



TECHNISCHE  
UNIVERSITÄT  
WIEN  
Vienna University of Technology

DIPLOMARBEIT

# Optimierung und Charakterisierung eines PERKEO III Detektors zur Elektronen-Energie-Spektroskopie

ausgeführt am Atominstitut  
der Technischen Universität Wien

unter der Anleitung von  
**Univ. Prof. Dipl.-Phys. Dr.rer.nat. Hartmut Abele**

durch  
**Martin Moser**  
aus Hochstraß

Wien, September 2013

Martin Moser

# Kurzfassung

Das freie Neutron zerfällt auf Grund der schwachen Wechselwirkung über den Betazerfall in ein Proton, ein Elektron und ein Elektron-Antineutrino. Über die Winkelkorrelationen dieser Teilchen ist es möglich, die Gültigkeit des Standardmodells der Teilchenphysik zu überprüfen bzw. zu erweitern.

Das neue Instrument PERC ermöglicht es, die Korrelationskoeffizienten zwischen dem Neutronenspin und den Impulsen der Zerfallsprodukte in noch nie dagewesener Präzision zu messen; da z.B. die Zerfallsrate bei maximal  $8 \cdot 10^6$  liegen wird. Das zum Einsatz kommende Elektronenspektrometer basiert auf dem in den Arbeitsgruppen von Prof. Abele und Prof. Dubbers an der Universität Heidelberg entwickelte und von unserer Arbeitsgruppe am Atominstitut der Technischen Universität Wien, zur Erhöhung der Effizienz, adaptierte Spektrometer PERKEO III.

In Wien wird einer der Detektoren von PERKEO III charakterisiert und dessen für die Elektronenspektroskopie relevanten Systematiken untersucht. Das Ziel ist Elektronenspektroskopie auf dem  $10^{-4}$  Niveau. Die Energiedetektion erfolgt dabei über Szintillatoren mit Photomultiplierauslese, auf denen besonderes Augenmerk liegt: Auf Grund ihrer kurzen Auslesezeit und hohen Zeitauflösung ist es möglich, bei besonders hohen Zählraten zu arbeiten, was gerade für PERC von großer Bedeutung ist.

Ergänzend zu den direkten Stabilitätstests mit Eichquellen werden auch Monte Carlo Berechnungen durchgeführt, die sowohl das Rückstreuverhalten sowie die Elektronenabsorption des Szintillationsmaterials untersuchen. Diese Simulationen werden mittels der Simulationssoftware CASINO und pyPENLOPE durchgeführt.

# Inhaltsverzeichnis

<b>1</b>	<b>Einleitung und Theoretische Grundlagen</b>	<b>1</b>
1.1	Der Beta-Zerfall . . . . .	2
1.2	Die Schwache Wechselwirkung . . . . .	5
1.2.1	Strom-Strom-Wechselwirkung . . . . .	5
1.2.2	V-A Theorie . . . . .	6
1.2.3	CKM-Matrix . . . . .	7
1.3	Der Beta-Zerfall des freien Neutrons . . . . .	8
1.4	Korrelationskoeffizienten im Neutronenzerfall . . . . .	9
1.5	Test des Standardmodells . . . . .	10
<b>2</b>	<b>PERKEO III</b>	<b>13</b>
2.1	Funktion und Aufbau . . . . .	13
2.1.1	Experimentelle Bestimmung der $\beta$ -Asymmetrie $A$ . . . . .	16
2.2	Teilchentransport im Magnetfeld . . . . .	16
2.2.1	Das Magnetfeld von PERKEO III . . . . .	17
2.2.2	Adiabatischer Teilchentransport . . . . .	18
2.2.3	Magnetischer Spiegeleffekt . . . . .	20
2.2.4	Abhängigkeit des Polarwinkels vom Magnetfeld . . . . .	21
2.3	Vakuum- und Detektorsystem . . . . .	23
2.3.1	Vakuumkammer . . . . .	23
2.3.2	Detektor . . . . .	25
2.4	Kalibrierung . . . . .	26
2.4.1	Kalibrierquellen . . . . .	26
2.4.2	Gyration der Elektronen im Magnetfeld . . . . .	27
2.4.3	Probenposition . . . . .	28
2.5	Verbesserung des Messsystems . . . . .	29

2.5.1	Detektor . . . . .	29
2.5.2	Probenhalter . . . . .	32
2.5.3	Ausblick . . . . .	36
2.6	Messergebnisse . . . . .	36
<b>3</b>	<b>Rückstreusimulationen mit Monte Carlo Methoden</b>	<b>41</b>
3.1	Motivation und Grundlagen . . . . .	41
3.2	CASINO . . . . .	42
3.2.1	Modellbildung . . . . .	44
3.2.2	Wahl der Parameter . . . . .	44
3.2.3	Simulationsergebnisse . . . . .	45
3.2.4	Résumé . . . . .	53
3.3	pyPENELOPE . . . . .	53
3.3.1	Physikalische Grundlagen . . . . .	54
3.3.2	Modellbildung . . . . .	55
3.3.3	Wahl der Parameter . . . . .	55
3.3.4	Simulationsergebnisse . . . . .	56
3.3.5	Résumé . . . . .	61
3.4	Vergleich der Simulationsergebnisse . . . . .	62
<b>4</b>	<b>Energieverteilung am Detektor</b>	<b>67</b>
4.1	Rückstreuung am Detektor . . . . .	67
4.2	Energiespektrum der rückgestreuten Elektronen . . . . .	71
<b>5</b>	<b>Zusammenfassung und Ausblick</b>	<b>75</b>
<b>A</b>	<b>Anhang</b>	<b>77</b>
	<b>Literaturverzeichnis</b>	<b>85</b>

# Kapitel 1

## Einleitung und Theoretische Grundlagen

„Liebe Radioaktive Damen und Herren!“

... ist die Einleitung einer der wichtigsten Briefe für jeden Neutronenphysiker [1]. Ein Brief von Wolfgang Pauli an das Physikalische Institut der Eidgenössisch Technischen Hochschule Zürich, in dem er das erste Mal die Idee für die noch heute gültige theoretische Beschreibung des  $\beta$ -Zerfalls gibt.

Noch Anfang des letzten Jahrhunderts ging man von der Vorstellung aus, dass der Atomkern aus positiv geladenen Protonen und negativ geladenen Elektronen aufgebaut ist, wie es das Thomsonmodell beschreibt. Jedoch konnte Chadwick 1914 mit einem magnetischen Spektrometer zeigen, dass  $\beta$ -Strahlung im Vergleich zu  $\gamma$ -Strahlung kein diskretes, sondern ein kontinuierliches Energiespektrum aufzeigt [2]. Dies stand jedoch im Konflikt mit der Energieerhaltung, die Wolfgang Pauli trotz aller Anzeichen nicht bereit war aufzugeben.

Den einzigen, wenn auch seiner Ansicht nach verzweifelten Ausweg sah Pauli in der Einführung eines neuen Teilchens, welches er zum damaligen Zeitpunkt noch Neutron (heute Neutrino!) nannte und welchem er den Spin  $1/2$  zuordnete. Damit war die Beschreibung mittels eines kontinuierlichen Spektrums problemlos möglich, solange nur die Summe der Energien von Elektron und Neutron (heute Neutrino) konstant bleibt.

Endgültig setzte sich das heutige Bild des Atomaufbaus erst 1932 durch, nachdem es Chadwick gelungen war, das (heutige) Neutron nachzuweisen und zu zeigen, dass das Elektron erst durch den  $\beta$ -Zerfall im Atomkern erzeugt

wird [3]. Damit konnte Enrico Fermi 1934 den  $\beta$ -Zerfall quantenmechanisch beschreiben [4].

Im Jahr 1957 veröffentlichte J. D. Jackson weiterführende Berechnungen, in denen er, ausgehend von *Fermis Goldener Regel*, eine formale Beschreibung (Gleichung (1.9)) des  $\beta$ -Zerfalls formulierte [5]. Darin führt er Winkelkorrelationskoeffizienten zwischen den Zerfallsprodukten ein, die in Zerfallsexperimenten messbar sind. Der Winkelkorrelationskoeffizient  $A$ , wie er näher in Kapitel 1.4 beschrieben wird, eignet sich auf Grund seiner stärksten Abhängigkeit vom Verhältnis zwischen Vektor- zu Axialvektorstrom, zusammen mit anderen Parametern, wie in Kapitel 1.5 gezeigt, besonders gut zur Überprüfung des Standardmodells.

Das derzeit beste Instrument zur Bestimmung dieses Koeffizienten ist das auf der Universität Heidelberg entwickelte Elektronen-Energie-Spektrometer PERKEO III [6]. Mit ihm wird die Energieverteilung beim Zerfall des freien Neutrons gemessen. Die Besonderheit von PERKEO III liegt in dem im Vergleich zu früheren Spektrometern großen Zerfallsvolumen von etwa 2 m Länge. Mit dem neuen Instrument PERC (Proton and Electron Radiation Channel) wird es auf Grund der hohen Zerfallsrate von  $8 \cdot 10^6$  Neutronen pro Sekunde möglich sein, die Winkelkorrelationskoeffizienten im Neutronenzerfall mit noch nie dagewesener Präzision zu messen [7]. Ein mögliches zum Einsatz kommendes Energiespektrometer stellt das Detektorsystem von PERKEO III dar.

Ziel dieser Arbeit war es, einen der Detektoren von PERKEO III zu charakterisieren und für die Verwendung mit PERC zu optimieren. Zu diesem Zweck wurden sowohl direkte Änderungen am Detektor und den dazugehörigen Komponenten vorgenommen, als auch Monte Carlo Simulationen zum Rückstreuverhalten von Elektronen am Detektor durchgeführt. Diese Themen werden in den Kapiteln 2 bis 4 im Detail betrachtet.

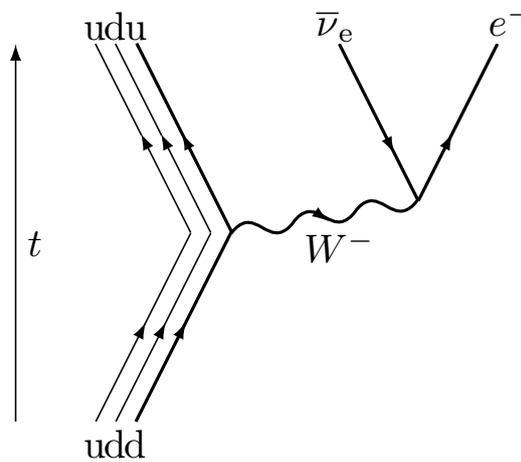
## 1.1 Der Beta-Zerfall

Beim  $\beta$ -Zerfall unterscheidet man zwischen  $\beta^-$  und  $\beta^+$  Zerfall. Es handelt sich um einen Prozess der schwachen Wechselwirkung, bei dem sich ein Neutron  $n$  in ein Proton  $p$  oder umgekehrt umwandelt. Zusätzlich zum Proton entstehen beim  $\beta^-$ -Zerfall ein Elektron  $e^-$  und ein Elektron-Antineutrino  $\bar{\nu}_e$ .

$$n \longrightarrow p + e^- + \bar{\nu}_e + Q \quad (1.1)$$

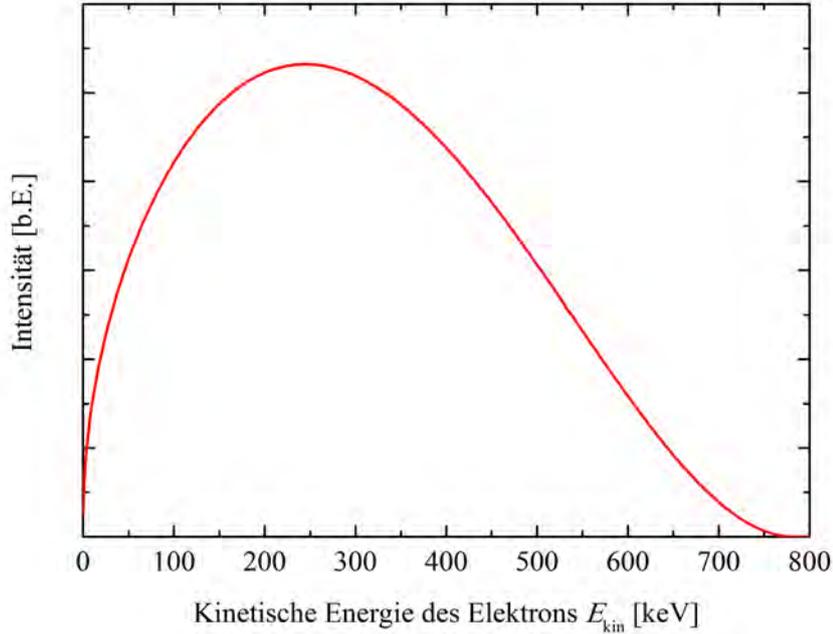
$Q$  gibt dabei die frei werdende Energie an. Im Feynman-Graphen in Abbildung 1.1 ist der  $\beta^-$ -Zerfalls dargestellt.

Im Weiteren ist, wenn vom  $\beta$ -Zerfall die Rede ist, immer der  $\beta^-$ -Zerfall gemeint.



**Abbildung 1.1:** Feynman-Diagramm des  $\beta^-$ -Zerfalls. Dabei sind u ein up-Quark, d ein down-Quark,  $e^-$  des Elektron,  $\bar{\nu}_e$  das Elektron-Antineutrino und  $W^-$  das für den  $\beta^-$ -Zerfall verantwortliche Austauschteilchen der schwachen Wechselwirkung. Der mit  $t$  beschriftete Pfeil stellt die Richtung der Zeit dar.

Bereits kurz nach Entdeckung der  $\beta$ -Strahlung stellte Chadwick mittels eines magnetischen Spektrometers fest, dass es sich dabei um eine kontinuierliche Strahlung handelt. Abbildung 1.2 zeigt die charakteristische Form des Elektrenspektrums am Beispiel des Zerfalls des freien Neutrons. Die Energie teilt sich dabei auf Proton, Elektron und Elektron-Antineutrino auf.



**Abbildung 1.2:** Energieverteilung des Elektrons beim Zerfall des freien Neutrons

Die Übergangsrate pro Energieintervall  $dE_e$  von einem Anfangszustand  $|i\rangle$  in einen Endzustand  $|f\rangle$  ergibt sich nach *Fermis Goldener Regel* zu

$$\begin{aligned} \frac{d\lambda_{i\rightarrow f}(E_e)}{dE_e} &= \\ &= \frac{2\pi}{\hbar} \frac{V^2}{h^6} \frac{1}{c^6} E_e \sqrt{E_e^2 - m_e^2 c^4} (E_0 - E_e)^2 \\ &\times \int d\Omega_e \int d\Omega_\nu |\langle f | H_{\text{schwach}} | i \rangle|^2, \end{aligned} \quad (1.2)$$

wobei vorausgesetzt wurde, dass es sich bei Neutrinos um masselose Teilchen handelt. Die Masse des Elektrons ist durch  $m_e$  gegeben.  $V/h^3$  beschreibt die Dichte des Impulsraums und  $H_{\text{schwach}}$  den Hamiltonoperator der schwachen Wechselwirkung.  $E_e$  und  $E_0$  sind die Energie des Elektrons und Endpunktsenergie. Integriert wird über die Raumwinkel  $d\Omega_e$  und  $\Omega_\nu$  von Elektron und anti-Neutrino.

Wie in Kapitel 1.4 beschrieben, ist es somit nach Jackson *et al.* [5] möglich, die differentielle Übergangswahrscheinlichkeit für den  $\beta$ -Zerfall des Neutrons

zu Gleichung (1.9) zu erweitern.

## 1.2 Die Schwache Wechselwirkung

Die schwache Wechselwirkung ist eine der vier grundlegenden physikalischen Wechselwirkungen. Sie ist verantwortlich für den  $\beta$ -Zerfall und alle ähnlichen Prozesse, wie den Elektroneneinfang. Genau wie die anderen Wechselwirkungen wird sie durch den Austausch von Eichbosonen beschrieben. Diese sind das neutrale  $Z^0$ , das positiv geladene  $W^+$  und das negativ geladene  $W^-$ , die auf Grund ihrer großen Massen dafür verantwortlich sind, dass die schwache Wechselwirkung eine sehr geringe Reichweite aufweist.

Eine Eigenschaft der schwachen Wechselwirkung ist die Verletzung der Parität  $P$ . Dies wurde im Wu-Experiment nachgewiesen [8]. Lediglich die  $CPT$ -Symmetrie bleibt auch hier erhalten.

### 1.2.1 Strom-Strom-Wechselwirkung

Enrico Fermi ging davon aus, dass die Erzeugung des Elektrons und des Neutrinos beim  $\beta$ -Zerfall einem ähnlichen Prozess zugrunde liegt, wie die Erzeugung des Photons beim  $\gamma$ -Zerfall [4]. Bei dieser Annahme ging Fermi von einer punktförmigen Wechselwirkung aus. Der entsprechende Hamiltonoperator  $H_{S-S}$  ergibt sich aus der Wechselwirkung eines leptonischen Stroms  $j_L$  mit einem hadronischen Strom  $j_H$ :

$$H_{S-S} = \frac{G}{\sqrt{2}} \int d^3x j_H^\mu(x) j_{L\mu}(x) \quad (1.3)$$

Die Kopplungskonstante  $G$  wird auch als schwache Ladung bezeichnet. Der hadronische bzw. leptonische Strom sind durch

$$\begin{aligned} j_H^\mu(x) &= \bar{\psi}_p \gamma^\mu \psi_n \\ j_L^\mu(x) &= \bar{\psi}_e \gamma^\mu \psi_\nu \end{aligned} \quad (1.4)$$

gegeben. Dabei sind  $\psi$  Leiteroperatoren, die Neutronen, Protonen, Elektronen und Neutrinos erzeugen bzw. vernichten und  $\gamma^\mu$  die Dirac-Matrizen  $\gamma^0, \gamma^1, \gamma^2$  und  $\gamma^3$ . Nach diesem Ansatz ist das Übergangsmatrixelement  $\langle f | H_{\text{schwach}} | i \rangle$

aus Gleichung (1.2) für den  $\beta$ -Zerfall und für den Elektroneneinfang gleich. Dies würde einer Paritätserhaltung entsprechen und folgt nicht den Beobachtungen des Wu-Experiments. Die Einführung eines paritätsverletzenden Anteils wird im folgenden Kapitel beschrieben.

### 1.2.2 V-A Theorie

Zur Verletzung der Parität müssen Ströme eingeführt werden, die sich wie axiale Vektoren verhalten. Diese haben die Form

$$\begin{aligned} \bar{\psi}\gamma^\mu\gamma_5\psi \\ \gamma_5 = i\gamma^0\gamma^1\gamma^2\gamma^3, \end{aligned} \tag{1.5}$$

wobei  $\gamma_5$  durch die Dirac-Matrizen gebildet wird. Dabei werden Zustände mit positiven Eigenwerten von  $\gamma_5$  als Zustände mit positiver Chiralität (oder auch rechtshändig) und Zustände mit negativem Eigenwert von  $\gamma_5$  als Zustände mit negativer Chiralität (linkshändig) bezeichnet.

Wenn wir eine Paritätstransformation mit Hilfe des Operators  $\Pi$  durchführen, wirkt dieser nicht nur im Ortsraum, sondern auch im Spinorraum auf die Dirac-Spinoren. Durch eine Kombination der paritätserhaltenden polaren  $\bar{\psi}\gamma^\mu\psi$  und der paritätsverletzenden axialen Ströme  $\bar{\psi}\gamma^\mu\gamma_5\psi$  kommt man auf die hadronischen und leptonischen Ströme

$$\begin{aligned} j_H^\mu(x) &= \bar{\psi}_p\gamma^\mu(g_V - g_A\gamma_5)\psi_n \\ j_L^\mu(x) &= \bar{\psi}_e\gamma^\mu(1 - \gamma_5)\psi_\nu, \end{aligned} \tag{1.6}$$

wobei, im Gegensatz zum hadronischen, für den leptonischen Strom bereits  $g_V = g_A = 1$  eingesetzt wurde. Die Tatsache, dass die Kopplungskonstante des Vektorstroms  $g_V$  und die des Axialvektorstroms  $g_A$  bei hadronischen Strömen ungleich Eins sind, lässt darauf schließen, dass es sich im Gegensatz zu Leptonen, bei Hadronen nicht um elementare Teilchen, sondern um Teilchen mit innerer Struktur handelt. Durch Einsetzen der Gleichung (1.6) in den Hamiltonoperator aus Gleichung (1.3) ergibt sich der Hamiltonoperator der V-A-Theorie zu:

$$H_{V-A} = \frac{G}{\sqrt{2}} \int d^3r \bar{\psi}_p \gamma^\mu (g_V - g_A \gamma_5) \psi_n \bar{\psi}_e \gamma^\mu (1 - \gamma_5) \psi_\nu + h.k. \quad (1.7)$$

Der erste Teil dieser Gleichung beschreibt den  $\beta^-$ -Zerfall und der hermitesch konjugierte Anteil den  $\beta^+$ -Zerfall bzw. den Elektroneneinfang.

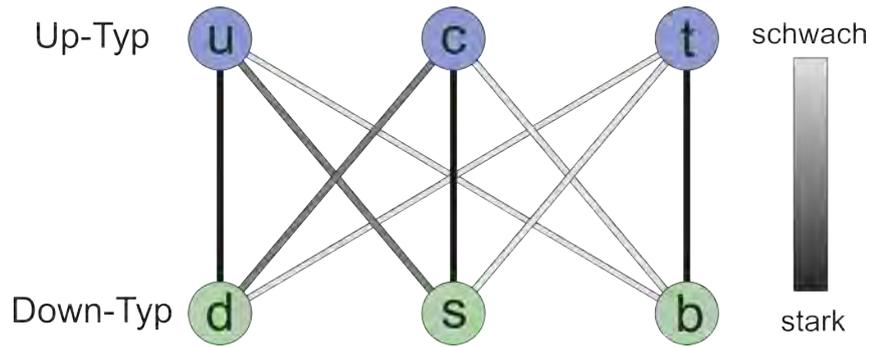
In weiterer Folge kann man diesen Formalismus auch auf alle anderen Prozesse der schwachen Wechselwirkung ausweiten. Dabei setzen sich die leptonenischen Ströme aus den Beiträgen der Elektronen, der Myonen, der Tauonen und ihrer Neutrinos zusammen. Aus den hadronischen Strömen, bei denen alle sechs bekannten Quarkarten beteiligt sind, ergeben sich auch Mischungen zwischen den einzelnen Generationen, die durch die Nichtdiagonalelemente der Cabibbo-Kobayashi-Maskawa-Matrix (siehe Kapitel 1.2.3) beschrieben werden.

### 1.2.3 CKM-Matrix

Die Cabibbo-Kobayashi-Maskawa-Matrix oder auch kurz CKM-Matrix genannt, ist die von den drei Physikern Cabibbo, Kobayashi und Maskawa aufgestellte unitäre  $3 \times 3$ -Matrix, die im Standardmodell den Übergang eines  $u$ -Typ-Quarks (Up, Charm oder Top) in ein  $d$ -Typ-Quark (Down, Strange, Bottom) und umgekehrt beschreibt [9, 10]. Dieser Übergang beschreibt den Prozess der schwachen Wechselwirkung. Der Übergang von einem Down-Typ-Quark in ein Up-Typ-Quark wird durch folgende Gleichung beschrieben:

$$\underbrace{\begin{pmatrix} V_{ud} & V_{us} & V_{ub} \\ V_{cd} & V_{cs} & V_{cb} \\ V_{td} & V_{ts} & V_{tb} \end{pmatrix}}_{\text{CKM-Matrix}} \begin{pmatrix} \langle d | D_i \rangle \\ \langle s | D_i \rangle \\ \langle b | D_i \rangle \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \langle u | U_f \rangle \\ \langle c | U_f \rangle \\ \langle t | U_f \rangle \end{pmatrix} \quad (1.8)$$

Das Betragsquadrat des entsprechenden Matrixelements  $|V_{ij}|^2$  gibt die Übergangswahrscheinlichkeit an.  $|D_i\rangle$  definiert den Anfangszustand, der ausschließlich  $d$ -Typ Quarks und  $|U_f\rangle$  den Endzustand, der ausschließlich  $u$ -Typ-Quarks enthält. Die Diagonalelemente dieser Matrix sind nahe Eins, was die Tatsache beschreibt, dass Übergänge zwischen unterschiedlichen Generationen von Quarks selten sind. Eine graphische Veranschaulichung der Stärke der möglichen Übergänge ist in Abbildung 1.3 zu sehen.



**Abbildung 1.3:** Grafische Veranschaulichung der Stärke für die möglichen Quarkübergänge bzw. Quarkmischungen. Die dunklen Linien stellen eine hohe und die hellen Linien eine niedrige Wahrscheinlichkeit dar. Die mit Up-Typ-Quarks bezeichneten Quarks haben die Ladung  $2/3 e$  und die Down-Typ-Quarks  $-1/3 e$ .

Da beim Neutronenzerfall nur das Up- und das Down-Quark beteiligt sind, ist für uns nur das  $V_{ud}$ -Element von Bedeutung. Präzise Messungen haben ergeben, dass dieses Element kleiner Eins ist [11], was einen Übergang zwischen den drei Quark-Generationen möglich macht.

