält. Vor dem Start des Programms müssen die Abtastrate  $fs$  (reziproker Wert der Binbreite) sowie die Anzahl der Datenpunkte  $N$  festgesetzt werden. Weiterhin müssen die Filterordnung  $Norder$  sowie die Abschneidefrequenz  $fc$  eingegeben werden. Einzelheiten zum Skalierungsfaktor  $sff$  können in [Hol08] nachgelesen werden.

### A.4 BiCG-Methode

Die Anwendung der BiCG-Methode erfolgt mit dem Programm *linb.cpp*. Eingelesen werden die Einfachstreuungsfunktion und die Transmissionsfunktion, beide als Spaltenvektor! Weiterhin müssen die Anzahl der Datenpunkte  $NP$  sowie die Anzahl der Iterationsschritte  $ITMAX$  eingegeben werden. Einzelheiten zu den Werten  $ITOL$  und  $DP\ TOL$ , die ebenfalls vor dem Start des Programms bestimmt werden müssen, können in [Num02] nachgelesen werden. Die zugehörigen Bibliotheken aus den Numerical Recipes müssen eingebunden werden.

### A.5 Singulärwertzerlegung

Mit dem Programm *svd\_analysis.cpp* erfolgt die Anwendung der Singulärwertzerlegung. Folgende Parameter müssen dem Programm übergeben werden: Die Transmissionsfunktion, die Einfachstreuungsfunktion und der Schwellwert. Im weiteren Verlauf des Programms kann man auswählen, ob die stufenweise Entfaltung oder die Singulärwertzerlegung durchgeführt werden soll. Weiterhin gibt es einen graphisch hervorgehobenen Teil, der die euklidische Norm berechnet. Die zugehörigen Bibliotheken aus den Numerical Recipes müssen eingebunden werden.



## A.6 Analyseprogramm

Eine ausführliche Beschreibung des Programmpakets *eloss\_fits* erfolgt in Abschnitt 7.2. An dieser Stelle wird nur die Reihenfolge der anzuwendenden Befehle erläutert.

Durch Ausführen des Programms *calc\_eloss\_from\_table* wird zunächst die Energieverlustfunktion als Histogramm eingelesen, die als Modell für die simulierten Daten dient (Troistker Energieverlustfunktion oder Histogramm, das mit *scatter.c* erzeugt wird). Danach muss der Befehl *makefitgaseous.sh* eingegeben werden, um die Energieverlustfunktion und andere Daten in die zugehörigen Headerdateien zu schreiben. Mit *mc.sh* werden im Anschluss 1000 Monte-Carlo-Simulationen erzeugt.

Für die Analyse muss mit *calc\_eloss\_from\_table* die entfaltete Energieverlustfunktion eingelesen werden, bevor erneut *makefitgaseous.sh* ausgeführt wird. Zuletzt erfolgt die Analyse der Daten mit *fit.sh*.

Das Ergebnis erhält man, wenn nach einem Wechsel in den Ordner *data* der Befehl *extract\_m2\_1000.script* eingegeben wird.

# Literaturverzeichnis

- [Arn03] C. Arnaboldi et al., Phys. Rev. Lett. **91** (2003) 16802
- [Ase00] V.N. Aseev et al., Eur. Phys. J. D **10** (2000) 39
- [Ahm03] S.N. Ahmed et al., nucl-ex/0309004 (2003)
- [Ash04] Y. Ashie et al., hep-ex/0404034
- [Bar06] R. Barrett et al., Templates for the Solution of Linear Systems: Building Blocks for Iterative Methods, 2nd Edition, SIAM, Philadelphia 1994  
*[http : //www.netlib.org/linalg/html \\_templates/Templates.html](http://www.netlib.org/linalg/html_templates/Templates.html)*
- [Bea80] G. Beamson et al., J. Phys. Sci. Instrum. Vol. 13 (1980) 64
- [Boe92] F. Boehm, P. Vogel, Physics of Massive Neutrinos, 2nd edition, Cambridge University Press 1992
- [But03] T. Butz, Fouriertransformation für Fußgänger, 3. Auflage, Teubner, Wiesbaden 2003
- [Cha14] J. Chadwick, Verh. d. Deutsch. Phys. Ges. **16** (1914) 383
- [Dan62] G. Danby et al., Phys. Rev. Lett. **9** (1962) 36
- [Dav94] R. Davis, Prog. Part. Nucl. Phys. **32** (1994) 13; Proc. 13th Intern. Conf. on Neutrino Physics and Astrophysics, Boston, USA, 1988, p. 518, Eds. J. Schneps et al., World Scientific, 1989
- [Ell04] S.R. Elliot, J. Engel, J. Phys. G.: Nucl. Part. Phys. **30** (2004) R183
- [Fer34] E. Fermi, Z. Phys. **88** (1934) 161
- [Fle76] R. Fletcher, Numerical Analysis Dundee, ed. G. Watson (1975), Vol 506 of Lecture Notes in Mathematics, Springer-Verlag, Berlin 1976
- [Gei64] J. Geiger, Z. Physik **181**(1964) 413
- [Glu03] F. Glückl, Vortrag, 4. KATRIN Kollaborationsmeeting (2003)
- [Gold65] D.E. Golden, H.W. Bandel, Phys Rev Lett. **14** (1965) 1010
- [Gol65] G. Golub, W. Kahan, J. SIAM Numer. Anal. Ser. B, Vol 2, No. 2 (1965) 205
- [Gre60] T.N.E Greville, SIAM Rev., Vol. 2, No. 1 (1960) 15