### 1.3 Der Beta-Zerfall des freien Neutrons

Der  $\beta$ -Zerfall tritt nicht nur bei Kernumwandlungen, sondern auch beim Zerfall eines freien Neutrons auf. Es hat eine Lebensdauer von ca. 880 Sekunden und zerfällt danach in ein Proton, ein Elektron und ein Elektron-Antineutrino. Die Endpunktsenergie des Elektrons beträgt in diesem Fall 782 keV.

Die Erzeugung von freien Neutronen ist sehr leicht durch Forschungsreaktoren, wie sie z.B. am Atominstitut der TU Wien, dem Institut Laue-Langevin in Grenoble oder der TU München stehen, möglich.

Für Präzisionsmessungen in der Neutronenphysik, wie es z.B. von Gösselsberger *et al.* [12] beschrieben wird, kann es auch erforderlich sein, Neutronen zu polarisieren. Dies ist durch Instrumente wie Neutronenspiegel möglich, da das freie Neutron nicht in einen Atomkern gebunden ist.

## 1.4 Korrelationskoeffizienten im Neutronenzerfall

Für den Zerfall des freien Neutrons gab J. D. Jackson eine bis heute gültige differenzielle Übergangswahrscheinlichkeit an, die charakterisiert ist durch die Verhältnisse zwischen den Impulsen und Energien der Zerfallsprodukte [5]:

$$\begin{aligned} \frac{d^3\Gamma}{dE_e d\Omega_e d\Omega_\nu} &= \\ &= \left[ \frac{1}{2(2\pi)^5} G_F^2 |V_{ud}|^2 (1 + 3|\lambda|^2) p_e E_e (E_0 - E_e)^2 \right] \\ &\times \left[ 1 + a \frac{\vec{p}_e \cdot \vec{p}_\nu}{E_e E_\nu} + b \frac{m_e}{E_e} + \frac{\langle \vec{\sigma}_n \rangle}{\sigma_n} \cdot \left( A \frac{\vec{p}_e}{E_e} + B \frac{\vec{p}_\nu}{E_\nu} + D \frac{\vec{p}_e \times \vec{p}_\nu}{E_e E_\nu} \right) \right] \end{aligned} \quad (1.9)$$

Dies gilt für polarisierte und unpolarisierte Neutronen, mit einem Spin  $\langle \vec{\sigma}_n \rangle$ . Die Größen  $E_e$ ,  $E_\nu$ ,  $p_e$  und  $p_\nu$  beschreiben die Energien und Impulse des Elektrons und des Elektro-Antineutrinos.  $G_F$  ist die Fermi-Kopplungskonstante und  $E_0$  ist die Endpunktsenergie des Elektrons. Die erste Klammer in Gleichung (1.9) beschreibt das Energiespektrum der Elektronen, wie es in Abbildung 1.2 dargestellt ist. Die beim Zerfall frei werdende Energie wird dabei auf die Zerfallsprodukte aufgeteilt. Für den Fall, dass die gesamte frei werdende Energie auf das Elektron übertragen wird, entspricht diese seiner Endpunktsenergie  $E_0$  von ca. 1293 keV.

Aus dem Verhältnis der Kopplungskonstanten der Vektor- und Axialvektorströme  $g_V$  und  $g_A$  aus Kapitel 1.2.2 sowie der Phase  $\phi$  kann man den Koeffizienten  $\lambda$  berechnen:

$$\lambda = \left| \frac{g_A}{g_V} \right| e^{i\phi}. \quad (1.10)$$

Die einzelnen Koeffizienten in Gleichung (1.9) können durch diese Kopplung beschrieben werden. Dabei steht  $A$  für den  $\beta$ -Asymmetrie Parameter und  $B$  für den Neutrino-Asymmetrie Parameter, die beide paritätsverletzend sind. Für den Fall, dass der Tripple-Korrelationskoeffizient  $D \neq 0$  ist, wäre auch die Zeitumkehrinvarianz verletzt. Die Winkelkorrelation zwischen Elektron und

Antineutrino wird durch den Elektron-Antineutrino Parameter  $a$  beschrieben. Der Parameter  $b$ , der als Fierz-Interferenzterm bezeichnet wird, verschwindet nach dem Standardmodell. Die einzelnen Koeffizienten ergeben sich zu:

$$\begin{aligned}
 a &= \frac{1 - |\lambda|^2}{1 + 3|\lambda|^2}, \\
 A &= -2 \frac{|\lambda|^2 + |\lambda| \cos \phi}{1 + 3|\lambda|^2}, \\
 B &= 2 \frac{|\lambda|^2 - |\lambda| \cos \phi}{1 + 3|\lambda|^2}, \\
 D &= 2 \frac{|\lambda| \sin \phi}{1 + 3|\lambda|^2}.
 \end{aligned} \tag{1.11}$$

## 1.5 Test des Standardmodells

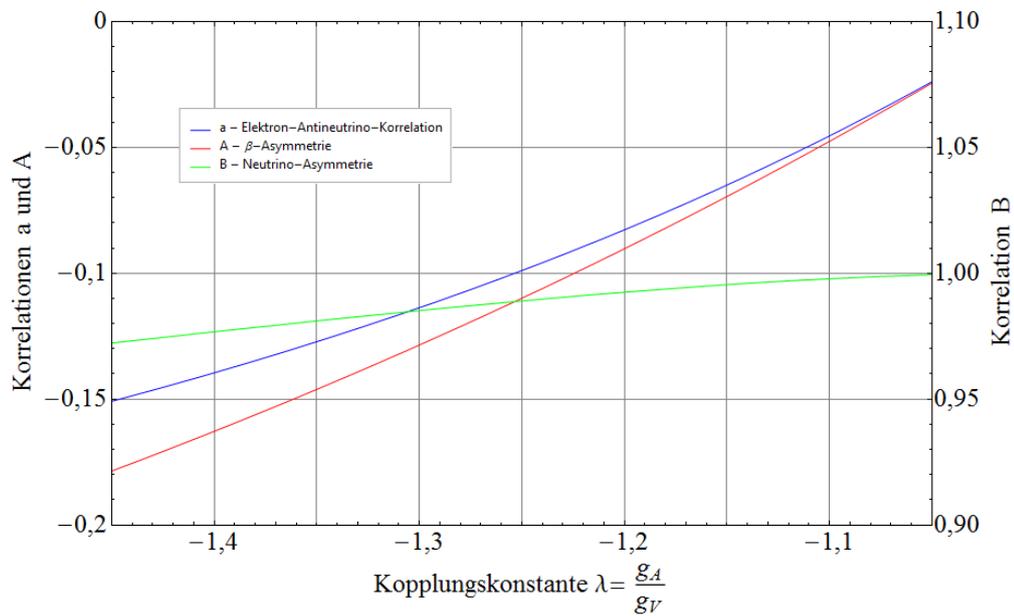
Zur Überprüfung des Standardmodells können wir uns der Überlegungen dieses Kapitels bedienen. Wobei vor allem die CKM-Matrix aus Kapitel 1.2.3 eine Überprüfung des Standardmodells ermöglicht. Durch Berechnung der Summe der Betragsquadrate jeweils einer Zeile oder Spalte kann auf die Anzahl der Quarkgenerationen geschlossen werden. Wenn die Summe kleiner Eins ist, muss es noch eine weitere Generation geben:

$$\sum_{k=1}^3 |V_{ik}|^2 = \sum_{n=1}^3 |V_{nj}|^2 \leq 1 \tag{1.12}$$

Dies bedeutet z.B. für die erste Zeile, welche die Elemente  $V_{ud}$ ,  $V_{us}$  und  $V_{ub}$  enthält, dass ein Up-Typ-Quarks in eines der drei Down-Typ-Quarks zerfallen muss. Für den Fall, dass sich durch Messungen einer Summe aus Gleichung (1.12) ein Wert kleiner Eins ergibt, würde dies eine weitere Generation an Quarks fordern [13]. Die oben beschriebene Kopplungskonstante  $\lambda$  für den schwachen Zerfall aus Gleichung (1.10) kann ebenfalls zur Überprüfung des Standardmodells herangezogen werden. Sie hängt mit dem  $V_{ud}$ -Element der CKM-Matrix und der Lebensdauer des freien Neutrons wie folgt zusammen [13]:

$$\tau_n^{-1} = \frac{G_F^2 m_e^5}{2\pi^3} |V_{ud}|^2 (1 + 3|\lambda|^2) f^R (1 + \Delta_R). \tag{1.13}$$

Die Faktoren  $f^R$  und  $\Delta_R$  beschreiben den Phasenraum und Strahlungskorrekturen. Durch Messung von Lebensdauer und Kopplungskonstante der schwachen Wechselwirkung kann somit auf das  $V_{ud}$ -Element zurückgerechnet werden. Wie in Abbildung 1.4 zu sehen ist, eignet sich  $A$  besonders gut für die Bestimmung von  $\lambda$ , da dessen Kurve die größte Steigung aufweist. Mit Hilfe eines Spektrometers wie PERKEO III kann der Wert von  $\lambda$  aus der Messung der  $\beta$ -Asymmetrie  $A$  bestimmt werden. Die experimentelle Bestimmung von  $A$  mit Hilfe dieses Spektrometers wird in Kapitel 2.1.1 näher beschrieben.



**Abbildung 1.4:** Abhängigkeit der Korrelationskoeffizienten aus Gleichung (1.11) von der Kopplungskonstanten  $\lambda$  der schwachen Wechselwirkung.

Somit kann durch Messung der  $\beta$ -Asymmetrie  $A$  die Kopplungskonstante  $\lambda$  berechnet werden. Aus  $\lambda$  und der Lebensdauer  $\tau_n$  lässt sich das  $V_{ud}$  Element der CKM-Matrix bestimmen. Zusammen mit  $V_{us}$  und  $V_{ub}$  lässt sich dann ihre Unitarität überprüfen.



# Kapitel 2

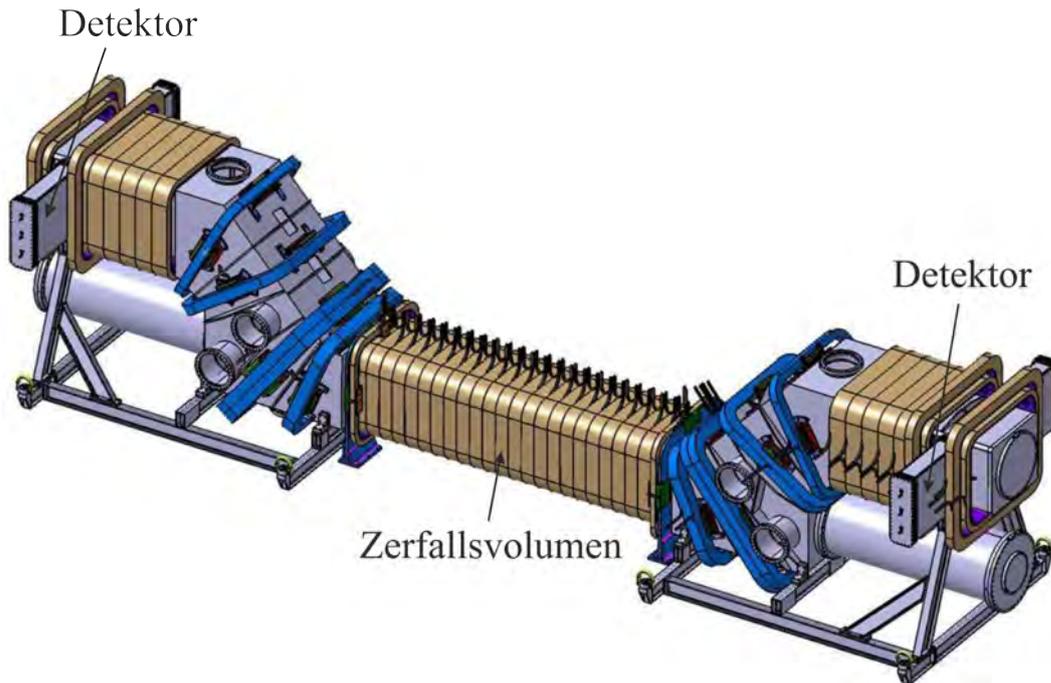
## PERKEO III

In diesem Kapitel beschäftigen wir uns anfangs mit dem experimentellen Aufbau, der Funktion und den grundlegenden Eigenschaften des Elektronenspektrometers PERKEO III und in weiterer Folge mit seiner Kalibrierung mittels geeigneter radioaktiver Quellen sowie der Verbesserung des Detektorsystems.

### 2.1 Funktion und Aufbau

Das Instrument PERKEO III ist ein in den Arbeitsgruppen von Prof. Abele und Prof. Dubbers von Dr. Märkisch an der Universität Heidelberg entwickeltes Elektronenenergiespektrometer, um die Winkelkorrelationskoeffizienten aus dem Neutronenzerfall, wie sie in Kapitel 1.4 beschrieben wurden in hoher Präzision zu bestimmen. Im Vergleich zu den Vorgängerexperimenten PERKEO I [14] und PERKEO II [15, 13, 16] wurden sowohl die systematische als auch die statistische Genauigkeit erhöht [17]. Mit einem kontinuierlichen Neutronenstrahl konnten Ereignisraten von bis zu 50 kHz erreicht werden.

Der Gesamtaufbau besteht aus insgesamt drei Teilen, wie sie in Abbildung 2.1 dargestellt sind. Der mittlere Teil dient als Zerfallsvolumen, das auf Grund seiner Länge eine deutlich höhere Statistik im Vergleich zu den Vorgängerexperimenten zulässt. Vor und nach dem Zerfallsvolumen befinden sich direkt angrenzend je eine Ablenkspule, welche die durch den Neutronenzerfall entstandenen Elektronen aus dem Neutronenstrahl heraus und auf die Detektoren hinleitet. Die Detektion der Elektronen erfolgt mittels Szintillator mit Photomultiplierauslese.

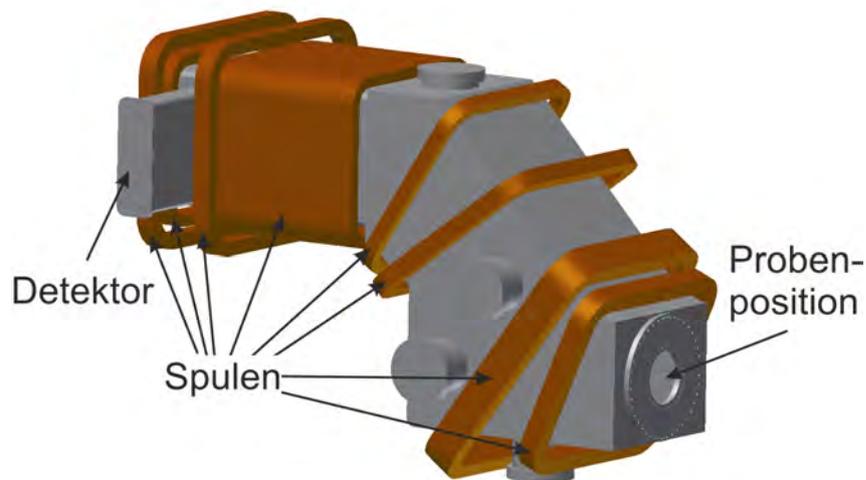


**Abbildung 2.1:** Schematische Darstellung des Gesamtaufbaus von PERKEO III. Der sich im mittleren Teil befindende, mit Zerfallsvolumen bezeichnete, Bereich sammelt die durch den Zerfall des freien Neutrons freiwerdenden, geladenen Teilchen und leitet sie über ein magnetisches Führungsfeld nach links bzw. rechts zu den beiden S-förmigen Ablenkspulensystemen. Am Ende dieser Ablenkspulensysteme befinden sich die Szintillations-Detektoren mit Photomultiplierauslese [6].

Nach umfassenden Messungen der  $\beta$ -Asymmetrie mit PERKEO III am Institut Laue-Langevin (ILL) in Grenoble wurde das Instrument abgebaut und einer der beiden Detektoren inkl. zugehöriger Vakuumkammer ans Atominstitut der TU Wien (im weiteren als ATI bezeichnet) gebracht, um Optimierungen durchzuführen, die zu einer Verbesserung der Energiespektren führen. Eine schematische Darstellung der am ATI aufgebauten Detektoreinheit ist in Abbildung 2.2 zu sehen. Diese Arbeit beschäftigt sich mit der Optimierung und Charakterisierung dieser Detektoreinheit.

Durch diverse Adaptierungen strebt man ein besseres Verständnis derartiger Detektoren an, um bei zukünftigen Projekten, wie dem neuen Instrument PERC [7] die Genauigkeit der Messungen noch weiter zu erhöhen. Da für die in diesem Kapitel beschriebenen Adaptierungen keine freien Neutronen erforder-

lich sind, wurde auf das Zerfallsvolumen verzichtet. Die zur Verbesserung des experimentellen Aufbaus erforderlichen Elektronen werden durch entsprechende Kalibrierquellen, wie sie in Kapitel 2.4.1 noch näher beschrieben werden, erzeugt. Die technischen Daten der Detektoreinheit, die sich am ATI befindet, sind in Tabelle 2.1 zusammengefasst.



**Abbildung 2.2:** Schematische Darstellung des Ablenkspulensystems mit eingebautem Detektor am Atominstitut der TU Wien. Im unteren rechten Bereich befindet sich die Kalibrierquelle. Oben links befindet sich der Szintillations-Detektor mit Photomultiplierauslese.

**Tabelle 2.1:** Technische Daten der Detektoreinheit von PERKEO III, die sich am Atominstitut der TU Wien befindet.

Länge $\times$ Breite $\times$ Höhe	$2,7 \times 1,8 \times 1,9 \text{ m}^3$
Detektorfläche	$435 \times 450 \text{ mm}^2$
Magnetfeld an der Quelle	92 mT
Maximum des Magnetfeldes	134 mT
Magnetfeld am Detektor	112 mT
Stromstärke	420 A
Anzahl der Spulen	14
Kühlung der Spulen	deionisiertes Wasser

### 2.1.1 Experimentelle Bestimmung der $\beta$ -Asymmetrie $A$

In Kapitel 1.5 wurde gezeigt, wie man mit Hilfe des Verhältnisses der Kopplungskonstanten  $\lambda$  der schwachen Wechselwirkung bzw. der  $\beta$ -Asymmetrie  $A$  und der Lebensdauer  $\tau_n$  des freien Neutrons das  $V_{ud}$ -Element der CKM-Matrix bestimmen kann. Die  $\beta$ -Asymmetrie  $A$  kann experimentell mit einem Elektronenspektrometer wie PERKEO III bestimmt werden, das speziell dafür konzipiert ist. Die Winkelverteilung der Elektronenemission [18] mit dem Winkel  $\theta$  zwischen der Elektronenemissionsrichtung und dem Spin des einlaufenden Neutrons folgt zu:

$$\omega(\theta) = 1 + \frac{v}{c} A \cos \theta. \quad (2.1)$$

Die von der Energie abhängige Zählrate der Elektronen mit ausgerichtetem Neutronenspin ist durch

$$N^\uparrow(E) \propto F(E) \int_0^{\pi/2} \omega(\theta) \sin \theta \, d\theta = F(E) \left( 1 + \frac{1}{2} A\beta \right) \quad (2.2)$$

gegeben, wobei  $\beta = \frac{v}{c}$  ist. Die Zerfallsrate der entgegengesetzten Spinrichtung  $N^\downarrow(E)$  erhält man in gleicher Weise durch Integration über den zweiten Halbraum ( $\pi/2 < \theta \leq \pi$ ). Die beiden Zerfallsraten können durch separate Messung der beiden Polarisationsrichtungen bestimmt werden. Aus den beiden Ereignisraten wird die experimentelle  $\beta$ -Asymmetrie

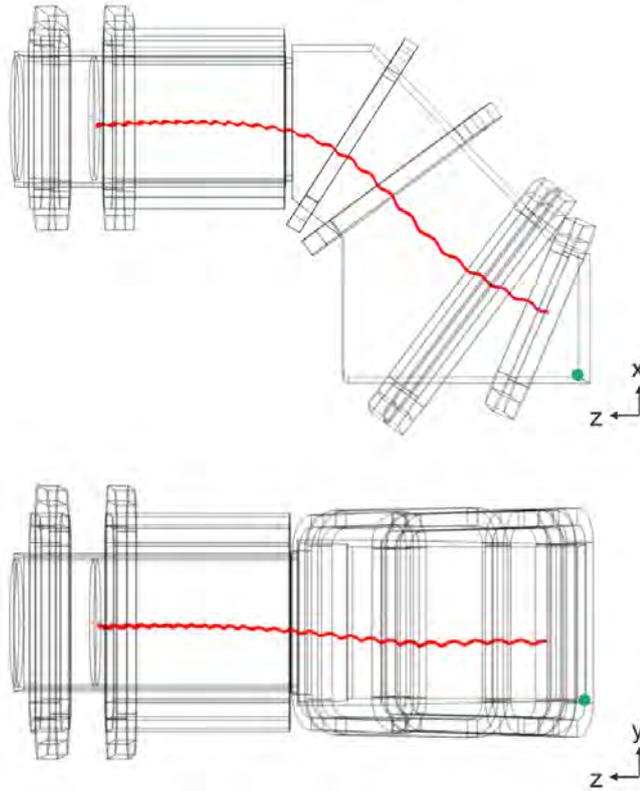
$$A_{\text{exp}}(E) = \frac{N^\uparrow(E) - N^\downarrow(E)}{N^\uparrow(E) + N^\downarrow(E)} = \frac{1}{2} A\beta \quad (2.3)$$

bestimmt. Dabei muss jedoch berücksichtigt werden, dass dies lediglich eine vereinfachte Form darstellt.

## 2.2 Teilchentransport im Magnetfeld

Voraussetzung für die Bestimmung der Parameter des Neutronenzerfalls ist es, die Zerfallselektronen aus dem Neutronenstrahl heraus und auf den Detektor zu transportieren. Dafür verantwortlich sind die S-förmigen Spulensysteme vor

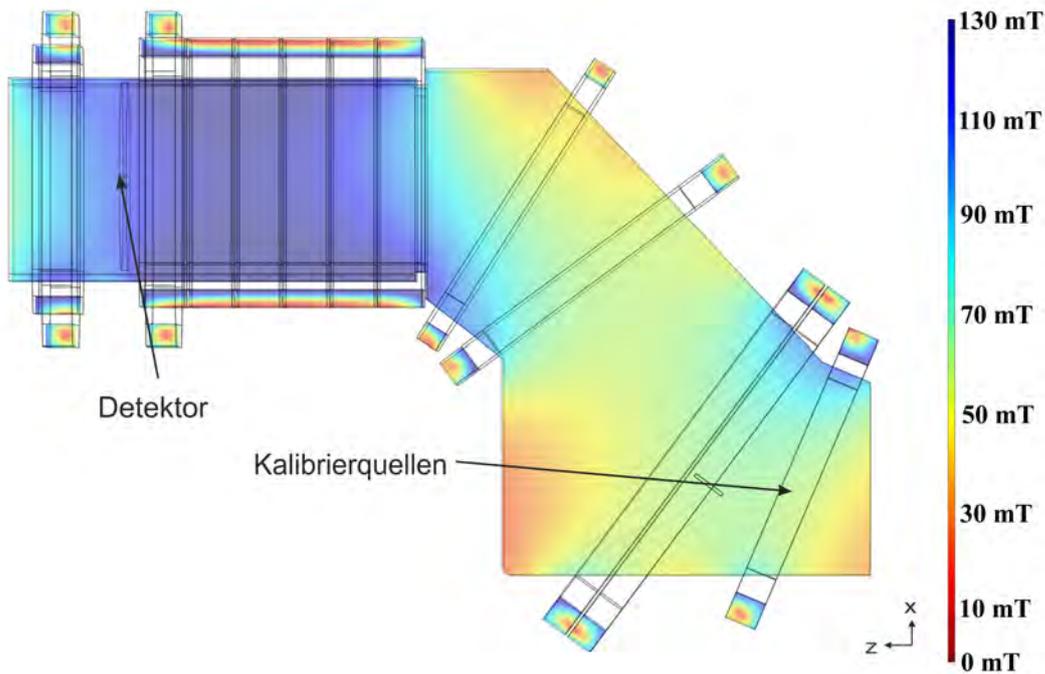
und nach dem Zerfallsvolumen bzw. einer der Detektoreinheiten, wie sie am ATI steht. Alle weiteren Berechnungen in dieser Arbeit beziehen sich auf diese eine Detektoreinheit. Der Verlauf einer Teilchentrajektorie ist in Abbildung 2.3 exemplarisch dargestellt.



**Abbildung 2.3:** Exemplarischer Verlauf einer Teilchentrajektorie in einer Detektoreinheit von PERKEO III. Simuliert wurden 2500 Elektronen mit einer Startenergie von 992 keV und einem Kippwinkel von  $27,5^\circ$  um die positive  $y$ -Achse und einem Startpunkt bei den Koordinaten (310 mm, 275 mm, 170 mm). Oben ist die Seitenansicht und unten die Vogelperspektive zu sehen. Der grüne Punkt stellt den Ursprung des in dieser Arbeit verwendeten Koordinatensystems dar. Erstellt wurde das Bild mit dem Softwarepaket COMSOL Multiphysics [19].

### 2.2.1 Das Magnetfeld von PERKEO III

Entscheidend für die Teilchentrajektorie ist vor allem die an die Spulen angelegte Stromstärke. Diese richtet sich wiederum nach dem verwendeten Netzgerät,

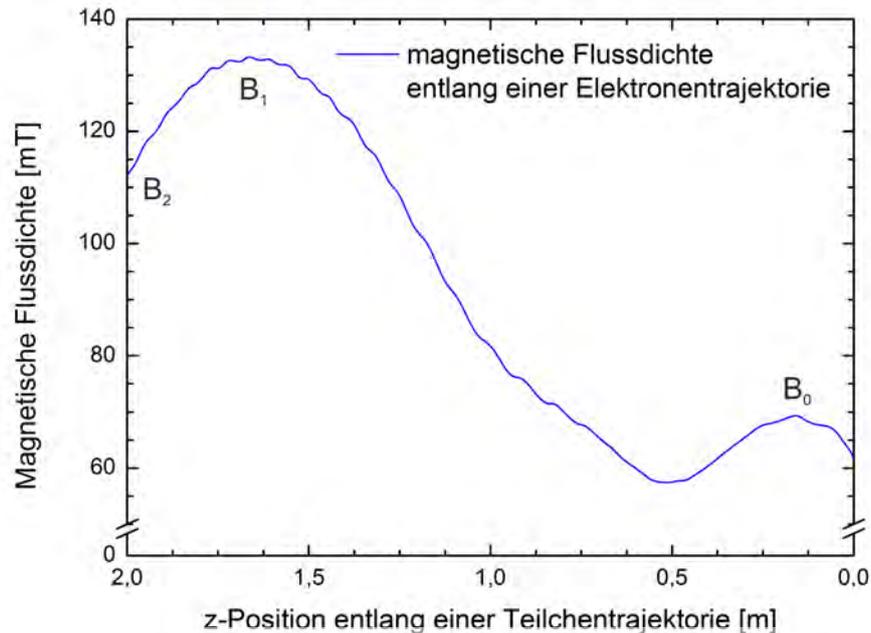


**Abbildung 2.4:** Mit COMSOL berechnete magnetische Flussdichte in der  $x$ - $z$ -Ebene einer Detektoreinheit von PERKEO III. Als Simulationsparameter wurden die in Tabelle 2.1 aufgelisteten Werte verwendet. Der Detektor ist links oben eingezeichnet, die Kalibrierquelle befindet sich rechts unten. Der Farbverlauf gibt für eine niedrige Flussdichte rot und für eine hohe Flussdichte blau an.

welches für eine Detektoreinheit einen maximalen Wert von 420 A erlaubt. Bei höheren Stromstärken ergeben sich Schwingungen in der Stromversorgung. Die magnetischen Felder wurden mit COMSOL simuliert und sind in den Abbildungen 2.4 und 2.5 dargestellt.

### 2.2.2 Adiabatischer Teilchentransport

Ein geladenes Teilchen bewegt sich bei Anwesenheit eines Magnetfeldes entlang einer Spiralbahn. Diese Art der Bewegung wird auch als Gyration bezeichnet und ist in Kapitel 2.4.2 genauer beschrieben. Innerhalb des von der Gyration umschlossenen Bereiches ergibt sich der magnetische Fluss laut Gleichung (2.4) als adiabatische Invariante. Im Falle einer Erhöhung des magnetischen Feldes kommt es zu einer Verkleinerung des Gyrationradius und auf Grund der Energieerhaltung zu einer Verringerung der longitudinalen Geschwindig-



**Abbildung 2.5:** Verlauf der magnetischen Flussdichte entlang einer Elektronentrajektorie. Simuliert wurden 2500 Elektronen mit einer Startenergie von 992 keV und einem Kippwinkel von  $27,5^\circ$  um die positive  $y$ -Achse und einem Startpunkt bei den Koordinaten (310 mm, 275 mm, 170 mm). Die magnetische Flussdichte am Ort der Probe wird mit  $B_0$ , die am Maximum mit  $B_1$  und die am Detektor mit  $B_2$  bezeichnet. Die Unebenheiten im Kurvenverlauf ergeben sich durch die rechteckige Form der Spulen und der Gyration der Elektronen um die Magnetfeldlinie. Entlang einer Trajektorie ändert sich der Abstand zwischen Elektron und Spulen und somit auch das Magnetfeld ständig. Es ist darauf zu achten, dass die Beschriftung der Abszisse entsprechend allen vorherigen Abbildungen, zur besseren Veranschaulichung gespiegelt wurde.

keit. Die weiteren adiabatischen Invarianten sind in Gleichung (2.5) und (2.6) angegeben [20]:

$$Br_g^2, \quad (2.4)$$

$$\frac{p_\perp^2}{B}, \quad (2.5)$$

$$\gamma\mu, \quad (2.6)$$

dabei geben  $B$  die magnetische Flussdichte,  $r_g$  den Gyrationradius,  $p_\perp$  den Teilchenimpuls normal zum Magnetfeld,  $\gamma$  den Lorentzfaktor und  $\mu$  das magnetische Moment an.

### 2.2.3 Magnetischer Spiegeleffekt

Aus der zweiten magnetischen Invariante Gleichung (2.5) und der Definition des Impulses  $p_\perp = mv_\perp$  ergibt sich zwischen Impuls und Magnetfeld an zwei verschiedenen Orten die Beziehung:

$$\frac{m^2 v_{\perp,1}^2}{B_1} = \frac{m^2 v_{\perp,2}^2}{B_2} = \text{const.} \quad (2.7)$$

Dabei wurde die Geschwindigkeit in eine Parallelkomponente  $v_\parallel = v \cos \theta$  und eine Normalkomponente  $v_\perp = v \sin \theta$  aufgeteilt. Durch weiteres Umformen ergeben sich für die transversale und in weiterer Folge für die longitudinale Geschwindigkeit

$$v_{\perp,2}^2 = \frac{v_{\perp,1}^2}{B_1} B_2, \quad (2.8)$$

$$v_{\parallel,2}^2 = v^2 - v_{\perp,2}^2 = v^2 - \frac{v_{\perp,1}^2}{B_1} B_2. \quad (2.9)$$

Gleichung (2.9) kann für  $B_2 > B_1$  dazu führen, dass sich das Vorzeichen der longitudinalen Geschwindigkeit ändert und die Flugrichtung der Elektronen umkehrt. Diese Reflexion wird als magnetischer Spiegeleffekt bezeichnet [20].

Im umgekehrten Fall eines abfallenden Magnetfeldes kommt es zu einer Erhöhung der longitudinalen Geschwindigkeit, auf Kosten der transversalen Geschwindigkeit. Dieser Effekt wird als inverser Spiegeleffekt bezeichnet.

### 2.2.4 Abhängigkeit des Polarwinkels vom Magnetfeld

Von der Kalibrierquelle werden Elektronen isotrop emittiert. Da das Eichpräparat, wie in Kapitel 2.4.1 detailliert beschrieben, auf einem Probenhalter aufgebracht ist, bleiben alle entgegen der Magnetfeldrichtung emittierten Elektronen unberücksichtigt, da sie durch eine 6 mm dicke Platte aus Polymethylmethacrylat auf der Rückseite der Probe absorbiert werden. Der Emissionswinkel der Elektronen entspricht dabei einer Sinusfunktion von  $0^\circ$  und  $180^\circ$ , wie in Gleichung (2.12) angegeben.  $0^\circ$  entspricht einer Emission normal auf die Probe.

Es kommen jedoch nicht alle Elektronen am Detektor an. Dies hängt vom Winkel der Elektronen zum Magnetfeld ab. Durch Umformen der Gleichung (2.8) und Einsetzen des Zusammenhangs  $v_\perp = v \sin \theta$  erhält man für den Fall des inversen Spiegeleffektes die Beziehung:

$$\frac{\sin^2 \theta_1}{\sin^2 \theta_2} = \frac{B_1}{B_2} \xrightarrow{\theta_{1,\max}=90^\circ} \theta_{2,\max} = 66,5^\circ \quad (2.10)$$

Der Winkel  $\theta_{2,\max}$  entspricht dem Maximalwinkel, der auf den Detektor auftreffenden Elektronen. Die Werte für das Magnetfelder  $B_0$  an der Position der Kalibrierquelle,  $B_1$  des Magnetfeldmaximums und  $B_2$  des Detektors stammen aus den Rechnungen mit COMSOL Multiphysics, wie in Kapitel 2.1 angegeben. Ebenso ergibt sich ein kritischer Winkel  $\theta_{0,\max}$ , ab dem keine Elektronen mehr über das Hauptmaximum  $B_1$  gelangen:

$$\theta_{0,\max} = \arcsin \left( \sqrt{\frac{B_0}{B_1}} \right) = 55,9^\circ \quad (2.11)$$

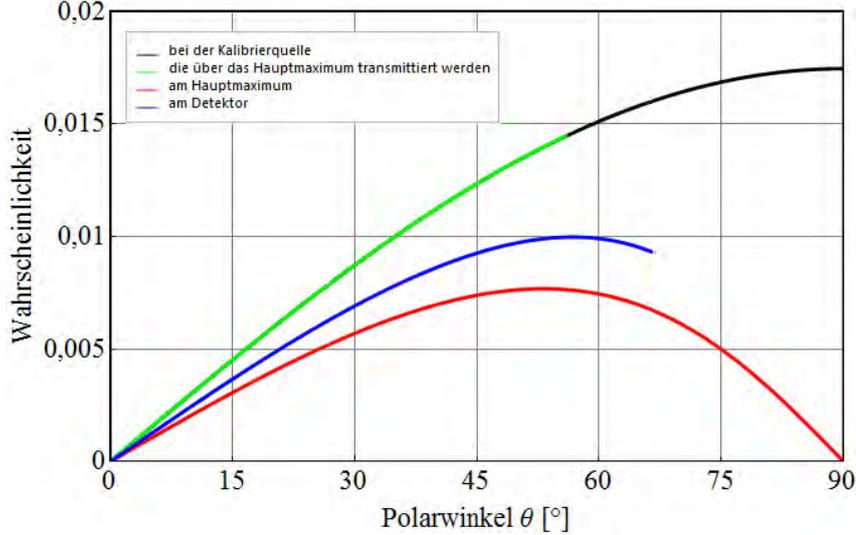
Alle Elektronen mit größerem Emissionswinkel ändern auf Grund des magnetischen Spiegeleffektes das Vorzeichen ihrer Flugrichtung und werden am ansteigenden Magnetfeld reflektiert.

Die Wahrscheinlichkeitsdichte für den Polarwinkel  $\theta_0$  am Ort der Kalibrierquelle ist

$$P(\theta_0) = \omega_0(\theta_0)d\theta_0 = \sin \theta_0 d\theta_0. \quad (2.12)$$

Die Wahrscheinlichkeitsdichte für den Polarwinkel  $\theta_2$  am Ort des Detektors ergibt sich zu

$$P(\theta_2) = \omega_2(\theta_2)d\theta_2 = \frac{B_0}{B_2} \frac{\sin \theta_2 \cos \theta_2}{\sqrt{1 - \frac{B_0}{B_2} \sin^2 \theta_2}} d\theta_2. \quad (2.13)$$



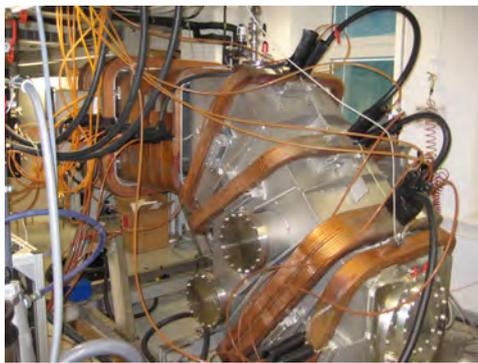
**Abbildung 2.6:** Polarwinkelverteilung der Elektronen an verschiedenen Positionen innerhalb von PERKEO III. In schwarz sieht man die auf Eins normierte Verteilungsfunktion, mit der die Elektronen von der Kalibrierquelle emittiert werden, in Abhängigkeit von  $\theta_0$ . Davon kommen aber nur die in grün eingezeichneten über das Hauptmaximum  $B_1$ . Beim Magnetfeld  $B_1$  entspricht die Funktion der roten Kurve, in Abhängig von  $\theta_1$ . Am Detektor kommen die Elektronen mit der in blau eingezeichneten, von  $\theta_2$  abhängigen, Verteilungsfunktion an.

Eine detaillierte Herleitung von Gleichung (2.13) ist im Anhang A zu finden. Wenn man Gleichungen (A.6) und (2.13) vergleicht, sieht man, dass die mathematische Beschreibung der Winkelverteilung der Elektronen nur vom Magnetfeld an der Start- und Endposition abhängt. Der Verlauf des Magnetfeldes dazwischen ist nur relevant für die Bestimmung des kritischen Winkels  $\theta_{0,\max}$  aus Gleichung (2.11), sowie des maximalen Winkels an der Endposition  $\theta_{2,\max}$ . Die entsprechenden Wahrscheinlichkeitsdichten sind in Abbildung

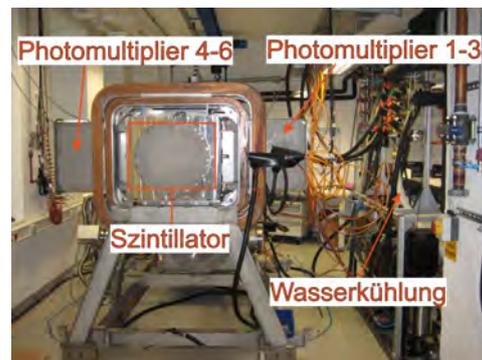
2.6 dargestellt. Eingezeichnet sind die Verteilungen an der Kalibrierquelle, der Elektronen die über das in Abbildung 2.5 eingezeichnete Hauptmaximum  $B_1$  kommen, der Elektronen am Hauptmaximum selbst und am Detektor. Es ergibt sich, dass nur 44% der von der Kalibrierquelle emittierten Elektronen am Detektor ankommen.

## 2.3 Vakuum- und Detektorsystem

Neben den Magnetspulen besteht die Detektoreinheit von PERKEO III aus zwei weiteren wichtigen Teilen, einerseits der in Abbildung 2.7(a) zu sehenden Vakuumkammer und andererseits dem in Abbildung 2.7(b) markierten Detektor.



(a) Seitenansicht der Detektoreinheit von PERKEO III. Zu sehen ist die Vakuumkammer mit den Magnetspulen und den dazugehörigen Kühlwasserschläuchen.



(b) Vorderansicht der Detektoreinheit von PERKEO III. Eingezeichnet sind die Positionen, an denen sich Szintillator und Photomultiplier des Detektors befinden. Rechts sind die Pumpen- und Verteilereinheit der Wasserkühlung zu sehen.

**Abbildung 2.7:** Aufbau der Detektoreinheit von PERKEO III am Atominstitut der TU Wien.

### 2.3.1 Vakuumkammer

Um den Transport von geladenen Teilchen bis zum Detektor zu gewährleisten, ist ein Hoch- bzw. Ultrahochvakuum notwendig. Da im Zuge dieser Arbeit nur Elektronen gemessen wurden, ist ein Hochvakuum im Bereich von  $10^{-5}$  mbar

ausreichend. Dies entspricht einer Teilchendichte von etwa  $2,65 \cdot 10^{11} \text{ cm}^{-3}$  [21]. Eine Verschlechterung des Vakuums würde automatisch die Messung negativ verfälschen, da bei jeder Streuung der Elektronen an den Restluftmolekülen ein Teil ihrer Energie verloren geht und sich ihre Flugrichtung ändert.

Eine weitere Einschränkung an das Vakuum ist durch den Arbeitsbereich der im Detektorsystem verwendeten Photomultiplier gegeben. Diese arbeiten bei Raumdruck oder unterhalb von  $10^{-4} \text{ mbar}$ . Im dazwischenliegenden Druckbereich besteht die Gefahr eines Spannungsüberschlages, was zu einer Beschädigung der Photomultiplier führen kann. Die entsprechenden Durchschlagsspannungen ergeben sich aus dem Paschengesetz

$$V_d = \frac{Apd}{\log(Bpd)}. \quad (2.14)$$

$V_d$  gibt die Durchschlagsspannung,  $p$  den Druck und  $d$  den Abstand an. Die Konstanten  $A$  und  $B$  werden als Paschenkoeffizienten bezeichnet und sind für atmosphärische Luft durch

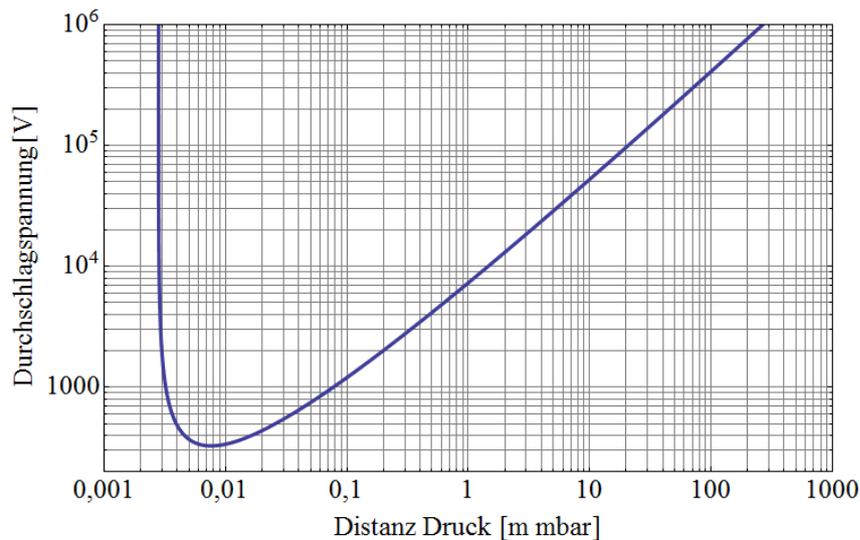
$$A = 4,36 \cdot 10^7 \frac{\text{V}}{\text{m atm}}, \quad (2.15)$$

$$B = 3,62 \cdot 10^5 \frac{1}{\text{m atm}} \quad (2.16)$$

gegeben [22]. Die zugehörige Kurve ist in Abbildung 2.8 zu sehen, wobei die Werte der Paschenkoeffizienten entsprechend den SI-Einheiten umgerechnet wurden. Bei einem üblichen Umgebungsdruck von etwa 1 atm (1013 mbar) ergibt sich für einen Abstand von 1 mm eine Durchschlagsspannung von 7,4 kV. Bei sinkendem Druck sinkt auch die Durchschlagsspannung bis zu einem Minimalwert von etwa 330 V, der bei einem Abstand von 1 mm bei etwa 10 mbar erreicht wird. Bei weiter fallendem Druck steigt die Durchschlagsspannung stark an, wodurch eine Verwendung der Photomultiplier wieder möglich wird. Wie aus Abbildung 2.8 ersichtlich ist, befinden wir uns unterhalb von  $10^{-4} \text{ mbar}$  in einem Bereich in dem es nicht mehr zu Überschlagen kommen kann.

Der experimentell geforderte Messdruck wird mittels eines Pumpsystems, wie es im Schaltplan in Abbildung A.1 im Anhang zu sehen ist, erreicht. Die wichtigsten Komponenten sind eine Scrollpumpe zum Erzeugen eines  $10^{-1} \text{ mbar}$  Vorvakuums und eine Turbo-Molekularpumpe zum Erreichen des Enddrucks

im Vakuumbereich von  $10^{-6}$  mbar. Die eingezeichnete Kryopumpe dient zur weiteren Verbesserung des Vakuums, welche jedoch nur testweise für die Elektronenspektroskopie in Betrieb genommen wurde. Die Auslese und Aufzeichnung des aktuellen Drucks erfolgen je nach Druckbereich mittels Pirani-Messsonden bzw. Kaltkathoden auf einem Messrechner.



**Abbildung 2.8:** Paschenkurve für atmosphärische Luft. Angegeben ist die Durchschlagsspannung bei gegebenem Druck und Abstand.

### 2.3.2 Detektor

Die Messung der Elektronenenergie erfolgt mit dem in Abbildung 2.9 gezeigten Detektorsystem. Zentraler Bestandteil ist der  $435 \times 450 \text{ mm}^2$  große und 5 mm dicke organische Szintillator aus Polyvinyltoluen. Dieser erzeugt beim Auftreffen von Elektronen, Photonen mit einer mittleren Wellenlänge von 425 nm, welche über die seitlich angrenzenden Lichtleiter zu den Photomultipliern geführt werden. Die Spektren des alten und des, zur Verbesserung der Energiespektren (siehe Kapitel 2.5), neuen Szintillators sind in Abbildung 2.12(a) und 2.12(b) dargestellt. In den sechs seitlich montierten Photomultipliern erfolgt die Umwandlung der Photonen in ein elektrisches Signal welches anschließend mit Hilfe entsprechender Elektronik verstärkt und ausgelesen wird. Die graphische Darstellung und Auswertung der Messungen erfolgt auf einem PC.

Da es durch elektronisches Rauschen in den verwendeten Komponenten zu

Fehlmessungen kommen kann, ist die signalverarbeitende Schaltung so konzipiert, dass nur bei Ansprechen von mindestens zwei Photomultipliern eine Zählung und Auswertung der Photonen erfolgt. Diese Art der Messung wird als Koinzidenzmessung bezeichnet. Damit wird der elektronische Untergrund deutlich verringert.



**Abbildung 2.9:** Ein Detektor von PERKEO III, bestehend aus einem Gestell auf dem der Szintillator, die Lichtleiter sowie die sechs Photomultiplier montiert sind.

## 2.4 Kalibrierung

Um die Messkanäle des Detektors den tatsächlich gemessenen Elektronenenergien zuordnen zu können, ist es zweckmäßig,  $\beta$ -Strahler mit bekannter Elektronenenergie als Kalibrierquellen zu verwenden. Eine Einschränkung der zu verwendenden Quellen ergibt sich aus der Endpunktenergie der Elektronen beim  $\beta$ -Zerfall des freien Neutrons in der Höhe von 782 keV. In Tabelle 2.2 sind die im Rahmen dieser Arbeit verwendeten Kalibrierquellen aufgelistet.

### 2.4.1 Kalibrierquellen

Wie in Tabelle 2.2 zu sehen ist, liegen die Energien aller verwendeten Kalibrierquellen im Bereich unterhalb von 1000 keV. Die  $^{207}\text{Bi}$ -Energienlinie eignet sich besonders gut für die Kalibrierung, da sie zwei Konversionselektronen enthält, deren Energien bei 503 keV und bei 992 keV liegen [23]. Damit ist es ohne Wechsel der Probe und somit auch ohne Veränderung des Systems möglich, zwei Energien gleichzeitig zu messen. Dabei ist zu beachten, dass die niederenergetische Linie mit geringerer Wahrscheinlichkeit auftritt. Um die beiden Energienlinien gut trennen zu können, ist eine Erhöhung der Energieauflösung

**Tabelle 2.2:** Liste der verwendeten Kalibrierquellen und deren Energielinien [23, 24].

Isotop	$e^-$ Energie	$e^-$ Energie
$^{207}\text{Bi}$	503 keV	992 keV
$^{137}\text{Cs}$	630 keV	

erforderlich. Dies wird erreicht, indem sowohl die Elektronik, als auch der Detektor selbst adaptiert wird (siehe Kapitel 2.5). Bei der  $^{137}\text{Cs}$  Quelle überwiegt im Vergleich zur Konversionslinie das  $\beta$ -Spektrum.

Die Herstellung diverser Proben erfolgte im Radiochemielabor des ATI. Dabei wird das jeweilige radioaktive, in Salzsäure gelöste Präparat mit einer Mikroliter-Pipette auf eine Hostaphanfolie <sup>1</sup> aufgetragen. Diese Folie wird auf einen Metallring geklebt, um sie nach Abdampfung der Säure auf eine Haltevorrichtung, wie in Kapitel 2.5.2 beschrieben, zu montieren.

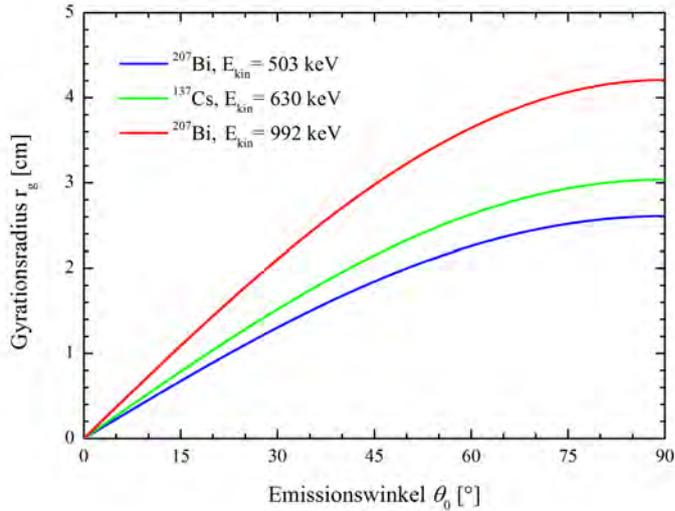
## 2.4.2 Gyration der Elektronen im Magnetfeld

Bei der Bewegung eines geladenen Teilchens in einem magnetischen Feld kommt es auf Grund der Lorentzkraft

$$\vec{F} = q (\vec{v} \times \vec{B}) \quad (2.17)$$

zu einer spiralförmigen Bewegung der zum magnetischen Feld normalen Komponente der Flugrichtung. Dabei stellen  $q$  die elektrische Ladung,  $\vec{v}$  die Geschwindigkeit des Teilchens sowie  $\vec{B}$  das magnetische Feld dar. Diese Art der Bewegung wird auch als Gyration bezeichnet. Da wie in Kapitel 2.2.4 erwähnt die Emission der Elektronen aus der Kalibrierquelle isotrop erfolgt, sind alle Emissionswinkel  $\theta$  zwischen  $0^\circ$  und  $90^\circ$  möglich. Dabei entspricht der Winkel  $0^\circ$  einer Flugrichtung der Elektronen longitudinal zum Magnetfeld, welche von der Lorentzkraft nicht beeinflusst werden. Mit steigendem Emissionswinkel steigt auch der Gyrationradius. Dieser Effekt ist ebenso von der kinetischen

<sup>1</sup>Hostaphan ist ein Markenname der Mitsubishi Polyester Film GmbH und bezeichnet ein zu Folien verarbeitetes und mit Metall bedampftes, biaxial orientiertes Polyethylenterephthalat.