- [Han03] S. Hannestad, astro-ph/0303076 v1 (2003)
- [Han06] S. Hannestad, astro-ph/0607101 v1 (2006)
- [Hei09] H. Hein, Diplomarbeit, Institut für Kernphysik, Universität Münster (voraussichtlich 2009)
- [Hes52] R. Hestenes, E. Stiefel, J. Res. Nat. Bur. Stand., 49 (1952) 409
- [Hol08] S. Hollos, R. Hollos, [http : //www.exstrom.com/journal/sigproc/index.html](http://www.exstrom.com/journal/sigproc/index.html)
- [Kat04] KATRIN Collaboration, KATRIN Design Report 2004, Wissenschaftliche Berichte, FZKA 7090
- [Kau02] W. Kaufmann, Phys. Zeitschr. 4 (1902) 54
- [Kla01] H. V. Klapdor-Kleingrothaus et al., Eur. Phys. J. A 12 (2001) 147
- [Kla04] H. V. Klapdor-Kleingrothaus et al., Phys Lett. **B586** (2004) 198
- [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 et al., Eur. Phys. J. C 40 (2005) 447
- [Lan52] C. Lanczos, J. Res. Nat. Bur. Stand., 49 (1952) 33
- [Liu72] J.W.Liu, Phys Rev A 7 (1973) 103
- [Lob85] V.M. Lobashev, Nucl. Inst. and Meth. A240 (1985) 305
- [Lob03] V.M. Lobashev, Proc. zu 17. International Nuclear Physics in Astrophysics, Debrecen 2002, Nucl. Phys. **A719** (2003) 153c - 160c
- [Num02] W. H. Press et al., Numerical Recipes in C++. The Art of Scientific Computing.: The Art of Scientific Computing, 2nd edition, Cambridge University Press, Cambridge 2002
- [Ohm02] J.-R. Ohm, H.D. Lüke, Signalübertragung, 8. neu bearb. Aufl., Springer, Berlin 2002
- [Osi01] A. Osipowicz et al., hep-ex/0109033 (2001)
- [Pau30] W. Pauli, Brief an die Physikalische Gesellschaft in Tübingen vom 04.12.1930, nachzulesen in L.M. Brown, Phys. Toady 31 (1978) 23
- [Pic92] A. Picard et al., Nucl. Inst. Meth. B63 (1992) 345
- [Rei59] R. Reines and C. L. Cowan, Phys. Rev. 113 (1959) 273
- [Rut08] E. Rutherford and H. Geiger, Proc. Roy. Soc. **A81** (1908) 162
- [Rut14] E. Rutherford and E. N. da C. Andrade, Phil. Mag. 27 (1914) 854

## *Literaturverzeichnis*

- [Saa96] Y. Saad, Iterative methods for sparse linear systems, 1st edition, PWS, Boston 1996  
*[http : //www – users.cs.umn.edu/ ∼ saad/PS/](http://www-users.cs.umn.edu/~saad/PS/)*
- [Sch97] N. Schmitz, Neutrinophysik, Teubner, Stuttgart 1997
- [Spe03] D. N. Spergel et al. (WMAP), astro-ph/0302209 (2003)
- [Ste03] M. Steidl, Vortrag, 4. KATRIN Kollaborationsmeeting (2003)
- [Thu07] T. Thuemmler, Dissertation, Institut für Kernphysik, Universität Münster (2007)
- [Tie02] U. Tietze, Ch. Schenk, Halbleiterschaltungstechnik, 12. Auflage, Springer, Berlin 2002
- [Uls72] R.C. Ulsh et al., J. Chem. Phys. **60**, No.1 (1974) 103
- [Wei08] Ch. Weinheimer, Private Diskussion (2008)
- [Wer06] M. Werner, Digitale Signalverarbeitung mit MATLAB, 3. Auflage, Vieweg, Wiesbaden 2006
- [Val04] K. Valerius, Diplomarbeit, Helmholtz-Inst. für Strahlen- und Kernphysik, Universität Bonn (2004)
- [Val08] K. Valerius, Dissertation, Institut für Kernphysik, Universität Münster (voraussichtlich 2008)
- [Vro69] D.A. Vroom, F.J. de Heer, J. Chem. Phys. **50** (1969) 580

# Danksagung

An dieser Stelle möchte ich allen, die zur Entstehung dieser Arbeit beigetragen haben, herzlich danken.

Mein besonderer Dank gilt Prof. Dr. Christian Weinheimer für die Übertragung dieser interessanten und anspruchsvollen Aufgabe sowie die kontinuierliche Unterstützung meiner Arbeit.

Priv.-Doz. Dr. Alfons Khoukaz möchte ich für die Übernahme der Zweitkorrektur dieser Diplomarbeit danken.

Dr. Volker Hannen danke ich für seine Unterstützung und durchgängige Betreuung sowie die Hilfestellung bei aufgetretenen Problemen. Des Weiteren danke ich ihm für die Korrektur meiner Simulations- und Analyseprogramme sowie die Durchsicht der vorliegenden Arbeit. Bei Kathrin Valerius möchte ich mich für die Betreuung besonders zu Beginn meiner Diplomarbeit, die Durchsicht von Teilen dieser Arbeit sowie ihre "Last-Minute-Notfallhilfe" bedanken.

Allen jetzigen und früheren Mitgliedern meiner Arbeitsgruppe danke ich für das angenehme Arbeitsklima. In diesem Zusammenhang möchte ich besonders Alex, Karen, Kathrin und Michael danken, die für zahlreiche Ablenkungen, aber auch viele hilfreiche Gespräche und Diskussionen im Büro zuständig waren.

Ich bedanke mich ebenfalls herzlich bei meiner Familie, Freunden und Verwandten, die Interesse an meinem Studium und meiner Arbeit zeigten, auch wenn persönliche Treffen und Telefongespräche immer seltener wurden.

Mein größter Dank gilt Clemens, der mich während meines gesamten Studiums unterstützt und immer wieder von neuem motiviert hat.