**Abbildung 2.10:** Gyrationen der Elektronen bei einem Magnetfeld von 112 mT in Abhängigkeit des Emissionswinkels und der Emissionsenergie der verwendeten Kalibrierquellen. Ein Winkel von  $0^\circ$  entspricht der Emission in Richtung des Magnetfeldes.

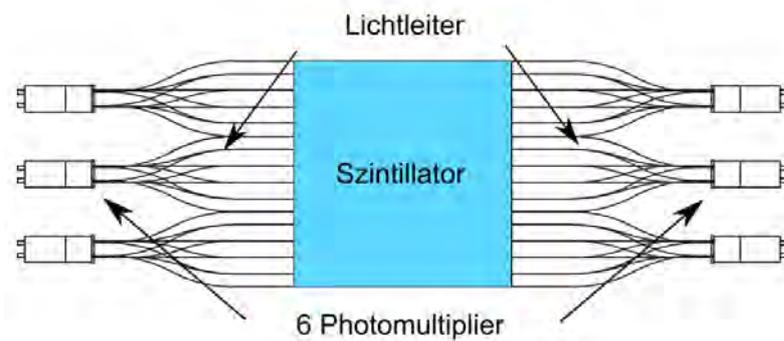
Energie  $E_{\text{kin}}$  des geladenen Teilchens und der Stärke des Magnetfeldes abhängig. Die mathematische Beschreibung der Gyrationen erfolgt mit der in Gleichung (2.18) angegebenen Formel:

$$r_g = \frac{\sqrt{E_{\text{kin}}^2 + 2E_{\text{kin}}m_e}}{cqB} \sin \theta \quad (2.18)$$

Abbildung 2.10 zeigt die Abhängigkeit der Gyrationen bei einem fixen Magnetfeld von 112 mT wie es am Ort des Detektors auftritt. Die eingezeichneten Energien entsprechen den Zerfallsenergien der angegebenen Kalibrierquellen.

### 2.4.3 Probenposition

Aus den mit der Simulationssoftware COMSOL Multiphysics erhaltenen Ergebnissen, sowie den obigen Überlegungen ergibt sich eine optimale Position der Kalibrierquellen an der Position mit den Koordinaten (310 mm, 275 mm, 170 mm) und einer Verkippung von  $27,5^\circ$  um die positive  $y$ -Achse [25]. Dabei sind das Koordinatensystem und der zugehörige Koordinatenursprung in Abbildung 2.3 angegeben. Zur Positionierung wurde ein Probenhalter verwendet,



**Abbildung 2.11:** Detektorsystem von PERKEO III, bestehend aus Szintillator, Lichtleitern und Photomultipliern.

der im Laufe dieser Arbeit immer weiter verbessert wurde. Die verschiedenen Versionen dieses Probenhalters und deren Vorteile für die Messungen werden in Kapitel 2.5.2 näher erläutert.

## 2.5 Verbesserung des Messsystems

Zur Verbesserung der PERKEO III Detektoreinheit steht eine Vielzahl von Freiheitsgraden zur Verfügung. In diesem Kapitel werden die verschiedenen durchgeführten Adaptierungen beschrieben, die sich vor allem mit dem optischen Teil des Detektors und der Probenpositionierung beschäftigen:

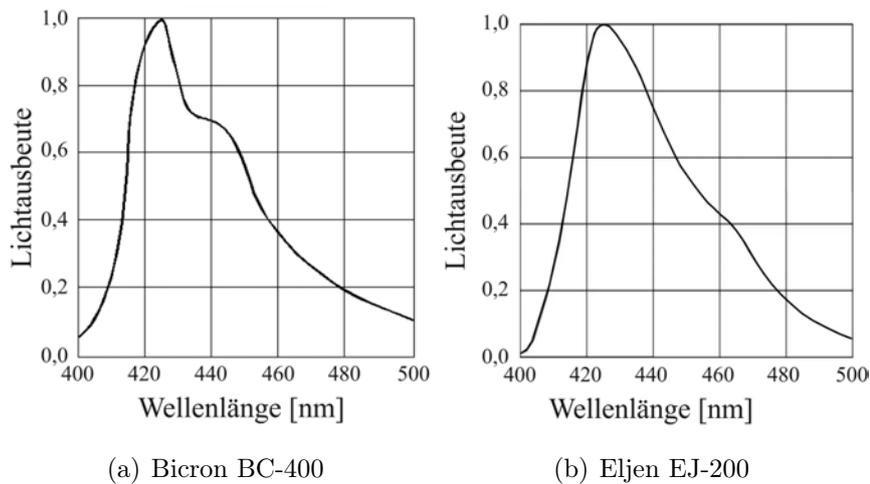
### 2.5.1 Detektor

Der Detektor besteht im Wesentlichen aus drei Elementen wie sie in Abbildung 2.11 dargestellt sind.

- Optische Komponenten, wie Szintillator und Lichtleiter,
- Photomultiplier zur Umwandlung der Photonen in ein elektrisches Signal,
- Elektronik zur Verstärkung und Verarbeitung der Photomultiplier-Signale.

#### Szintillator

Der Szintillator im Detektor von PERKEO III, vom Typ Bicron BC-400, stammte noch aus der Messung am ILL im Winter 2008/09. Da der Szin-



**Abbildung 2.12:** Vergleich der spektralen Eigenschaften des alten Bicron BC-400 mit dem neuen Eljen EJ-200 Szintillator. Die maximale Lichtausbeute liegt jeweils bei 425 nm. Die beiden Abbildungen stammen aus den Datenblättern der Hersteller [26, 27].

tillator aus dem Kunststoff Polyvinyltoluene besteht, und dieser natürlicher Alterung unterliegt, konnten mit freiem Auge unzählige feine Haarrisse festgestellt werden. Deshalb wurde zur Verbesserung des Energiespektrums ein neuer Szintillator aus Polyvinyltoluene von Eljen mit der Bezeichnung EJ-200 gekauft. Zum Vergleich der optischen Eigenschaften sind in Abbildung 2.12(a) und 2.12(b) die Photonenemissionsspektren des alten und des neuen Szintillators dargestellt. Man erkennt, dass die optischen Eigenschaften beider Szintillatoren nahezu identisch sind und die maximale Lichtausbeute bei ca. 425 nm liegt.

### Strahlenbelastung des Szintillators

Wenn Szintillatoren ionisierender Strahlung ausgesetzt werden, kommt es mit zunehmender Energiedosis  $D$  zur irreversiblen Verringerung der Lichtausbeute. Entsprechende Messungen wurden von Torrasi *et al.* [28] durchgeführt. Ob sich ein derartiger Effekt auf den PERKEO III Szintillator auswirken kann, mit dem längere Zeit am Hochflussreaktor des ILL in Grenoble experimentiert wurde, wird mit einer kurzen Abschätzung überprüft. Wenn wir von einem Szintillatorvolumen von  $978 \text{ cm}^3$  und einer Dichte von  $1,032 \text{ g/cm}^3$  ausgehen,

erhalten wir eine Masse von ca. 1 kg. Wobei lediglich die Hälfte des Detektors ausgeleuchtet wird.

Die Energien der Elektronen beim Zerfall des freien Neutrons bzw. von unseren Kalibrierquellen liegen unter 1 MeV. Dies entspricht einer Energie von ca.  $1,602 \cdot 10^{-13}$  J pro Elektron. Daraus ergibt sich pro Elektron eine Energiedosis von  $3,172 \cdot 10^{-13}$  J/kg.

Wir gehen davon aus, dass mit PERKEO III bei drei Zyklen zu je 50 Tagen am ILL durchgehend mit einer Zählrate von 50 kHz gemessen wurde. Dies ergibt maximal  $6,48 \cdot 10^{11}$  Elektronen, die auf den Szintillator aufgetroffen sind. Damit folgt die gesamte Energiedosis  $D$  zu

$$D = \frac{dE}{dm} = \frac{1}{\rho} \cdot \frac{dE}{dV} = 206 \text{ mGy.} \quad (2.19)$$

Da im Vergleich zur Belastung während der Messzyklen am ILL, bei den Messungen mit Kalibrierquellen die Zählraten deutlich geringer sind ( $< 10^3 \text{ s}^{-1}$ ), können diese vernachlässigt werden.

Die 2002 von Torrisi *et al.* [28] festgestellten Alterungserscheinungen durch ionisierende Strahlung haben bei PERKEO III keine Auswirkungen auf das Szintillatormaterial. Die erforderlichen Dosen, um eine Verringerung der Lichtausbeute zu erreichen, liegen weit oberhalb der tatsächlichen Belastung. Hierfür wären Belastungen im Bereich von MGy erforderlich.

### Optische Ankopplung

Um die Lichtimpulse aus dem Szintillator an die Photomultiplier weiterzuleiten, werden durchsichtige Lichtleiter aus Polymethylmethacrylat verwendet. Die Ankopplung der einzelnen Komponenten aneinander erfolgte bisher mittels Vakuurfett der Firma APIEZON. Dies ist ein orange gefärbtes Fett, welches für den Hochvakuumbereich geeignet ist. Da die Maxima des Photoemissionsspektrums des alten Bicron BC-400 Szintillators und des neuen Eljen EJ-200 bei 425 nm, also im blauen Bereich liegen, ist die Ankopplung mit einem Kontaktmittel wie Vakuurfett nicht sinnvoll.

Zur Verbesserung der Lichtausbeute wurde ein speziell dafür entwickeltes optisches Kontaktmittel von der Firma Eljen mit der Bezeichnung EJ-550 gekauft. Dieses farblose, durchsichtige Fett sorgt für eine verlustarme Übertra-

gung der Photonen. Beim Auftragen dieses Kontaktmittels ist mit besonderer Sorgfalt darauf zu achten, dass sich keine Luftblasen zwischen den Kontaktflächen bilden, da diese wiederum die Lichtübertragung verschlechtern.

### **Photomultiplier**

Die Photomultiplier oder auch Photoelektronenvervielfacher haben die Aufgabe die im Szintillator erzeugten Photonen in elektrisch messbare Signale zu konvertieren. Hierzu wird in Folge des Photoeffekts durch das Photon ein Elektron aus der Photokathode herausgeschlagen und durch die angelegte Hochspannung auf die erste Dynode beschleunigt. Dort schlägt das Elektron weitere Elektronen heraus, die wiederum auf die nächste Dynode beschleunigt werden. Nach mehreren Dynodenstufen wird schließlich das resultierende elektrische Signal an der Anode abgegriffen.

Auf Grund fertigungstechnischer Ungenauigkeiten kommt es bei den einzelnen Photomultipliern zu unterschiedlicher Signalstärke. Um diese Signalunterschiede auszugleichen ist es möglich durch Anpassung der Dynodenhochspannung die Verstärkung der einzelnen Photomultiplier abzugleichen.

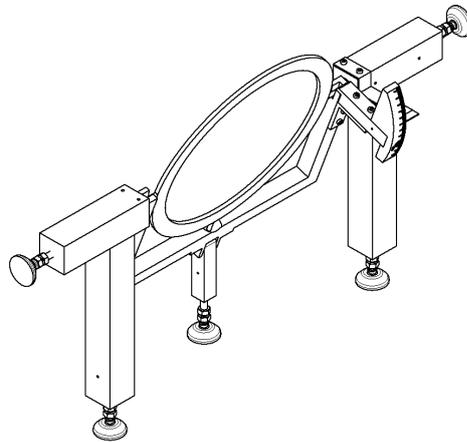
### **2.5.2 Probenhalter**

Die grundsätzliche Aufgabe des Probenhalters ist die exakte Positionierung der Kalibrierquellen an einer vorher, anhand von Simulationen, festgelegten Position innerhalb der Vakuumkammer der Detektoreinheit von PERKEO III. Eine Anforderung an den Probenhalter ist vor allem die Einsatzmöglichkeit unter Hochvakuum bei Drücken unter  $10^{-5}$  mbar. Des Weiteren muss es möglich sein, ohne Veränderung der Position, die Kalibrierquellen zu tauschen. Für alle Versionen des Probenhalters wurden die Kalibrierquellen auf Hostaphanfolien aufpipettiert und diese danach auf einen Metallring montiert. Diese Metallringe können mit wenigen Handgriffen in der Detektoreinheit von PERKEO III getauscht oder entfernt werden.

#### **Starrer Probenhalter**

Die ursprüngliche Version stellt eine mit Klemmfüßen versehene Aufnahme da, mit der es möglich ist die Metallringe mit den Kalibrierquellen an einer fixen

Position innerhalb der Vakuumkammer zu montieren. Dies ist in Abbildung 2.13 zu sehen. Darauf ist in der Mitte der Metallring und an den Enden der Füße die Klemmschrauben zum Befestigen des Probenhalters an den Innenwänden der Vakuumkammer zu sehen [29].

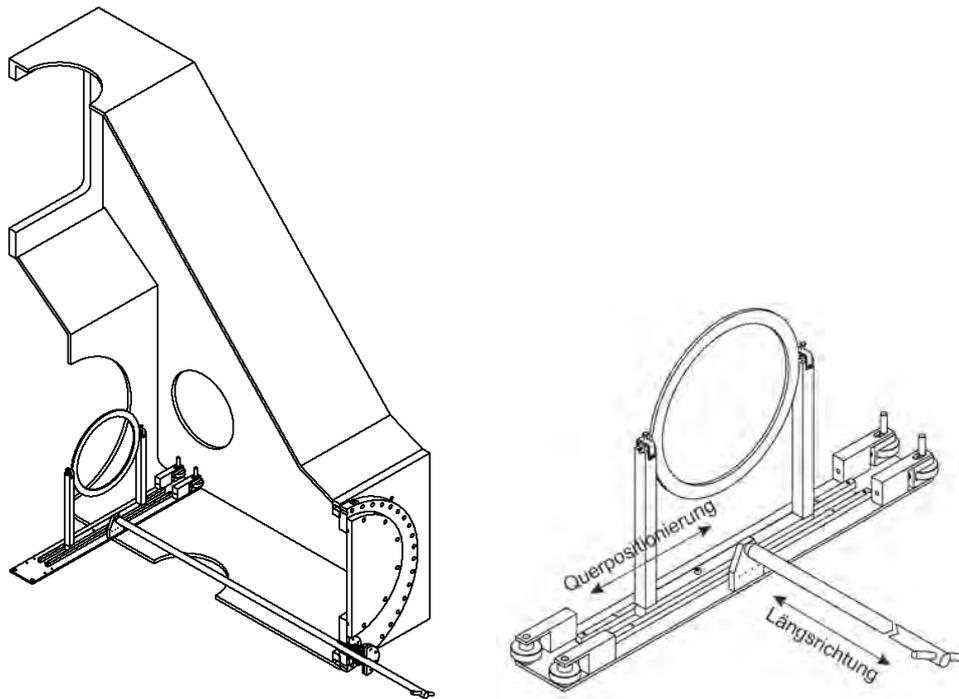


**Abbildung 2.13:** Starre Version des Probenhalters, wobei die rechts oben eingezeichnete Skala zur Winkeleinstellung nie realisiert wurde [29].

Bei dieser Version muss für den Tausch einer Kalibrierquelle bzw. um nach einer Messung eine Untergrundmessung durchführen zu können, das Vakuum gebrochen und die Kammer geöffnet werden. Dies nimmt auf Grund der Größe des Vakuumgefäßes mehrere Tage in Anspruch. Um diese langen Pumpzeiten zu vermeiden wurde eine weitere Version des Probenhalters umgesetzt.

### Verfahrbarer Probenhalter

Die zweite Version des Probenhalters umfasst alle Funktionen des Vorgängers und hat zusätzlich die Aufgabe, ohne Brechen des Vakuums, Untergrundmessungen durchführen zu können. Dafür wurde der Metallring auf eine Unterkonstruktion montiert, die durch eine aus der Vakuumkammer herausgeführte Stange an jede in Längsrichtung gewünschte Position verschoben werden kann. Dies ist in Abbildung 2.14 zu sehen. Am rechten Rand des Probenhalters sind bewegliche, federnd gelagerte Rollen montiert, mit denen eine Führung in Längsrichtung an den Innenwänden der Vakuumkammer erfolgt. Die Positionierung quer zur Längsrichtung sowie die Verkippung des Metallrings müssen im Vorfeld festgelegt und eingestellt werden. Auf dem linken Bild der Abbil-



(a) Schnitt durch die Vakuumkammer der Detektoreinheit von PERKEO III mit eingebautem Probenhalter.

(b) Detailansicht mit mittig eingebautem Metallring.

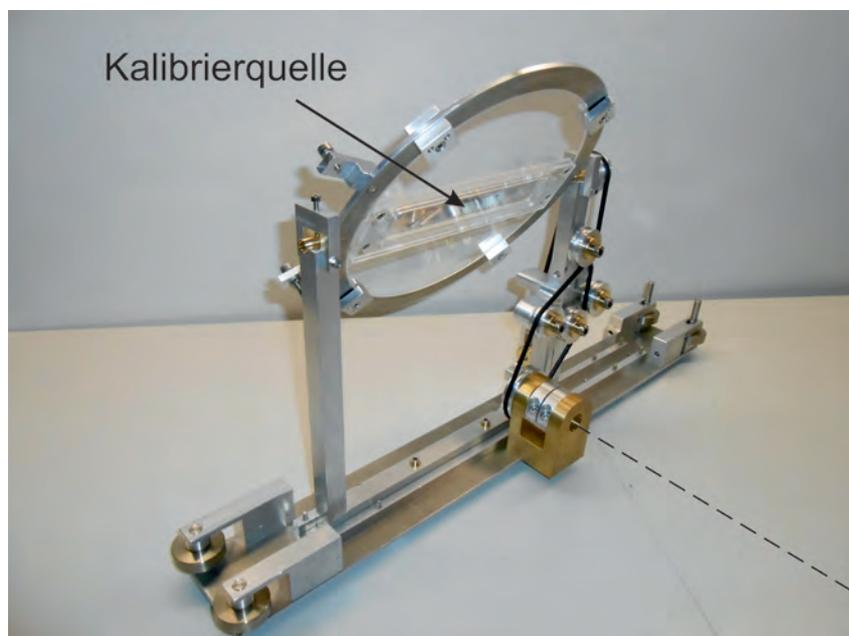
**Abbildung 2.14:** Verfahrbare Version des Probenhalters

Abbildung 2.14 zeigt den innerhalb der Vakuumkammer positionierten Probenhalter an der Position zur Untergrundbestimmung zu sehen.

Die Metallstange im unteren rechten Teil der Abbildung 2.14 dient zur Längsverschiebung des Probenhalters. Dafür wird die Stange durch eine entsprechende Adaptierung eines Flansches aus dem Vakuum herausgeführt. Mit dieser Konstruktion ist es möglich, ohne Brechen des Vakuums oder sonstiger Eingriffe in das System, in wenigen Sekunden die Kalibrierquelle an eine Stelle zu verfahren, von der keine Elektronen mehr den Detektor erreichen. Im Verlauf vieler Messungen stellte sich heraus, dass es sehr schwierig ist, nach Verfahren des Probenhalters an die Untergrundposition, wieder die Messposition exakt zu treffen. Entsprechende Abhilfe bringt ein weiterer Umbau des Probenhalters, wie er im nächsten Punkt beschrieben ist.

### Verfahr- und kippbarer Probenhalter

In der letzten hier vorgestellten Ausbaustufe des Probenhalters wurde dem verfahrbaren Probenhalter eine Kippmöglichkeit hinzugefügt, mit der es möglich ist, ohne Änderung der Position und ohne Brechen des Vakuums zwischen zwei verschiedenen Kalibrierquellen bzw. zwischen einer Quelle und einer Leerprobe zur Untergrundbestimmung zu wählen. Dafür wurde, wie in Abbildung 2.15 gezeigt, über diverse Umlenkrollen eine Verbindung zwischen der Stange zur Längspositionierung und dem Metallring auf dem sich die Kalibrierquelle befindet, mittels eines Riementriebs hergestellt.



**Abbildung 2.15:** Foto des verfahr- und kippbaren Probenhalters. Die strichlierte Linie zeigt die Einbauposition der Stange zur Positionierung in Längsrichtung [30].

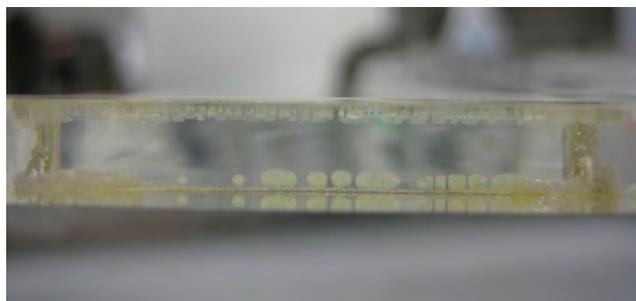
Dieser Riementrieb überträgt eine Drehbewegung der Stange auf den Metallring, dies ermöglicht es an der Vorder- und Rückseite des Metallrings unterschiedliche Kalibrierquellen anzubringen. Um zu verhindern, dass Elektronen beider Quellen zum Detektor gelangen, wird dazwischen eine 6 mm dicke Polymethylmethacrylat-Platte verwendet, um alle Elektronen abzuschirmen. Die Dimensionierung der Platte erfolgte durch Monte Carlo Simulationen [30]. Ausgelegt wurde sie für Elektronen bis leicht oberhalb der Maximalenergie von

$^{207}\text{Bi}$ , d.h. bis maximal 1000 keV.

### 2.5.3 Ausblick

Zur Verbesserung der Detektoreinheit von PERKEO III gibt es weitere Möglichkeiten, die im Rahmen dieser Arbeit nur noch vorbereitet werden konnten. Dazu zählt vor allem ein Tausch der gealterten Lichtleiter zwischen Szintillator und Photomultiplier. Diese bestehen aus mehreren zusammengeklebten, farblos transparenten Kunststoffteilen. Die Klebestellen sind, wie in Abbildung 2.16 zu sehen ist, mittlerweile schon stark vergilbt, wodurch keine einwandfreie Lichtübertragung möglich ist.

Eine weitere mögliche Verbesserung ist der Austausch von defekten Photomultipliern, da es bei zwei der insgesamt sechs verbauten Photomultipliern bereits bei niedrigen Versorgungsspannungen zu Überschlägen kommt. Im Rahmen dieser Arbeit wurden die notwendigen Vorbereitungen für diesen Tausch durchgeführt und die benötigten Spannungsteiler hergestellt. Ebenso wurden die Sockel zur Montage der Photomultiplier auf den Spannungsteiler gefertigt.



**Abbildung 2.16:** Seitenansicht eines Lichtleiters zwischen Szintillator und Photomultiplier mit starker Vergilbung der Kleberänder. Dadurch ist eine einwandfreie Lichtübertragung nicht mehr gewährleistet.

## 2.6 Messergebnisse

Die in dem vorangegangenen Kapitel beschriebenen Adaptierungen führten zu einer Verbesserung der Energiespektren der Elektronen. In den Abbildungen 2.17 bis 2.20 sind Vergleiche zwischen den Spektren vor und nach den Adaptierungen gezeigt. Es sind Messungen mit  $^{207}\text{Bi}$  und  $^{137}\text{Cs}$  zu sehen. Besonders

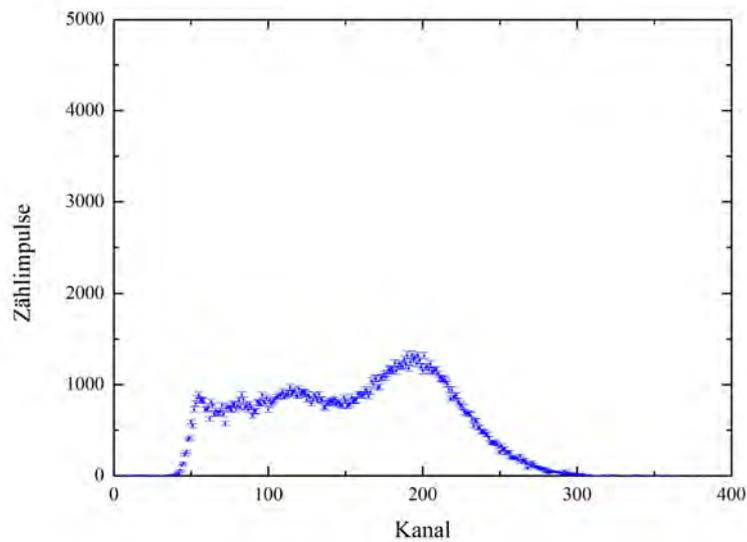
deutlich sind die Unterschiede zwischen Abbildung 2.17 und Abbildung 2.18 zu erkennen. Nach den Adaptierungen sieht man eine klare Trennung der beiden gaußverbreiterten Energielinien bei 503 keV und bei 992 keV sowie eine Detektierung der Augerelektronen im niederenergetischen Bereich.

Im Vergleich zu den  $^{207}\text{Bi}$  Spektren ist der Unterschied bei  $^{137}\text{Cs}$ , wie in den Abbildungen 2.19 und Abbildung 2.20 zu sehen, nicht ganz so offensichtlich zu erkennen. Bei einer Berechnung der Ausbeute ergibt sich jedoch, dass etwa 27% mehr Elektronen detektiert werden.

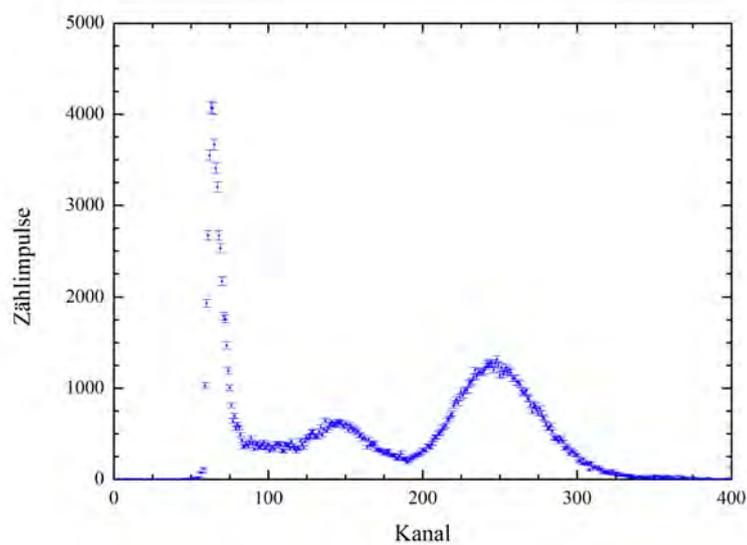
Im Wesentlichen wurden zur Verbesserung der Energiespektren folgende Adaptierungen und Kalibrierungen durchgeführt:

- Erneuerung des alten, rissigen Szintillators (siehe Kapitel 2.5.1),
- Verbesserung der optischen Lichtankopplung zwischen Szintillator, Lichtleiter und Photomultiplier (siehe Kapitel 2.5.1),
- Kalibrierung der Photomultiplier-Hochspannung,
- Fertigung eines Probenhalters, mit dem es möglich ist, ohne Brechen des Vakuums, an verschiedenen Positionen zu messen (siehe Kapitel 2.5.2),
- Erneuerung alter, fehlerhafter Elektronikbauteile in der Signalverarbeitung, wie z.B. NIM crate, FAN out und Abschlusswiderstände.

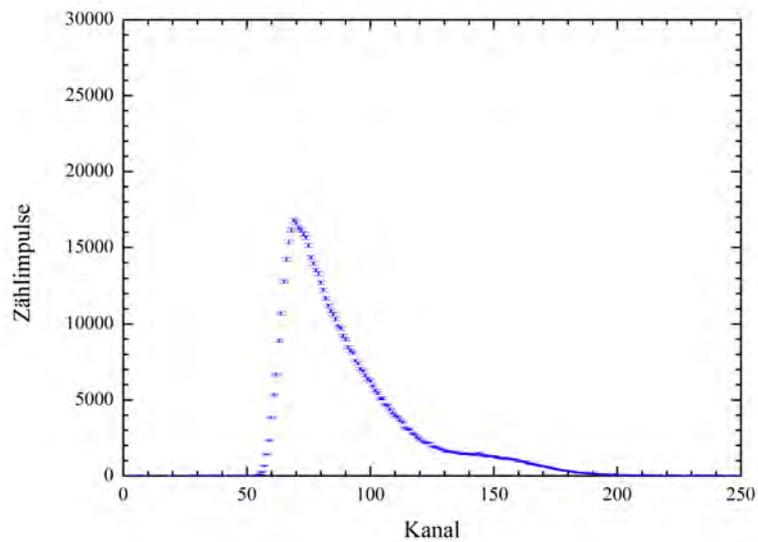
An Hand der Messungen mit den Kalibrierquellen konnte gezeigt werden, dass die Adaptierungen nicht nur zu einer deutlichen Verbesserung der Energiespektren geführt haben sondern auch die Ausbeute der detektierten Elektronen erhöht wurde. Zum besseren Verständnis der Energiespektren des PERKEO III Detektors werden im nächsten Kapitel Monte Carlo Simulationen zur Rückstreuung von Elektronen am Szintillator durchgeführt. Mit diesen Simulationen ist es möglich, die Verteilung der im Detektor deponierten Energie zu bestimmen.



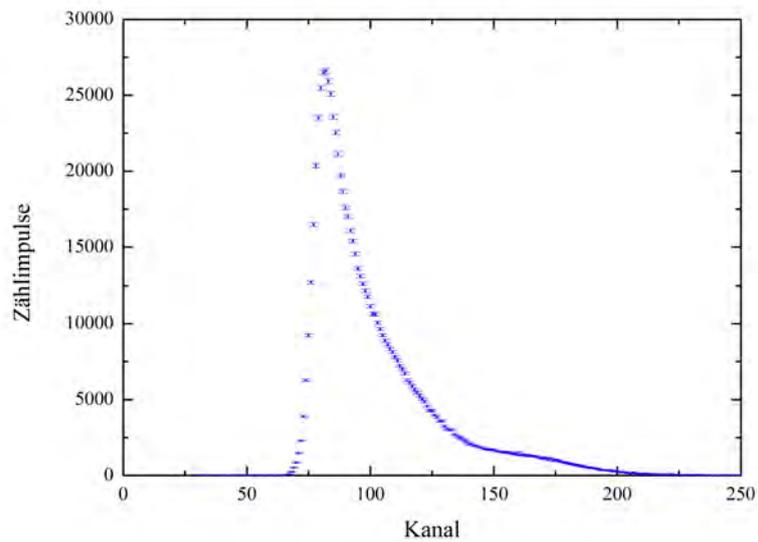
**Abbildung 2.17:** Messung vom 07. Februar 2012 mit einer  $^{207}\text{Bi}$ -Kalibrierquelle vor den Adaptierungen. Die Messzeit betrug 900 s. Der separat gemessene Untergrund wurde bereits abgezogen.



**Abbildung 2.18:** Messung vom 20. August 2012 mit einer  $^{207}\text{Bi}$ -Kalibrierquelle nach den Adaptierungen. Die Messzeit betrug 900 s. Der separat gemessene Untergrund wurde bereits abgezogen.



**Abbildung 2.19:** Messung vom 07. Mai 2012 mit einer  $^{137}\text{Cs}$ -Kalibrierquelle vor den Adaptierungen. Die Messzeit betrug 900 s. Der separat gemessene Untergrund wurde bereits abgezogen.



**Abbildung 2.20:** Messung vom 13. September 2012 mit einer  $^{137}\text{Cs}$ -Kalibrierquelle nach den Adaptierungen. Die Messzeit betrug 900 s. Der separat gemessene Untergrund wurde bereits abgezogen.



# Kapitel 3

## Rückstreusimulationen mit Monte Carlo Methoden

### 3.1 Motivation und Grundlagen

Eine Monte Carlo Simulation stellt ein computergestütztes Verfahren aus der Stochastik zur Durchführung von Zufallsexperimenten dar. Dabei wird versucht ein analytisch nicht oder nur schwer lösbares Problem mit Hilfe von Wahrscheinlichkeitsberechnungen numerisch zu lösen. Die Grundlage dafür bietet das Gesetz der großen Zahlen. Es gibt verschiedene Anwendungsgebiete, in denen Monte Carlo Methoden Anwendung finden. Das bekannteste Beispiel stellt die Berechnung der Zahl  $\pi$  dar. Ein weiteres Anwendungsgebiet von Monte Carlo Methoden ist die Berechnung von Teilchentrajektorien bei der Streuung an anderen Teilchen. Dabei ist eine analytische Berechnung auf Grund der Vielzahl an wechselwirkenden Teilchen in einem Festkörper in der Regel nicht möglich. Im Laufe der Jahre hat sich eine Vielzahl von Monte Carlo Codes etabliert, die es ermöglichen den Weg von z.B. Elektronen durch ein Material zu verfolgen. Diese Codes kann man sich zum besseren Verständnis der gemessenen Konversionselektronen-Spektren zunutze machen.

Um die Energieauflösung von Szintillationsdetektoren, wie sie bei PERKEO III eingesetzt werden, verbessern zu können, wird mithilfe von Elektronenrückstreusimulationen bestimmt, wieviel Energie im Detektor deponiert und wieviel wieder aus dem Szintillator zurückgestreut wird und somit nicht detektiert werden kann. Bei früheren Experimenten mit PERKEO III [17] konn-

ten die rückgestreuten Elektronen vom zweiten Detektor zeitversetzt gemessen werden. Dieses Verfahren steht bei Instrumenten wie PERC nicht mehr zur Verfügung. Mit Hilfe von Rückstreuosimulationen ist es möglich die Winkel- und Energieverteilung dieser Elektronen zu berechnen. Für theoretische Betrachtungen der Rückstreuung der Elektronen eignen sich Monte Carlo Methoden. Gängige Programme zur Simulation von Elektronentrajektorien sind GEANT4 [31], ETRAN [32] und PENELOPE [33]. Diese Codes finden vor allem in der Hochenergiephysik bzw. in der Medizin Anwendung. Eine entsprechende Adaptierung für die Niederenergiephysik würde den Rahmen einer Diplomarbeit sprengen. Außerdem gibt es bereits entsprechend adaptierte Monte Carlo Codes, die in anderen Bereichen der Niederenergiephysik eingesetzt werden. Dazu zählen Codes wie CASINO [34] und pyPENELOPE [35].

Um Aussagen über die Rückstreuung von Elektronen am Szintillator treffen zu können, muss zuerst verifiziert werden, dass die Berechnungen mit Hilfe der verwendeten Programme auch mit verschiedenen Messungen bzw. der zugrundeliegenden Physik übereinstimmen. Als erstes wurde CASINO, in der Version 2.48 evaluiert.

- Erfordert keine Anpassungen des Quellcodes, da der Code bereits für Elektronen der betrachteten Energie vorliegt,
- Einfach zu bedienende grafische Benutzeroberfläche, wie sie in Abbildung 3.1 zu sehen ist,
- Bietet die Möglichkeit zum Vergleich mit Publikationen, zu anderen Simulationen und Messungen, wie z.B von Wietfeldt *et al.* [36] bzw. Martin *et al.* [37].

## 3.2 CASINO

CASINO „monte **C**ARlo **S**imulation of electro**N** trajectory in **s**OLids“ ist eine in C++ programmierte Software, zur Simulation von Trajektorien von niederenergetischen Elektronen mit einer Energie größer 50 eV [34]. Die Software wurde für die theoretische Beschreibung von Transmissionselektronenmikroskopen entwickelt. Zur Berechnung der Trajektorien verwendet CASINO einen

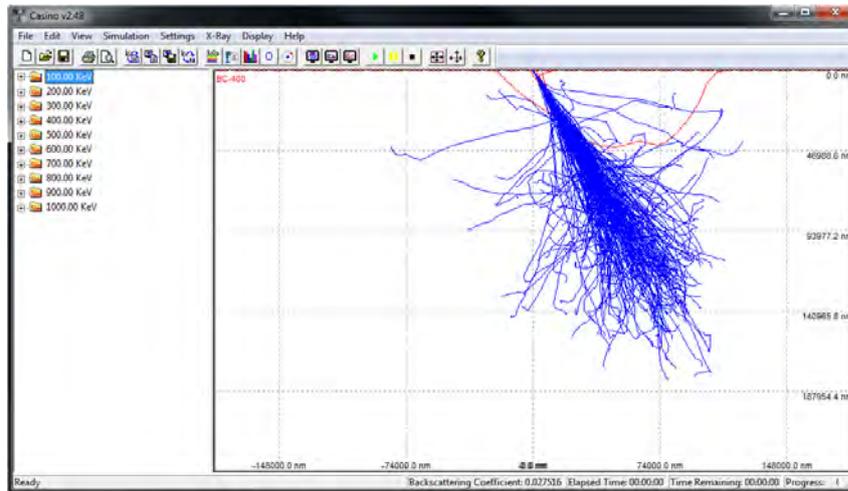


Abbildung 3.1: Grafische Benutzeroberfläche von CASINO 2.48.

Monte Carlo Code, bei dem sowohl die Wegstrecke der Elektronen im Targetmaterial als auch der Streuwinkel errechnet wird.

### Berechnung der Elektronentrajektorien

Für die Simulation der Trajektorien können in den Softwareeinstellungen verschiedene physikalische und mathematische Modelle ausgewählt werden. Für diese Arbeit wird als physikalisches Modell, für den totalen Streuwirkungsquerschnitt, Mott-Streuung verwendet. Andere relativistische Effekte werden nicht berücksichtigt. Weiters wird inelastische Streuung vernachlässigt. Als Zufallszahlengenerator wird der von Press *et al.* [38] verwendet.

Die Distanz  $L$  zwischen zwei Stößen wird durch die Formel

$$L = - \left[ \rho N_0 \sum_{i=1}^n \frac{C_i \sigma_{\text{el}}^i}{A_i} \right]^{-1} \log(R) [\text{nm}] \quad (3.1)$$

beschrieben. Dabei sind  $\rho$  die Dichte des betrachteten Elements in ( $\text{g}/\text{cm}^3$ ),  $N_0$  die Avogadrokonstante,  $C_i$  und  $A_i$  die Gewichtsverteilung und das atomare Gewicht und  $\sigma_{\text{el}}^i$  der totale Streuwirkungsquerschnitt des betrachteten Elements  $i$ , der für alle chemischen Elemente in CASINO v2.48 bereits implementiert ist.  $R$  ist die erzeugte Zufallszahl zwischen 0 und 1 [34].

### 3.2.1 Modellbildung

Die verwendete CASINO Version 2.48 ermöglicht es, zweidimensionale Modelle von Proben zu erstellen. Dabei können sowohl verschiedene Schichtdicken (auch mehrere Layer) als auch Substrate mit unendlicher Ausdehnung modelliert und simuliert werden. Die chemische Zusammensetzung der betrachteten Layer bzw. des Substrats, werden durch Eingabe der chemischen Summenformel (z.B. Fe<sub>3</sub>O<sub>2</sub> für Fe<sub>3</sub>O<sub>2</sub>) festgelegt. Dabei wird nicht die Art der chemischen Bindung berücksichtigt, sondern lediglich eine homogene Verteilung angenommen.

### 3.2.2 Wahl der Parameter

Da wir in weiterer Folge Elektronenrückstreuung unter verschiedenen Einfallswinkeln und mit verschiedenen Einfallenergien vergleichen wollen, wurden die physikalischen Parameter für alle Berechnungen gleich gewählt. Dazu zählen:

- Zufallszahlengenerator nach Press *et al.*,
- Mott-Streuung als physikalisches Modell für die Wechselwirkung der Elektronen mit dem Szintillatormaterial,
- Polyvinyltoluene (C<sub>10</sub>H<sub>11</sub>) als Target-Material,
- Targetdicke von 5mm,
- kinetische Einfallenergie der Elektronen zwischen 100 keV und 1000 keV in Schritten von 100 keV,
- Auftreffwinkel der Elektronen zwischen 0° und 89° zur Oberflächennormale des Szintillators in 15° Schritten.

Im Laufe der Simulationen hat sich gezeigt, dass für verschiedene zu bestimmende Größen eine unterschiedliche Wahl der Teilchenzahl sinnvoll sein kann. Folgende Teilchenzahlen wurden gewählt:

- 10<sup>5</sup> für die Berechnung der Rückstreuoeffizienten,
- 10<sup>6</sup> für die Berechnung der Rückstreuwinkel,
- 10<sup>7</sup> für die Berechnung der Energieverteilung der rückgestreuten bzw. der transmittierten Elektronen.

## Elektronenstreuung

Als physikalisches Streumodell stehen im Wesentlichen zwei Modelle, Rutherfordstreuung [39] und Mottstreuung [40], zur Auswahl.

Rutherfordstreuung beschreibt die Streuung von spinlosen Teilchen am Coulombfeld unter Vernachlässigung relativistischer Effekte. Der differentielle Wirkungsquerschnitt der Rutherfordstreuung ist durch

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{\text{Ruth}} = \left[ZZ'\alpha_f\hbar c\frac{2m}{\vec{q}^2}\right]^2 \quad (3.2)$$

gegeben, wobei  $Z$  und  $Z'$  die Kernladungszahlen des gestreuten Teilchens und Atomkerns,  $\alpha_f$  die Feinstrukturkonstante,  $m$  die Masse des gestreuten Teilchens und  $\vec{q}$  den Impuls zwischen gestreutem Teilchen und Atomkern angeben.

In der Quantenelektrodynamik wird der differentielle Streuwirkungsquerschnitt, der auch die Helizität der Teilchen berücksichtigt, für relativistische, spinbehaftete Elektronen zu

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{\text{Mott}} = \left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{\text{Ruth}} \left(1 - \beta^2 \sin^2 \frac{\theta}{2}\right) \quad (3.3)$$

berechnet. Dieses Modell wird als Mottstreuung bezeichnet. Der erste Term ist durch Gleichung (3.2) gegeben. Im zweiten Term sind  $\beta = \frac{v}{c}$  und  $\theta$  der Streuwinkel.

### 3.2.3 Simulationsergebnisse

Wie bereits erklärt wurden Simulationen durchgeführt um die Rückstreuung der Elektronen vom Szintillator des PERKEO III Detektors abzuschätzen.

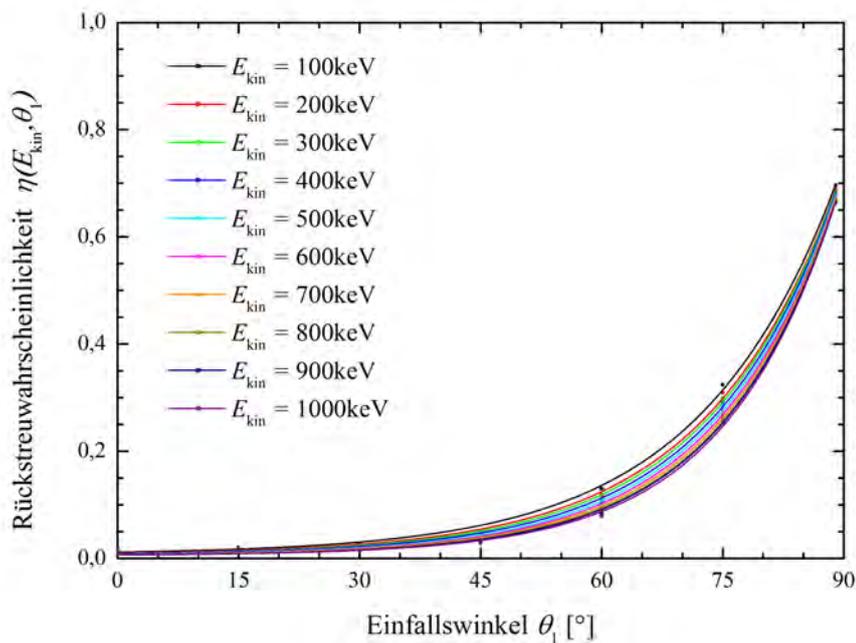
Dafür werden in weiterer Folge die Energien der Elektronen bestimmt, die aus dem Detektor zurückgestreut werden. Diese Energien stehen damit nicht mehr zur Detektion zur Verfügung.

## Rückstreukoeffizient

Für die Rückstreukoeffizienten  $\eta$  der Elektronen aus dem Szintillatormaterial ergibt sich eine starke Abhängigkeit vom Einfallswinkel<sup>2</sup>  $\theta_1$  und eine leichte

<sup>2</sup>Die in diesem und den folgenden Kapiteln angegebenen Winkeln  $\theta_1$  und  $\theta_2$  sind die Einfalls- und Rückstreuwinkel der Elektronen bei Streuung am Szintillator. Sie entsprechen

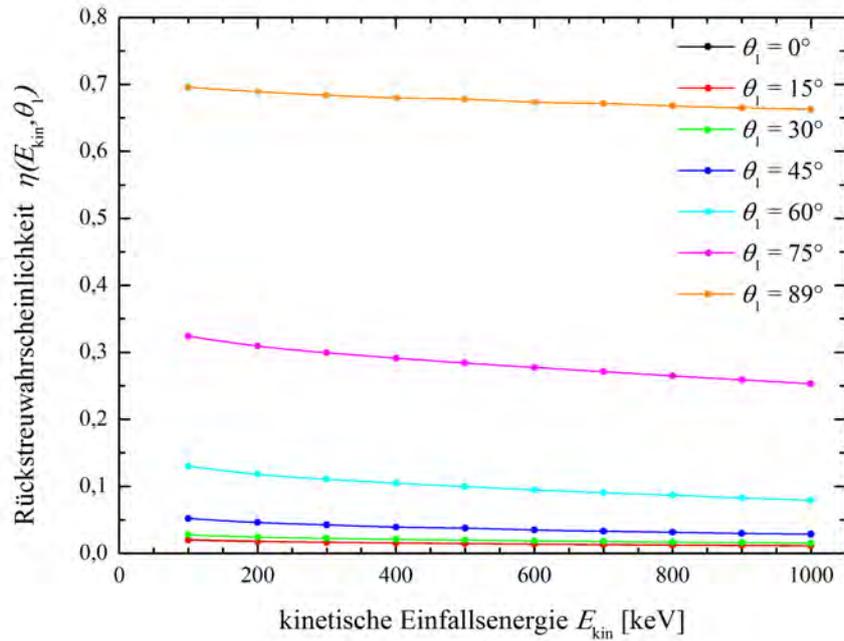
Abnahme mit der Energie. Dieser Zusammenhang ist in den Abbildungen 3.2 und 3.3 sowie in Tabelle A.2 zu sehen.



**Abbildung 3.2:** Rückstreukoeffizienten für Elektronen in Abhängigkeit des Einfallswinkels für kinetische Energien zwischen 100 keV und 1000 keV. Bei niedrigen Winkeln ergeben sich auch niedrige Rückstreukoeffizienten von 1-2%. Bei höheren Winkeln ergeben sich entsprechend höhere Rückstreukoeffizienten bis zu etwa 70%. Die Punkte entsprechen den Werten aus den Simulationen und die durchgezogenen Linien den gefitteten Kurven nach Gleichung (3.4).

---

nicht den Polarwinkeln aus Kapitel 2.



**Abbildung 3.3:** Rückstreuoeffizienten für Elektronen in Abhängigkeit der kinetischen Energie für Einfallswinkel zwischen  $0^\circ$  und  $89^\circ$ . Die durchgezogene Linie stellt keinen Fit dar, sondern dient lediglich der besseren Veranschaulichung.

Wenn man die Ergebnisse für die winkelabhängigen Rückstreuoeffizienten aus Abbildung 3.2 mit der von Wietfeldt *et al.* [36] bestimmten Funktion

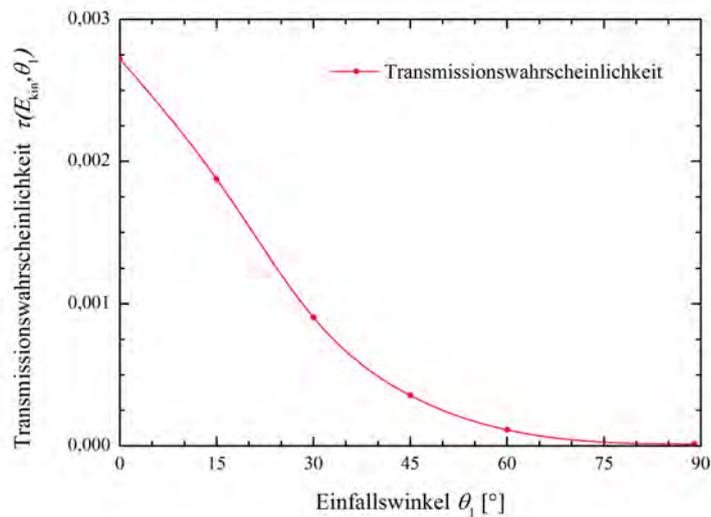
$$\eta(\theta_1) = A_0 + A_1 e^{A_2 \theta_1} \quad (3.4)$$

fittet, kommt man auf die in Tabelle A.3 aufgelisteten Koeffizienten für  $A_0$ ,  $A_1$  und  $A_2$ .

Wie man aus Gleichung (3.4) erkennt, wird der Rückstreuoeffizient demnach in guter Näherung durch eine Exponentialfunktion beschrieben. Die Residuen in Tabelle A.3 beschreiben die Abweichung der Simulationsergebnisse von der gefitteten Funktion nach Gleichung (3.4). Alle Residuen liegen unter  $3,3 \cdot 10^{-4}$ .

### Transmissionskoeffizient

Auf Grund der Materialdicke des Szintillators von 5 mm kommt es nur bei Elektronen mit Einfallsenergien von 1000 keV zu Transmission. Dabei ergibt sich bei einem Einfallswinkel von  $0^\circ$  der maximale Transmissionskoeffizient von 0,27 %. Mit steigendem Einfallswinkel verringert sich die Transmissionswahrscheinlichkeit entsprechend Abbildung 3.4. Die simulierten Werte sind in Tabelle A.4 aufgelistet. Da die Transmissionswahrscheinlichkeit weit unter der Rückstreuwahrscheinlichkeit liegt, ist es nicht erforderlich, die Transmission weiter zu berücksichtigen. Der Maximalwert der Transmissionswahrscheinlichkeit beträgt bei  $0^\circ$ , 25% der Rückstreuwahrscheinlichkeit.

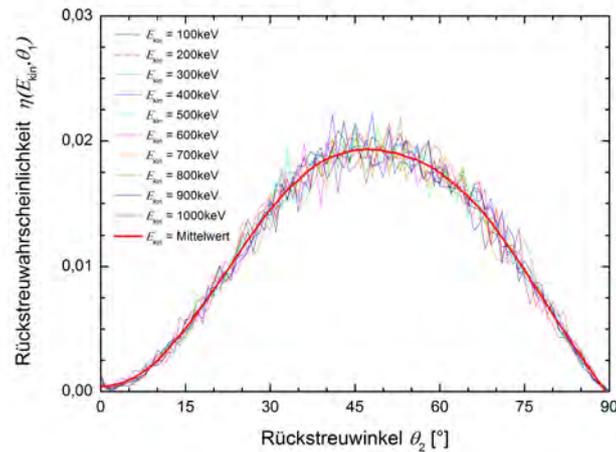


**Abbildung 3.4:** Transmissionskoeffizienten für Elektronen in Abhängigkeit des Einfallswinkel zwischen  $0^\circ$  und  $89^\circ$ , bei einer Einfallsenergie von 1000 keV. Die durchgezogene Linie stellt keinen Fit dar, sondern dient lediglich der besseren Veranschaulichung.

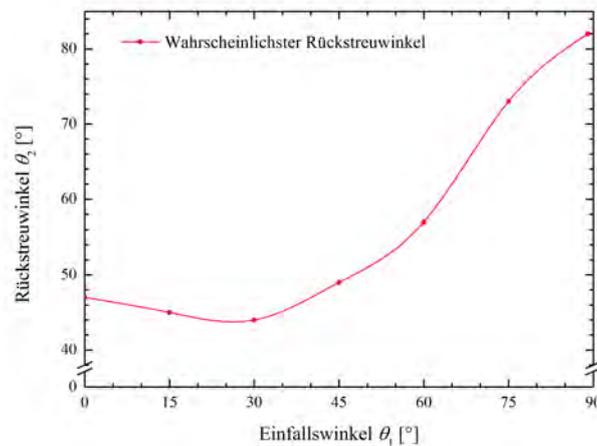
### Rückstreuwinkel

Der Winkel  $\theta_2$  der aus dem Szintillator rückgestreuten Elektronen hängt in ähnlicher Weise wie der Rückstreuoeffizient stark vom Einfallswinkel ab. Die Winkelverteilung der rückgestreuten Elektronen ist am Beispiel einer Monte Carlo Simulationen für einen Einfallswinkel von  $0^\circ$  in Abbildung 3.5 dargestellt.

In Abbildung 3.6 ist der wahrscheinlichste Rückstreuwinkel in Abhängigkeit des Einfallswinkels aufgetragen, wobei dieser keinem präzisen Wert entspricht, sondern den häufigsten Rückstreuwinkel angibt.

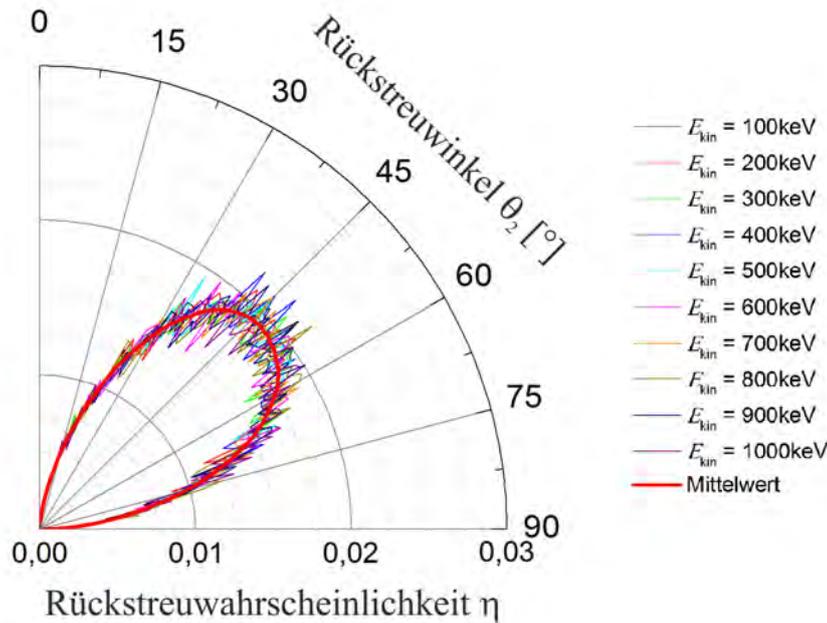


**Abbildung 3.5:** Kartesische Darstellung der Winkelverteilung der Rückstreuwahrscheinlichkeit für einen Einfallswinkel von  $0^\circ$ .



**Abbildung 3.6:** Wahrscheinlichster Rückstreuwinkel in Abhängigkeit vom Einfallswinkel, gemittelt aus allen simulierten Einfallswinkelenergien. Die durchgezogene Linie stellt keinen Fit dar, sondern dient lediglich der besseren Veranschaulichung.

Die Simulationen zeigen, dass die Rückstreuwahrscheinlichkeit primär vom

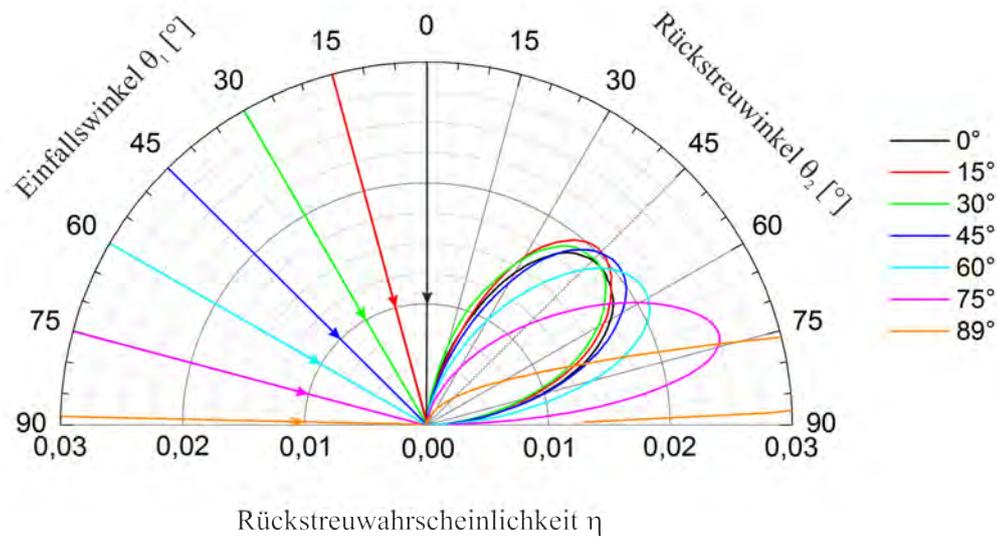


**Abbildung 3.7:** Polare Darstellung der Winkelverteilung der Rückstreuwahrscheinlichkeit bezogen auf den Raumwinkel für einen Einfallswinkel von  $0^\circ$ .

Einfallswinkel abhängt. Die Abhängigkeit von der Energie ist aus diesen Simulationen nicht ersichtlich, da sie zwischen 100 keV und 1000 keV nur innerhalb der statistischen Streuung von 0,005 variieren. Dies ist ebenfalls in Abbildung 3.5 zu sehen. Eine weitere Reduktion des statistischen Fehlers steht in keiner Relation zur Erhöhung der Rechenzeit, da für die Berechnung der Winkelverteilung der rückgestreuten Elektronen bereits eine Teilchenzahl von  $10^7$  verwendet wurde, was einer Rechenzeit von ca. 40 Stunden pro Winkel entspricht.

Aus oben genannten Gründen ist es möglich, die Winkelverteilung der rückgestreuten Elektronen für jeweils einen Winkel aus allen simulierten Energien zu mitteln. Dies ist in Abbildung 3.6 zu sehen.

Wie jedoch ebenfalls in Abbildung 3.5 zu sehen ist, ergibt sich bei einem Einfallswinkel von  $0^\circ$  ein mittlerer Rückstreuwinkel ungleich  $0^\circ$ . Dies ist noch deutlicher zu sehen, wenn man das selbe Ergebnis in einer polaren Darstellung zeichnet, welches in Abbildung 3.7 veranschaulicht ist. Eine Darstellung aller simulierten Winkel, zwischen  $0^\circ$  und  $89^\circ$  in Schritten von  $15^\circ$ , ist in Abbildung 3.8 zu sehen.

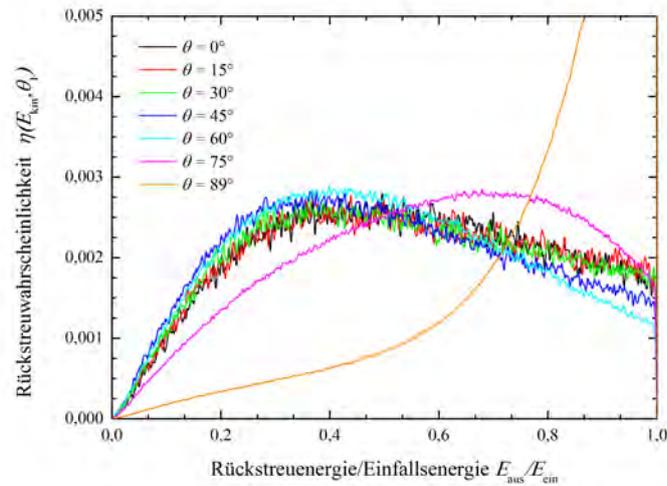


**Abbildung 3.8:** Polare Darstellung der Winkelverteilung der Rückstreuwahrscheinlichkeit bezogen auf den Raumwinkel für Einfallswinkel zwischen  $0^\circ$  und  $89^\circ$  in Schritten von  $15^\circ$ , gemittelt aus allen simulierten Einfallsenergien.

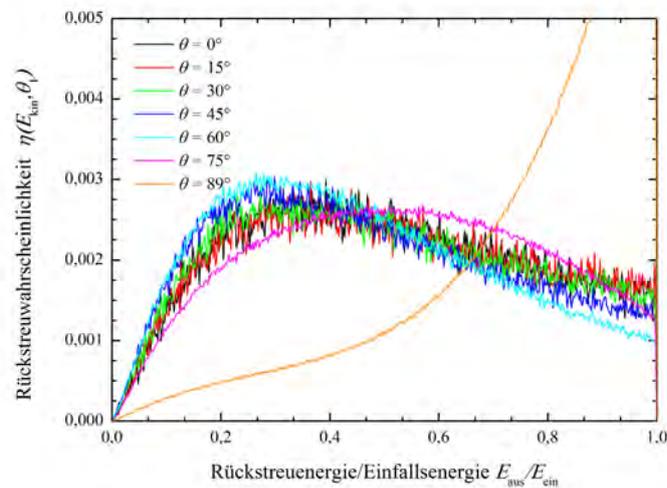
### Rückstreueenergie

In den Abbildungen 3.9 und 3.10 sind am Beispiel von 500 keV und 1000 keV die Rückstreuwahrscheinlichkeiten in Abhängigkeit der Rückstreueenergie aufgetragen. Dabei ist zur besseren Vergleichbarkeit die Rückstreueenergie jeweils auf die Einfallsenergie normiert. In den Abbildungen A.2(a) bis A.2(j) sind zum Vergleich alle simulierten Energien dargestellt.

Wir haben bereits gezeigt, dass die Rückstreuwahrscheinlichkeit mit Erhöhung des Einfallswinkels exponentiell zunimmt. Ein derartiger Zuwachs ist in Abbildung 3.9 und 3.10 nicht zu sehen. Dies ist auf die Normierung durch CASINO auf Eins zurückzuführen.



**Abbildung 3.9:** Energieverteilung der Rückstreuwahrscheinlichkeit für verschiedene Einfallswinkel bei einer Einfallenergie von 500 keV. Auf der  $x$ -Achse ist die Rückstreuenergie auf die Einfallenergie normiert. Die  $y$ -Achse zeigt die Rückstreuwahrscheinlichkeit entsprechend der Normierung auf Eins durch CASINO.



**Abbildung 3.10:** Energieverteilung der Rückstreuwahrscheinlichkeit für verschiedene Einfallswinkel bei einer Einfallenergie von 1000 keV. Auf der  $x$ -Achse ist die Rückstreuenergie auf die Einfallenergie normiert. Die  $y$ -Achse zeigt die Rückstreuwahrscheinlichkeit entsprechend der Normierung auf Eins durch CASINO.

### 3.2.4 Résumé

Da die CASINO Simulationen unter bestimmten Bedingungen physikalisch fragwürdige Ergebnisse lieferten, wurden weitere Simulationen mit alternativen Monte Carlo Codes durchgeführt, wie in Kapitel 3.3 beschrieben. Die Gründe dafür, CASINO nicht weiter zu verwenden sind:

- Die Rückstreuwinkel sind aus physikalischen Überlegungen zu hoch, oder die Achsen falsch skaliert, wie in Kapitel 3.4 noch näher erklärt wird,
- Es gibt unzureichend Informationen über die Interpretation der Simulationsergebnisse bzw. keinen Support durch die Entwickler.

Lediglich mit Simulationen aus anderen Publikationen konnten Übereinstimmungen im Verlauf der Winkelverteilung der rückgestreuten Elektronen gefunden werden. Dies bezieht sich auf die Simulationen mit GEANT4 von Roick [41] und die Simulationen mit ETRAN von Wietfeldt *et al.* [36]. Zuletzt genannte zeigen auch eine Übereinstimmung mit dem simulierten Verlauf der Energieverteilung.

## 3.3 pyPENELOPE

Ebenso wie CASINO ist pyPENELOPE (**P**enetration and **ENERgy** **LO**ss of **P**ositrons and **E**lectrons) eine auf der Monte Carlo Methode basierende Software zur Simulation von Elektronentrajektorien in Festkörpern. Verwendet wurde die Version 0.2.10.

Grundlage von pyPenelope ist der von Salvat *et al.* [33] entwickelte Monte Carlo Code PENELOPE. Mit pyPENELOPE ist es möglich, Elektronenenergien zwischen 50 eV und 1 GeV zu simulieren. Die Teilchentrajektorien werden beginnend mit einer vom Benutzer eingegebenen Anfangsenergie bis zu einer ebenso definierten Absorptionsenergie berechnet. Wie der Name von pyPENELOPE schon andeutet, wurde der Quellcode in Python geschrieben, im Gegensatz zum PENELOPE-Quellcode, der in Fortran geschrieben wurde. Zur Simulation wurde das in pyPENELOPE implementierte Softwarepaket PENEPMA verwendet.

Für die Eingabe der Simulationsparameter, wie Materialform und -zusammensetzung, Elektronenenergien und dergleichen steht eine grafische Benutzeroberfläche zur Verfügung, wie sie in Abbildung 3.11 zu sehen ist.

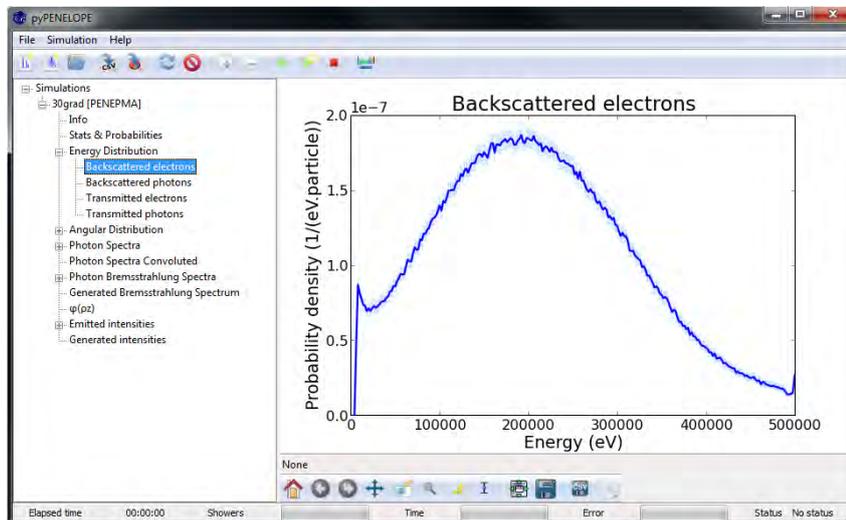


Abbildung 3.11: Grafische Benutzeroberfläche von pyPENELOPE 0.2.10.

### 3.3.1 Physikalische Grundlagen

Von pyPENELOPE werden folgende Wechselwirkungsmechanismen berücksichtigt:

- Elastische Streuung von Elektronen und Positronen, welche numerisch mit dem Programm ELSEPA aus den Dirac-Partialwellen berechnet wird [42],
- Inelastische Kollision von Elektronen und Positronen,
- Elektronen-Stoßionisation,
- Emission von Bremsstrahlung, Annihilation, Rayleigh-Streuung, Comptonstreuung, photoelektrische Absorption und Elektron-Positron-Paarbildung.

Solange die Energie der simulierten Primär- und Sekundärteilchen größer als die angegebene Absorptionsenergie ist, werden alle oben genannten Wechselwirkungen berechnet. Dabei werden die Sekundärteilchen entweder durch

direkte Wechselwirkung (wie bei inelastischer Streuung und Bremsstrahlung) oder durch indirekte Wechselwirkung (wie bei Augerelektronen und Röntgenstrahlung) erzeugt. Bei den indirekten Prozessen betrachtet PENELOPE die Emission aus der K-, L- oder M-Schale, was für das von uns betrachtete Material völlig ausreicht, da Polyvinyltoluene keine Elektronen außerhalb dieser Schalen besitzt.

### 3.3.2 Modellbildung

Für das Targetmaterial kann aus dem Periodensystem jedes Element ausgewählt werden. Es ist auch, wie in Kapitel 3.2.1 beschrieben, möglich chemische Zusammensetzungen durch Angabe der chemischen Summenformel anzugeben. Dabei werden lediglich Wechselwirkungen mit freien Atomen berechnet. Die Wirkungsquerschnitte von Molekülen werden durch Summation der Einzelquerschnitte approximiert. Ebenso können Substrate und Multilayer-Materialien eingegeben werden. Es ist zwar nur die Eingabe von zweidimensionalen Targets möglich, die Simulation erfolgt jedoch trotzdem in drei Dimensionen.

### 3.3.3 Wahl der Parameter

In pyPENELOPE ist es möglich, wie in CASINO verschiedene Simulationsparameter zu variieren. Dazu zählen

- Startparameter des Elektronenstrahls, wie Winkel, Energie und Durchmesser,
- Materialeigenschaften,
- Absorptionsenergie und Streuparameter.

#### Elektronenparameter

Bei den Simulationen mit CASINO hat sich bereits gezeigt, dass die Einfallenergie nur einen geringen Beitrag zu Größen wie dem Rückstreuoeffizienten hat. Deshalb werden bei den weiteren Rechnungen mit pyPENELOPE nur die für  $^{207}\text{Bi}$  relevanten Energien von 500 keV und 1000 keV betrachtet.

Dies sind zwar nicht die tatsächlichen Energielinien von  $^{207}\text{Bi}$ , werden aber bewusst für einen Vergleich der Simulationsergebnisse mit CASINO gewählt. Der kleine Energieunterschied wirkt sich auf Grund der schwachen Energieabhängigkeit des Rückstreuoeffizienten quasi nicht auf die Simulationsergebnisse aus. Bei der Änderung des Einfallswinkels, welcher dem Winkel zwischen dem Elektronenstrahl und der Normalen zur Targetoberfläche entspricht, wird bei pyPENELOPE jedoch nicht der Winkel der einfallenden Elektronen gekippt, sondern, wie in Abbildung 3.12 zu sehen ist, das Target selbst. Dies verkompliziert die Auswertung der Simulationsergebnisse.

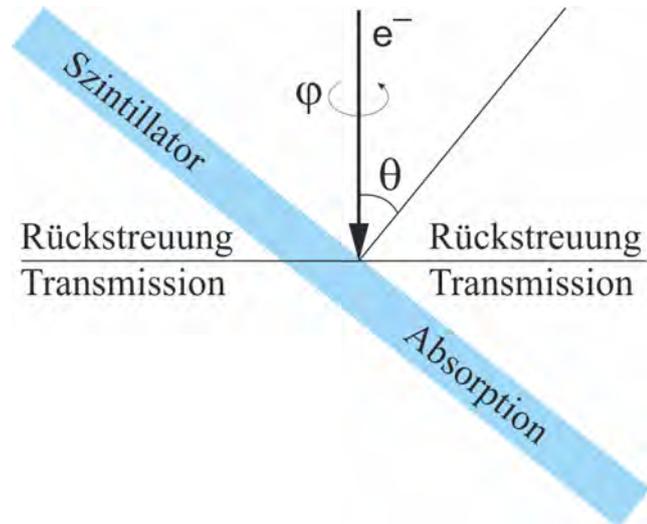
### 3.3.4 Simulationsergebnisse

Es ist wie bei CASINO mit pyPENELOPE möglich, die für uns relevanten Ergebnisse, den Rückstreuoeffizienten, die Winkelverteilung und die Energieverteilung der rückgestreuten Elektronen zu simulieren.

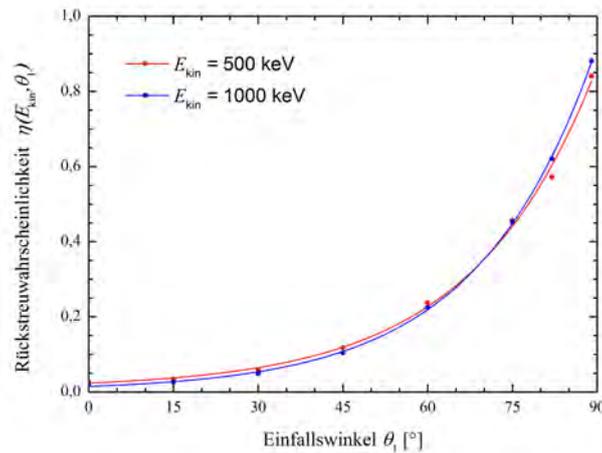
#### Rückstreuoeffizient

Da in pyPENELOPE nicht die einfallende Trajektorie sondern das Target gekippt wird, werden je nach gewähltem Kippwinkel unterschiedlich viele der rückgestreuten Elektronen den Transmittierten zugeordnet. Das heißt, ein Elektron wird nur dann als rückgestreut angesehen, wenn sich seine Flugrichtung gegenüber dem Einfall um mehr als  $90^\circ$  ändert. Eine graphische Erklärung ist in Abbildung 3.12 zu sehen. Deshalb dürfen nicht die von pyPENELOPE in der graphischen Benutzeroberfläche angegebenen Werte für die Rückstreu- und Transmissionskoeffizienten verwendet werden. Die korrekten Daten muss man aus den Rohdaten der Simulationen extrahieren. Für unsere Überlegungen genügt es, anstelle eines Materials endlicher Ausdehnung nur Substrate mit unendlicher Dicke zu betrachten, bei denen es nicht zu Transmission kommen kann. Dann errechnet sich die Rückstreuwahrscheinlichkeit aus der Summe der Rückstreu- und Transmissionswahrscheinlichkeit.

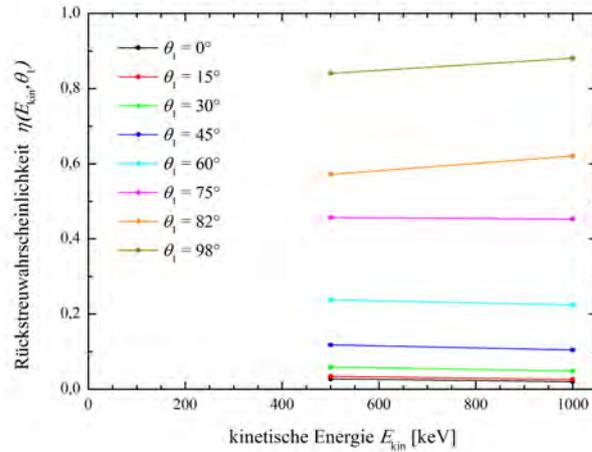
Die Rückstreuwahrscheinlichkeiten in Abhängigkeit des Einfallswinkels und der Energie der einfallenden Elektronen sind in den Abbildungen 3.13 und 3.14 sowie in Tabelle A.5 zu sehen. Der Verlauf der Rückstreuoeffizienten folgt wiederum einer exponentiellen Funktion.



**Abbildung 3.12:** Darstellung der Bereiche, die pyPENELOPE für rückgestreute, absorbierte bzw. transmittierte Elektronen definiert. Der Pfeil zeigt die Richtung der einfallenden Elektronen. Der Szintillator ist in blau dargestellt.  $\theta$  gibt den Winkel der Verkippung und  $\phi$  den Azimutwinkel der rückgestreuten Elektronen an.



**Abbildung 3.13:** Rückstreuoeffizienten für Elektronen in Abhängigkeit des Winkels für kinetische Energien von 500 keV und 1000 keV. Die Punkte entsprechen den Werten aus den Simulationen und die durchgezogenen Linien den gefitteten Kurven nach Gleichung (3.4).

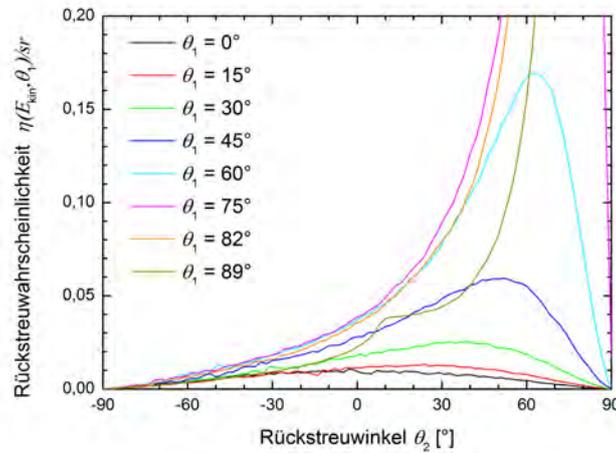


**Abbildung 3.14:** Rückstreuhschneidlichkeiten für Elektronen in Abhängigkeit der kinetischen Energie für Winkel zwischen  $0^\circ$  und  $89^\circ$ . Die durchgezogene Linie stellt keinen Fit dar, sondern dient lediglich der besseren Veranschaulichung.

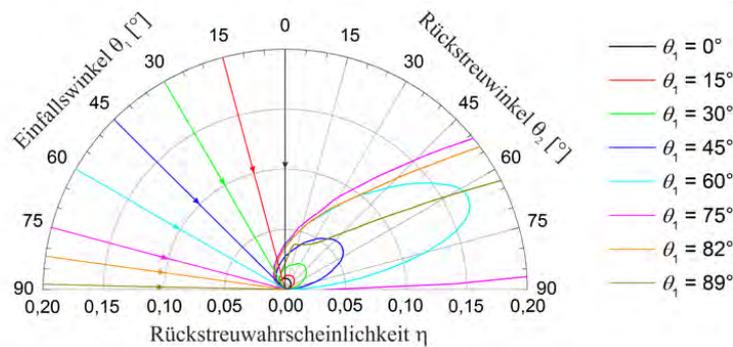
Wenn man die Ergebnisse für die winkelabhängigen Rückstreuhschneidlichkeiten aus Abbildung 3.13 wiederum mit der von Wietfeldt *et al.* [36] aufgestellten Funktion aus Gleichung (3.4) fittet, erhält man die in Tabelle A.6 aufgelisteten Koeffizienten  $A_0$ ,  $A_1$  und  $A_2$ .

## Rückstreuhschneidungswinkel

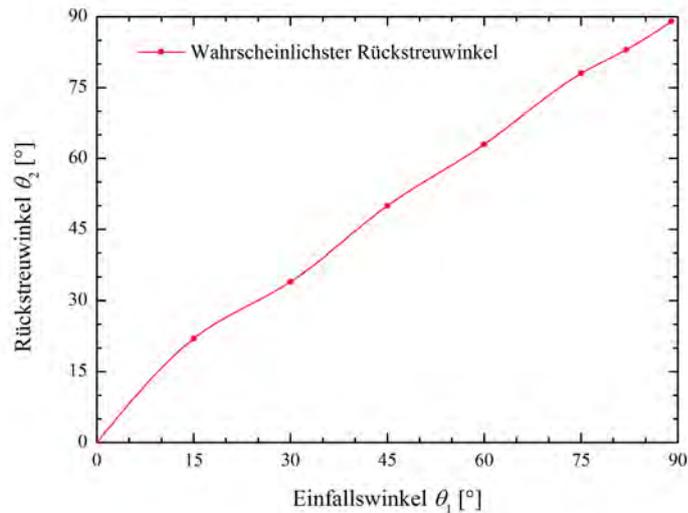
Als nächstes beschäftigen wir uns mit der Rückstreuhschneidlichkeit in Abhängigkeit des Rückstreuhschneidungswinkels. Es ist bei der Auswertung darauf zu achten, dass pyPENELOPE dreidimensionale Rückstreuhschneidungen simuliert. Zur weiteren Untersuchung betrachten wir einen Schnitt mit einem Azimutwinkel  $\phi$  in der Ebene der einfallenden Elektronen. Da in den Abbildungen 3.13 und 3.14, sowie in Tabelle A.5 bereits gezeigt wurde, dass der Rückstreuhschneidkoeffizient nur schwach energieabhängig ist, reicht hier die Betrachtung einer Einfallenergie aus. In Abbildung 3.15 sind am Beispiel von Simulationen für Elektronen mit einer Energie von 500 keV, die Rückstreuhschneidlichkeiten für verschiedene Einfallswinkel gezeigt.



**Abbildung 3.15:** Kartesische Darstellung der Rückstreuwahrscheinlichkeit für Elektronen in Abhängigkeit des Einfallswinkels. Die Darstellung zeigt einem Schnitt in der Einfallsebene der Elektronen.  $0^\circ$  entspricht der Rückstreuung normal zur Szintillatoroberfläche. Gezeigt ist eine Simulation mit pyPENELOPE bei einer Einfallsenergie vom 500 keV. Dabei wurde auf diejenigen Einfallswinkel gezoomt, die für die weiteren Berechnungen in Kapitel 4.1 erforderlich sind.



**Abbildung 3.16:** Polare Darstellung der Rückstreuwahrscheinlichkeit für Elektronen in Abhängigkeit des Einfallswinkels. Die Darstellung zeigt einem Schnitt in der Einfallsebene der Elektronen.  $0^\circ$  entspricht der Rückstreuung normal zur Szintillatoroberfläche. Gezeigt ist eine Simulation mit pyPENELOPE bei einer Einfallsenergie vom 500 keV. Zu sehen sind die Einfallswinkel, die für die weiteren Berechnungen in Kapitel 4.1 erforderlich sind.



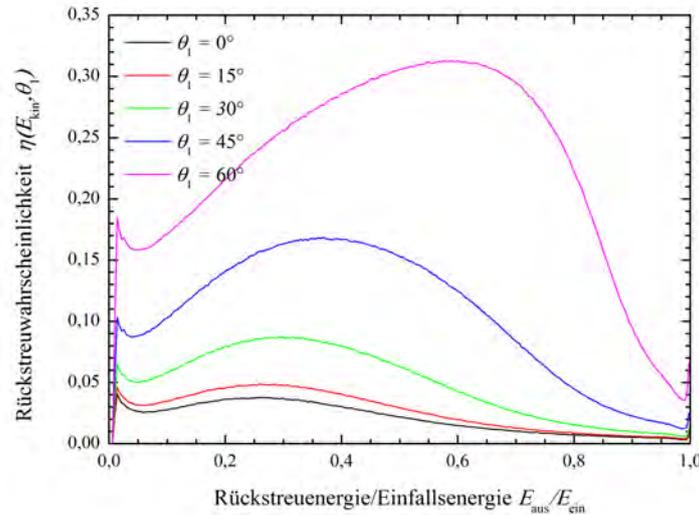
**Abbildung 3.17:** Wahrscheinlichster Rückstreuwinkel in Abhängigkeit des Einfallswinkels.

Zum besseren Verständnis sind in Abbildung 3.16 die winkelabhängigen Rückstreuwahrscheinlichkeiten in einem polaren Koordinatensystem zu sehen. Die polare Darstellung veranschaulicht sehr schön den Winkelbereich der Rückstreuung.

In Abbildung 3.17 ist der Rückstreuwinkel in Abhängigkeit des Einfallswinkels dargestellt, wobei dieser wiederum keinem präzisen Wert entspricht, sondern lediglich den häufigsten Rückstreuwinkel angibt.

## Rückstreuenergie

Wenn man die Rückstreuwahrscheinlichkeit über die Rückstreuenergie aufträgt, erhält man eine Verteilung wie sie in Abbildung 3.18 zu sehen ist. Dabei ist zu beachten, dass pyPENELOPE die Rückstreuwahrscheinlichkeit auf die Teilchenzahl der simulierten Elektronen und die Einfallenergie normiert. Zum direkten Vergleich mit den Ergebnissen aus Kapitel 3.2.3 wurden die Rückstreuwahrscheinlichkeit auf die Intensität die Einfallenergie renormiert, um die gleiche Normierung zu erhalten.

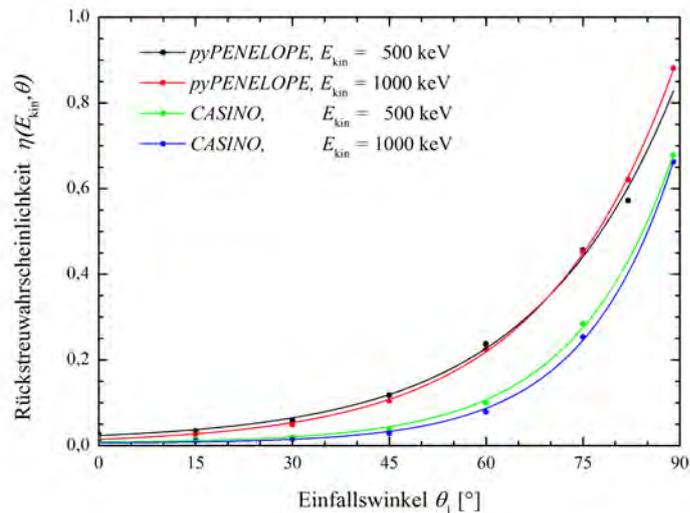


**Abbildung 3.18:** Energieverteilung der Rückstreuwahrscheinlichkeit für verschiedene Einfallswinkel bei einer Einfallenergie von 500 keV. Auf der  $x$ -Achse ist die Rückstreueenergie auf die Einfallenergie normiert. Die  $y$ -Achse zeigt die Rückstreuwahrscheinlichkeit. Zu sehen sind die Einfallswinkel, die für die weiteren Berechnungen in Kapitel 4.2 erforderlich sind.

### 3.3.5 Résumé

Die pyPENELOPE Simulationen liefern leichter auswertbare Resultate, welche vor allem, was den Verlauf des Rückstreuwinkels angeht, auch physikalisch interpretierbar sind. Der Verlauf der Winkelverteilung der rückgestreuten Elektronen stimmt mit den Messungen von Kanter [43] überein. Durch Normierung auf die Rückstreuwahrscheinlichkeit wird die Auswertung deutlich erleichtert. Die Simulationsergebnisse mit pyPENELOPE haben folgende Eigenschaften:

- Die Rückstreuwinkel entsprechen physikalischen Überlegungen und Messungen von Kanter [43] (siehe auch Kovacs [30]),
- Die Verkippung des Targets anstelle des Elektronenstrahls erschwert die Auswertung.



**Abbildung 3.19:** Vergleich der Rückstreuhskoeffizienten aus CASINO und pyPENELOPE für Elektronen mit einer Einfallsenergie von 500 keV und 1000 keV. Die Punkte entsprechen den simulierten Werten und die durchgezogenen Linien den Fit-Kurven nach Gleichung (3.4).

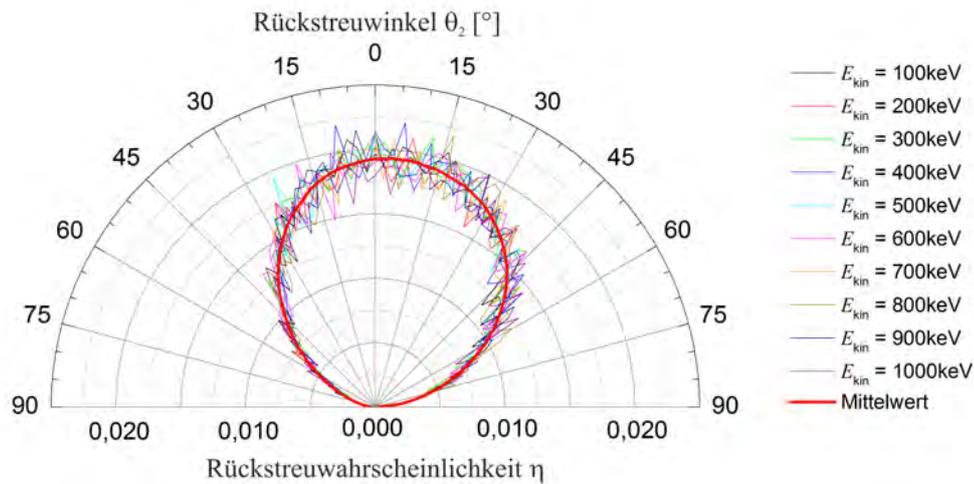
### 3.4 Vergleich der Simulationsergebnisse

Abschließend werden die Ergebnisse der Simulationen mit CASINO und pyPENELOPE verglichen.

Betrachten wir als Erstes die Rückstreuhskoeffizienten in Abbildung 3.19. Die CASINO Simulationen resultieren in deutlich niedrigeren Rückstreuhskoeffizienten als die pyPENELOPE Simulationen.

Da in CASINO Elektronen mit einem Einfallswinkel von  $0^\circ$  einen mittleren Rückstreuhswinkel ungleich  $0^\circ$  aufweisen und dies nicht mit Messungen von [43] übereinstimmt, ist eine mögliche Erklärung, eine fehlerhafte Beschriftung der Achsen. Ein möglicher Ansatz ist, dass bei den CASINO Simulationen ein Rückstreuhswinkel zwischen  $0^\circ$  und  $90^\circ$  in Wirklichkeit einem Winkel zwischen  $-90^\circ$  und  $90^\circ$  entspricht. Eine entsprechende Darstellung der Winkelverteilung der Elektronen mit einem Einfallswinkel von  $0^\circ$ , aus den CASINO Simulationen, ist in Abbildung 3.20 gezeigt. Jedoch ergibt sich auch in diesem Fall keine symmetrische Winkelverteilung bei einem Einfallswinkel von  $0^\circ$ .

In Abbildung 3.21 ist die entsprechende Graphik für alle simulierten Ein-

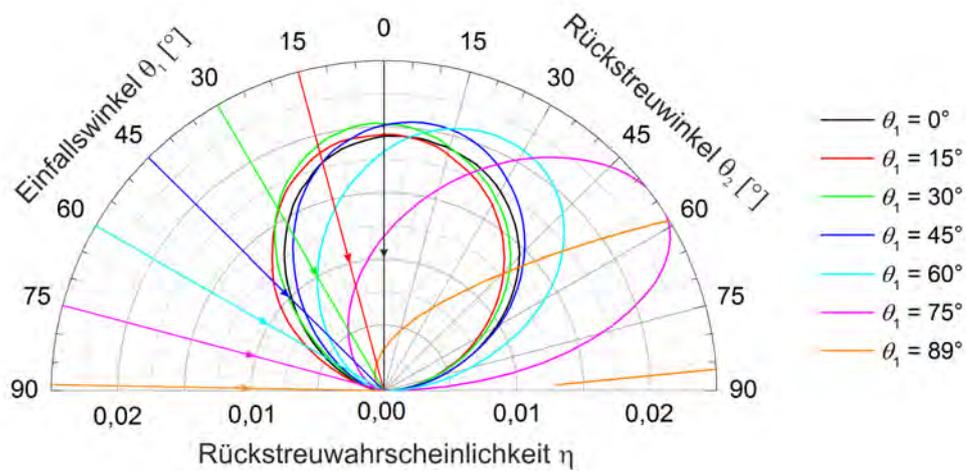


**Abbildung 3.20:** Winkelverteilung der Rückstreuwahrscheinlichkeit für einen Einfallswinkel von  $0^\circ$ . Der Darstellungsbereich wurde in diesem Fall, wie im Text erläutert, auf  $-90^\circ$  bis  $90^\circ$  gestreckt.

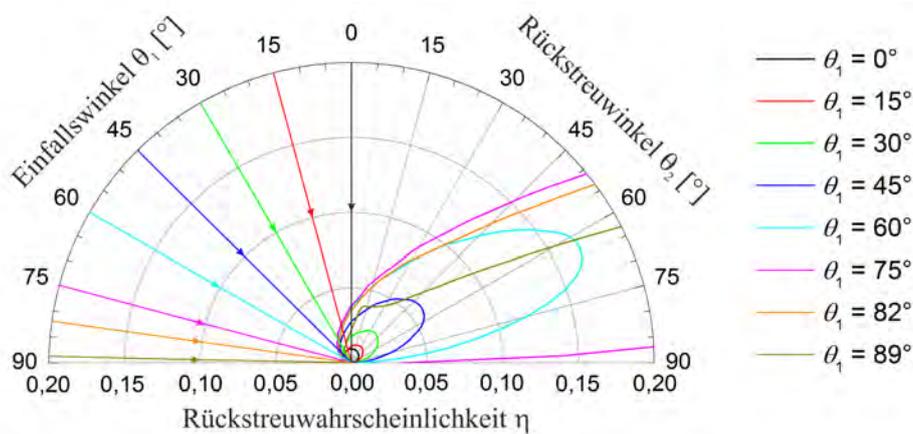
fallswinkel dargestellt. Die gezeigten Kurven entsprechen den Mittelwerten aus allen berechneten Energien. Es ist zu sehen, dass erst bei hohen Einfallswinkeln die Rückstreuwinkel physikalische Ergebnisse, die auch mit Messungen von [43] vergleichbar sind, liefern. Diese Anpassung der Winkelskala in den CASINO Simulationen ermöglicht einen besseren Vergleich mit den Ergebnissen aus pyPENELOPE. Die entsprechende Winkelverteilung aus den Simulationen mit pyPENELOPE ist nochmals in Abbildung 3.22 zu sehen.

Wenn man die Ergebnisse aus den Simulationen mit CASINO und pyPENELOPE mit Messungen zur Elektronenrückstreuung von Kanter [43] vergleicht, ist zu erkennen, dass bei den Messungen Einfallswinkel der Elektronen von  $0^\circ$  zu mittleren Rückstreuwinkeln von  $0^\circ$  führen. Dementsprechend entsprechen die Simulationen mit pyPENELOPE im Verlauf der Winkelverteilung den Messungen von Kanter (Details siehe Kovacs [30]). Die Winkelverteilung der Simulationen mit CASINO folgen lediglich dem Verlauf anderer Simulationen, wie z.B. von Roick [41] mit GEANT4 und Wietfeldt *et al.* [36] mit ETRAN.

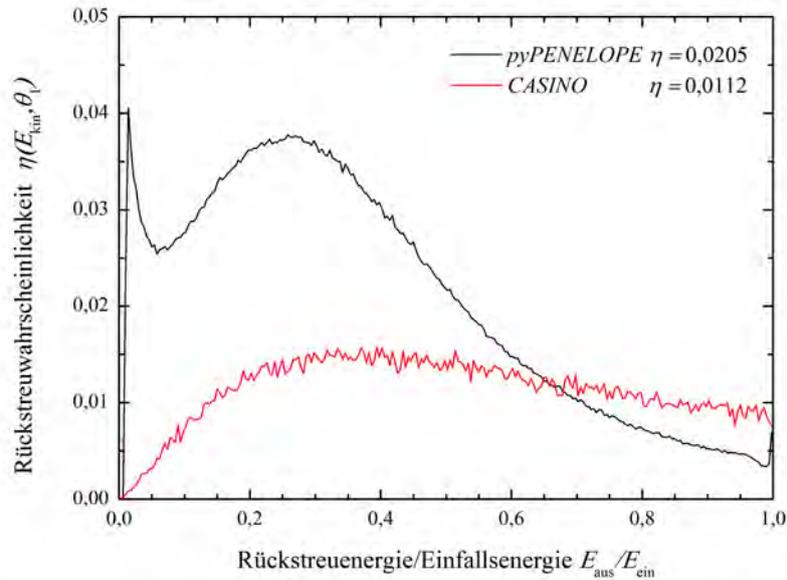
Beim Vergleich der Energieverteilung der rückgestreuten Elektronen aus den CASINO mit den pyPENELOPE Simulationen ist das unterschiedliche



**Abbildung 3.21:** Winkelverteilung der Rückstreuwahrscheinlichkeiten bezogen auf den Raumwinkel für verschiedene Einfallswinkel. Der Darstellungsbereich wurde in diesem Fall, wie im Text erläutert, auf  $-90^\circ$  bis  $90^\circ$  gestreckt.



**Abbildung 3.22:** Polare Darstellung der Rückstreuwahrscheinlichkeiten für Elektronen in Abhängigkeit des Einfallswinkels.  $0^\circ$  entspricht der Rückstreuung normal zur Szintillatoroberfläche. Gezeigt ist eine Simulation mit pyPENELOPE bei einer Einfallenergie vom 500 keV.



**Abbildung 3.23:** Vergleich zwischen CASINO und pyPENELOPE der Energieverteilung für rückgestreute Elektronen mit einer Einfallsenergie von 1000 keV und einem Einfallswinkel von  $0^\circ$ .

Binning zu berücksichtigen. In Abbildung 3.23 sind die Werte aus den CASINO und den pyPENELOPE Simulationen so normiert, dass die Flächen unter der Kurve den simulierten Rückstreuoeffizienten entsprechen.

Es ist ein deutlicher Unterschied im Verlauf der Energieverteilung zu sehen. Die pyPENELOPE Simulationen liefern im Gegensatz zu CASINO zusätzlich eine niederenergetische, scharfe Energielinie, die auf Sekundärprozesse zurückzuführen ist. Ebenso ist auch hier noch einmal zu sehen, dass die gesamte Rückstreuwahrscheinlichkeit bei pyPENELOPE im Vergleich zu den CASINO Simulationen zum Teil mehr als doppelt so hoch ist.

Zusammenfassend ist zu sagen, dass Rückstreusimulationen mit pyPENELOPE im Vergleich zu CASINO, vor allem im Bezug auf die Rückstreuwinkel, physikalisch sinnvollere Ergebnisse liefern.



# Kapitel 4

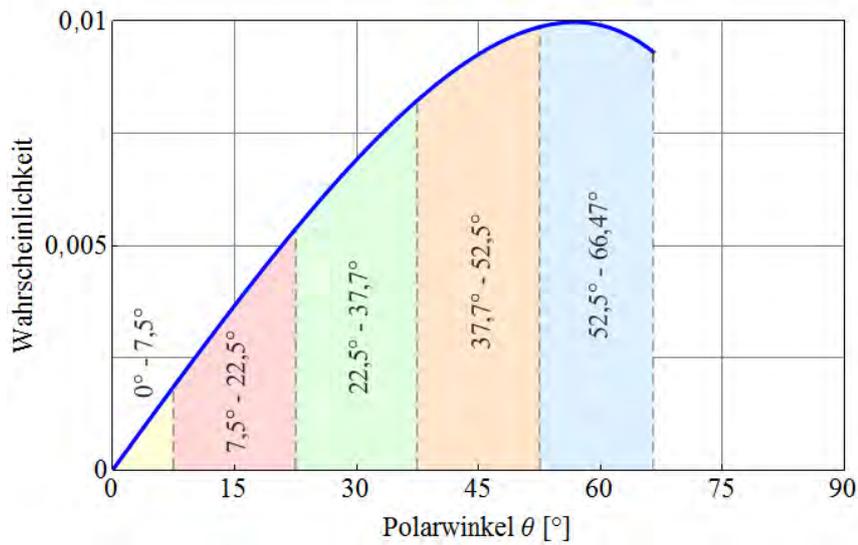
## Energieverteilung am Detektor

In diesem Kapitel verwenden wir die Ergebnisse aus den Monte Carlo Simulationen zur Bestimmung der am Detektor rückgestreuten Elektronen. Es ist zu beachten, dass rückgestreute Elektronen auf Grund des magnetischen Spiegeleffekts wieder am Magnetfeldmaximum, wie es in Abbildung 2.5 gezeigt ist, auf den Detektor zurück reflektiert werden können. Dabei können sie entweder ihre gesamte Energie im Detektor deponieren oder zu einem geringen Prozentsatz ein zweites Mal vom Detektor rückgestreut werden. Sowohl die Winkelverteilung, als auch die Energieverteilung der vom Detektor absorbierten Elektronen wird in diesem Kapitel abgeschätzt.

### 4.1 Rückstreuung am Detektor

Wir haben uns bereits in Kapitel 2.2.4 mit der Winkelverteilung der Elektronen an verschiedenen Positionen in der Detektoreinheit von PERKEO III beschäftigt. Die Winkelverteilung an der Position des Detektors ist noch einmal in Abbildung 4.1 dargestellt. Es ist zu erkennen, dass Elektronen mit einem Winkel von maximal  $66,47^\circ$  auf den Detektor auftreffen können.

Wir haben unsere Rückstreuersimulationen für die Polarwinkel  $0^\circ$ ,  $15^\circ$ ,  $30^\circ$ ,  $45^\circ$ ,  $60^\circ$ ,  $75^\circ$ ,  $82^\circ$  und  $89^\circ$  durchgeführt. Unter Berücksichtigung des Maximalwinkels, unter dem Elektronen den Detektor erreichen, ist es sinnvoll, die Kurve in Abbildung 4.1 in die Bereiche  $(0^\circ-7,5^\circ)$ ,  $(7,5^\circ-22,5^\circ)$ ,  $(22,5^\circ-37,5^\circ)$ ,  $(37,5^\circ-52,5^\circ)$  und  $(52,5^\circ-66,47^\circ)$  entsprechend den unterschiedlich eingefärbten Flächen zu unterteilen. Somit ist es möglich, die Rückstreuwahrscheinlichkei-



**Abbildung 4.1:** Winkelverteilung der Elektronen an der Position des Detektors. Die farblich markierten Flächen unter dieser Kurve entsprechen den Wahrscheinlichkeiten, dass Elektronen aus den entsprechenden Winkelbereichen den Detektor erreichen.

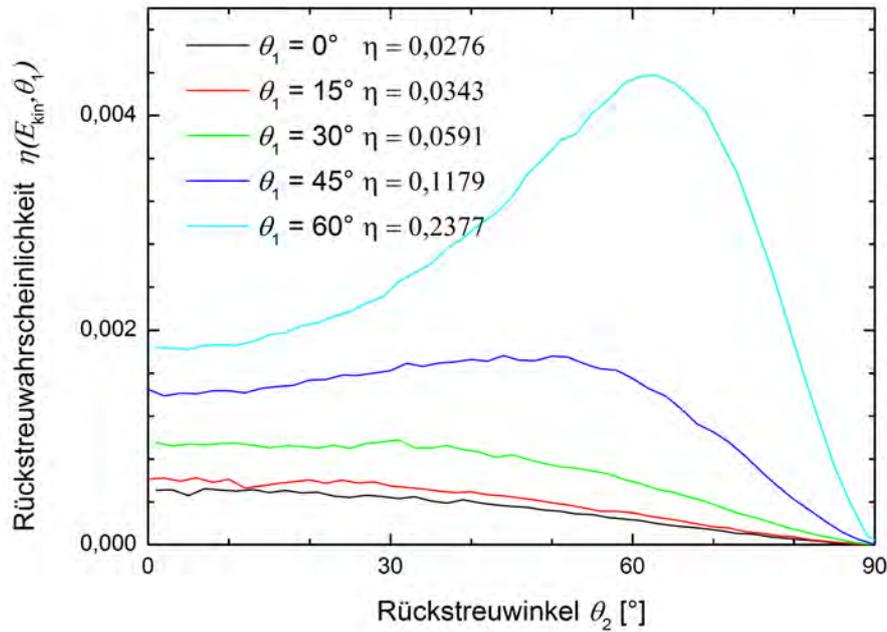
ten für die simulierten Winkel mit diesen Flächen zu gewichten. Dies wird durch Gleichung (4.3) beschrieben:

$$\omega(\theta_i) = \int_{\theta_{a,i}}^{\theta_{e,i}} p(\theta) d\theta \quad (4.1)$$

$$\theta_a = \theta_i - 7,5^\circ \quad (4.2)$$

$$\theta_e = \theta_i + 7,5^\circ \quad (4.3)$$

In dieser Gleichung sind  $\omega(\theta_i)$  die Wahrscheinlichkeit, dass Elektronen im Bereich  $(\theta_a - \theta_e)$  am Detektor ankommen,  $\theta_a$  und  $\theta_e$  die Winkel, die den jeweiligen Bereich nach unten bzw. oben begrenzen und  $p(\theta)$  die Wahrscheinlichkeitsdichte aus Gleichung (2.13), mit der die Elektronen unter einem Winkel  $\theta$  am Detektor ankommen. Die berechneten Rückstreuwahrscheinlichkeiten für die jeweiligen Bereiche sind in Tabelle 4.1 zusammengefasst.



**Abbildung 4.2:** Winkelverteilungen der vom Detektor rückgestreuten Elektronen für eine Einfallenergie von 500 keV und verschiedene Einfallswinkel. Das Bild zeigt einen Schnitt in der Ebene der einfallenden Elektronen.

**Tabelle 4.1:** Wahrscheinlichkeit für die einzelnen Bereiche der Kurve aus Abbildung 4.1, dass Elektronen am Detektor ankommen.

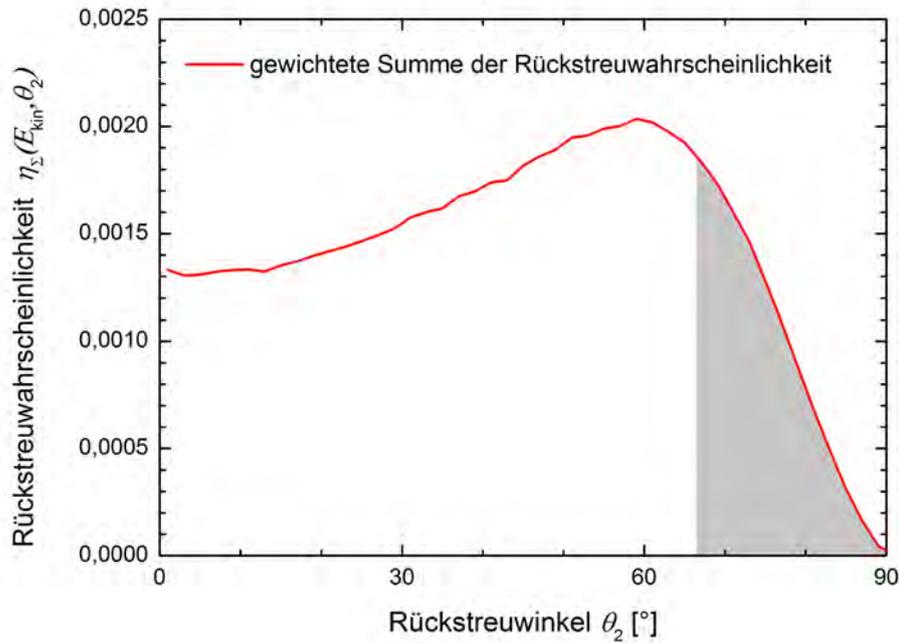
$\theta_a - \theta_e$	$0^\circ - 7,5^\circ$	$7,5^\circ - 22,5^\circ$	$22,5^\circ - 37,5^\circ$	$37,5^\circ - 52,5^\circ$	$52,5^\circ - 66,47^\circ$
$\omega \left( \frac{\theta_a + \theta_e}{2} \right)$	0,016	0,124	0,235	0,313	0,312

Eine Winkelverteilung der vom Detektor rückgestreuten Elektronen, wie sie aus den pyPENELOPE Simulationen extrahiert wird, ist in Abbildung 4.2 am Beispiel einer Rückstrebene dargestellt.

Aus der gewichteten Summe der einzelnen Kurven erhalten wir die gesamte Winkelverteilung der rückgestreuten Elektronen entsprechend Gleichung (4.4):

$$\eta_{\Sigma}(E, \theta_2) = \sum_i \eta(E, \theta_2, \theta_i) \cdot \omega(\theta_i) = 11,76\%. \quad (4.4)$$

$\eta_{\Sigma}$  ist darin die gesamte Rückstreuwahrscheinlichkeit der Elektronen und



**Abbildung 4.3:** Gesamte Verteilungsfunktion der am Detektor rückgestreuten Elektronen in Abhängigkeit des Rückstreuwinkels für eine Einfallsenergie von 1000 keV. Das Bild zeigt einen Schnitt in der Ebene der einfallenden Elektronen. Die totale Rückstreuwahrscheinlichkeit beträgt 11,76 %. Der grau eingefärbte Bereich markiert die Elektronen, die vom Magnetfeldmaximum durch den magnetischen Spiegeleffekt auf den Detektor zurück reflektiert werden. Von allen ursprünglich am Detektor eintreffenden Elektronen kommen 2,23 % durch Rückstreuung und Reflektion ein zweites Mal am Detektor an.

$\eta(E, \theta_2, \theta_i)$  die Rückstreuwahrscheinlichkeit für einen fixen Einfallswinkel  $\theta_i$ . Dies ist in Abbildung 4.3 zu sehen. Der angegebene Wert ergibt sich für den von uns betrachteten Schnitt in der Einfallsebene der Elektronen.

Aus den simulierten Werten ergibt sich für alle auf den Detektor auftreffenden Elektronen eine gesamte Rückstreurrate von 11,76 %, in der Ebene der einfallenden Elektronen.

Der Grenzwinkel für die Elektronen, die laut Gleichung (2.10) am Magnetfeldmaximum reflektiert werden, beträgt  $66,47^\circ$ . Elektronen mit entsprechend großem Rückstreuwinkel werden vom Magnetfeldmaximum auf den Detektor zurück reflektiert und sind in Abbildung 4.3 als grau eingezeichneter Bereich

markiert.

## 4.2 Energiespektrum der rückgestreuten Elektronen

Als nächstes betrachten wir die Energieverteilung der am Detektor rückgestreuten Elektronen. Dafür verwenden wir wieder die Ergebnisse aus den Simulationen mit pyPENELope. Die Energieverteilungen sind nochmals in Abbildung 4.4 zu sehen. Wir gewichten die Energieverteilung in gleicher Weise wie die Winkelverteilung in Abbildung 4.2 und erhalten für alle simulierten Einfallswinkel die Energieverteilung nach der Rückstreuung. Nach Summation aller Winkel bekommen wir das gesamte Energiespektrum der am Detektor rückgestreuten Elektronen, wie es in Abbildung 4.5 zu sehen ist.

Die Energieverteilung der rückgestreuten Elektronen kann mit der Funktion

$$p(E_{\text{bs}}) = B_0 + B_1 \cdot E_{\text{bs}} + B_2 \cdot E_{\text{bs}}^2 + B_3 \cdot E_{\text{bs}}^3 + B_4 \cdot E_{\text{bs}}^4 \quad (4.5)$$

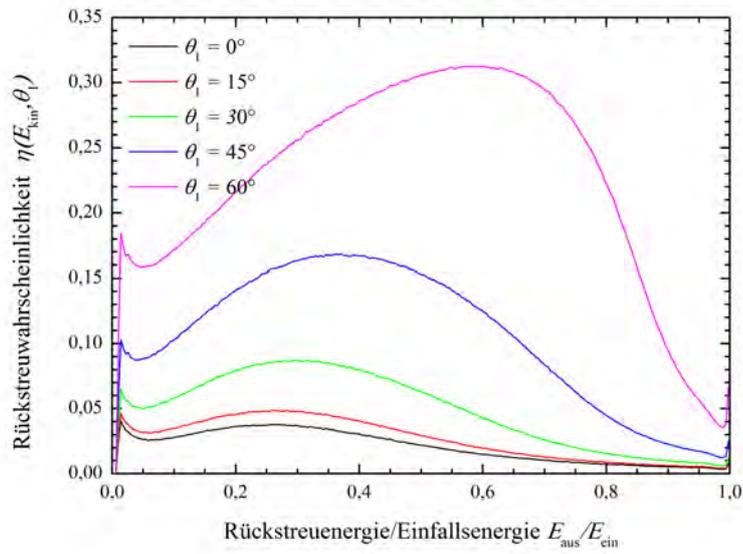
gefittet werden. Die zugehörigen Koeffizienten  $B_1$  bis  $B_4$  sind in Tabelle A.7 aufgelistet.

Für einen Vergleich mit einem gemessenen Spektrum muss aus den vorangegangenen Ergebnissen noch berechnet werden, wie viele Elektronen, mit welcher Energie, vom Detektor absorbiert werden. In Abbildung 4.6 ist die Energieverteilung der absorbierten Elektronen zu sehen, für den Fall einer diskreten Einfallenergie.

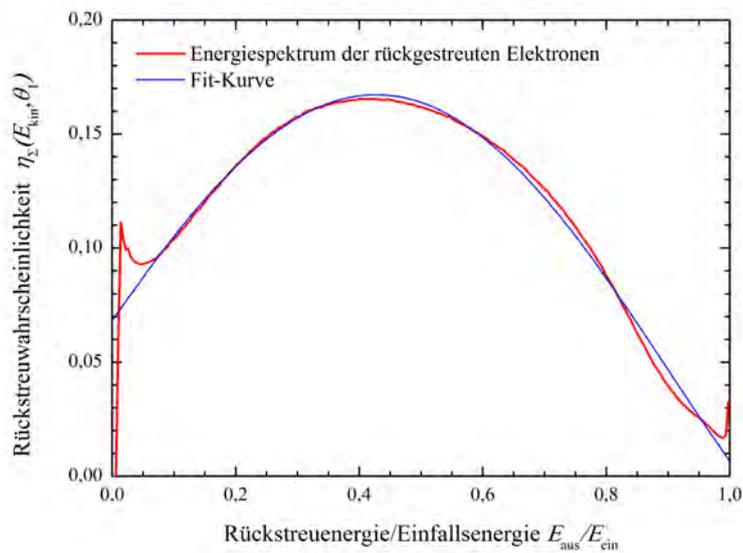
Die Kurve errechnet sich aus der Gesamtenergie und der Rückstreuenergie.

$$E_{\text{abs}} = E_{\text{tot}} - E_{\text{bs}} \quad (4.6)$$

$E_{\text{abs}}$ ,  $E_{\text{tot}}$  und  $E_{\text{bs}}$  geben dabei die Energien der absorbierten, der einfallenden und der rückgestreuten Elektronen an.

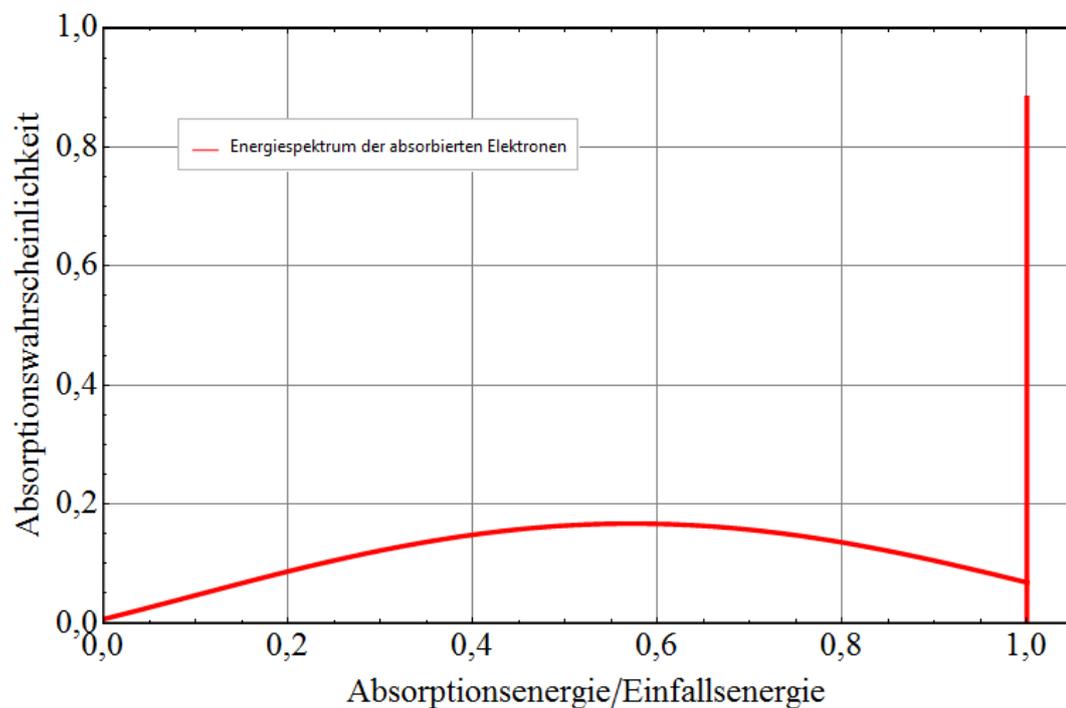


**Abbildung 4.4:** Energieverteilungen der am Detektor rückgestreuten Elektronen für verschiedene Einfallswinkel zwischen  $0^\circ$  und  $60^\circ$  bei einer Einfallenergie von 500 keV.

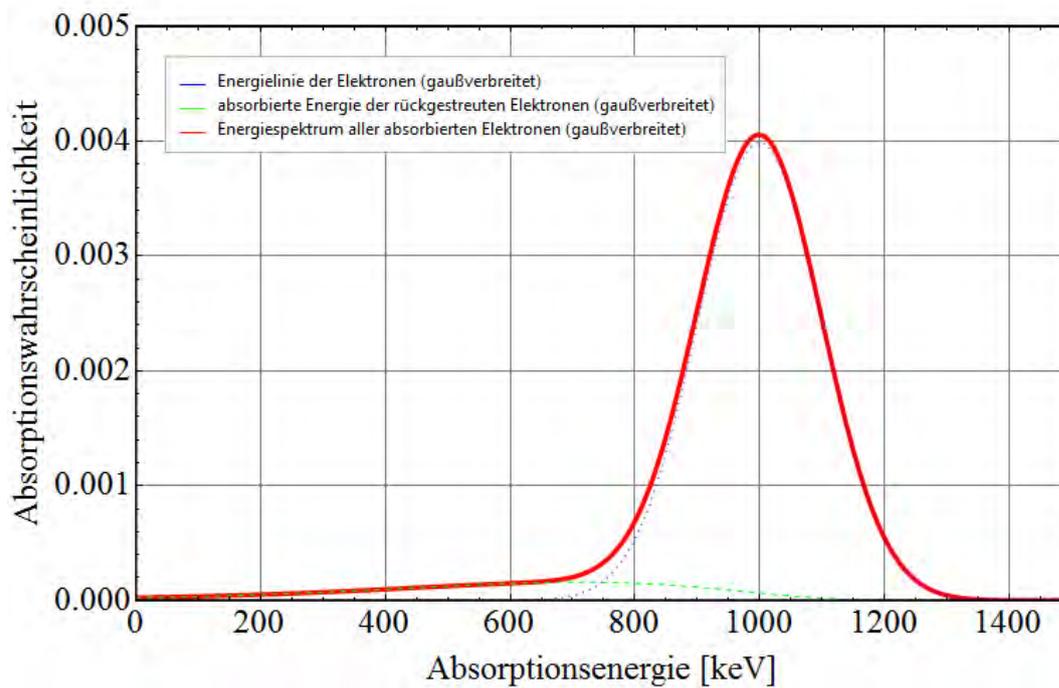


**Abbildung 4.5:** Gesamte Verteilungsfunktion der am Detektor rückgestreuten Elektronen in Abhängigkeit der Rückstreuenergie, auf die Einfallenergie normiert.

Da es im Detektor jedoch zu einer Gaußverbreiterung der Energielinie und der Energieverteilung der rückgestreuten Elektronen, durch die Photomultiplier kommt, müssen wir unsere Ergebnisse noch mit einer Gaußverteilung falten. Das resultierende Spektrum ist in Abbildung 4.7 zu sehen. Vergleiche mit tatsächlich gemessenen Spektren sind Teil der Dissertation von J. Erhart [44].



**Abbildung 4.6:** Gesamte Energieverteilung der im Detektor absorbierten Elektronen, auf die Einfallsenergie normiert.



**Abbildung 4.7:** Gaußverbreitertes Energiespektrum, wie es bei der Absorption von Elektronen im Detektor aussieht, bei einer Energielinie von 1000 keV. Die blaue Kurve zeigt die ursprüngliche, gaußverbreiterte Energielinie, die grüne Kurve entspricht der Energieverteilung der Elektronen, deren Energie auf Grund der Rückstreuung reduziert wurde. Die rote Kurve zeigt das resultierende, gaußverbreiterte Energiespektrum der Elektronen.

# Kapitel 5

## Zusammenfassung und Ausblick

Im Rahmen dieser Diplomarbeit gelang es durch die in Kapitel 2 beschriebenen Adaptierungen an der Detektoreinheit von PERKEO III, die Energiespektren der Elektronen aus dem  $\beta$ -Zerfall, im Vergleich zu früheren Messungen, deutlich zu verbessern. Es wurden Erkenntnisse über mögliche Fehlerquellen im Aufbau und der Montage von Szintillationsdetektoren gewonnen, mit denen in Zukunft eine raschere Inbetriebnahme gewährleistet wird. Dies betrifft vor allem die optische Ankopplung der einzelnen Komponenten des Detektors aneinander. Zur Kalibrierung des Elektronenspektrometers mittels radioaktiver Quellen wurden Methoden entwickelt, mit denen die Effizienz der Messungen gesteigert wurde, da durch den verfahr- und kippbaren Probenhalter eine Messung mit und ohne Kalibrierquelle ohne Brechen des Vakuums ermöglicht wurde. Es gelang somit eine Optimierung des PERKEO III Detektors. Dies ist bei einem Vergleich der gemessenen Energiespektren der verwendeten Kalibrierquellen in Abbildung 2.17 bis 2.20 zu sehen.

Ein Teil der am Detektor auftreffenden Elektronen wird durch Streuprozesse wieder vom Detektor rückgestreut. Die Winkelverteilung und Energiespektren dieser Elektronen wurden mit Hilfe von Monte Carlo Methoden ermittelt. Die Berechnungen basieren vor allem auf Simulationsergebnissen mit pyPENELOPE. Damit konnte die Energieverteilung der absorbierten Elektronen charakterisiert werden. Dies dient vor allem dem besseren Verständnis der gemessenen Energiespektren und bildet die Grundlage zum Fitten der gemessenen Eichspektren [44].

Für die Zukunft bietet sich die Möglichkeit, die simulierte Energieverteilung

der absorbierten Elektronen mit präziseren bzw. besser auf unseren Energiebereich angepassten Monte Carlo Codes zu überprüfen. Gerade für Präzisionsexperimente wie PERC, welches Elektronenspektroskopie auf einem Niveau von  $10^{-4}$  anstrebt, ist zu überlegen, mehr als nur eine Rückstreuung am Detektor zu berechnen. Denn durch mehrfache Rückstreuung und Reflexion zwischen Detektor und Magnetfeldmaximum kann immer wieder ein kleiner Teil der Elektronenenergie deponiert wird.

Da das Elektronenspektrometer PERKEO III optimal dafür geeignet ist, Winkelkorrelationskoeffizienten aus dem Neutronenzerfall zu bestimmen, besteht auch die Möglichkeit, es als Elektronenspektrometer am Instrument PERC zu verwenden.

# Anhang A

## Anhang

### Wahrscheinlichkeitsdichte

Zur Berechnung der Wahrscheinlichkeitsdichte des Polarwinkels für Elektronen an verschiedenen Punkten im Magnetfeldes, wie in Kapitel 2.2.4 beschrieben, werden hier die genauen Rechenschritte durchgeführt.

Für einen isotropen Zerfall ergibt sich die Wahrscheinlichkeitsverteilung am Startpunkt zu

$$P(\theta_0) = \omega(\theta_0) d\theta_0 = \sin \theta_0 d\theta_0. \quad (\text{A.1})$$

Des Weiteren ist laut Gleichung (2.7) die Beziehung aus der adiabatischen Invarianz

$$\frac{\sin^2 \theta_0}{\sin^2 \theta_1} = \frac{B_0}{B_1}. \quad (\text{A.2})$$

Auflösen nach  $\sin \theta_0$  führt zu

$$\sin \theta_0 = \sqrt{\frac{B_0}{B_1}} \sin \theta_1. \quad (\text{A.3})$$

Anschließendes Einsetzen in die Wahrscheinlichkeitsverteilung Gleichung (A.1) und Erweitern mit  $d\theta_0/d\theta_1$  liefert

$$P(\theta_1) = \underbrace{\sqrt{\frac{B_0}{B_1}} \sin \theta_1 \frac{d\theta_0}{d\theta_1}}_{\omega(\theta_1)} d\theta_1. \quad (\text{A.4})$$

Für die weitere Berechnung betrachten wir zuerst nur den Term  $d\theta_0/d\theta_1$ .

$$\frac{d\theta_0}{d\theta_1} = \frac{d}{d\theta_1} \left( \arcsin \left( \sqrt{\frac{B_0}{B_1}} \sin \theta_1 \right) \right) = \frac{\sqrt{\frac{B_0}{B_1}} \cos \theta_1}{\sqrt{1 - \frac{B_0}{B_1} \sin^2 \theta_1}} \quad (\text{A.5})$$

Durch Einsetzen in die Gleichung (A.4) kommen wir auf die Wahrscheinlichkeitsdichte, die sich durch eine Änderung des Magnetfeldes ergibt:

$$\omega(\theta_1) = \frac{B_0}{B_1} \frac{\sin \theta_1 \cos \theta_1}{\sqrt{1 - \frac{B_0}{B_1} \sin^2 \theta_1}} \quad (\text{A.6})$$

Wenn sich entlang der Teilchentrajektorie das Magnetfeld noch weiter verändert, wird die gesamte obere Rechnung noch einmal durchgeführt. Dabei ist darauf zu achten, dass in diesem Schritt die Dichtefunktion  $\omega(\theta_1)$  aus Gleichung (A.6) für die Berechnung der Wahrscheinlichkeitsverteilung verwendet werden muss. Erweitert wird dann um den Term  $d\theta_2/d\theta_2$ :

$$P(\theta_2) = \omega(\theta_2) d\theta_2 = \frac{B_0}{B_1} \frac{\sin \theta_1 \cos \theta_1}{\sqrt{1 - \frac{B_0}{B_1} \sin^2 \theta_1}} \frac{d\theta_1}{d\theta_2} d\theta_2 \quad (\text{A.7})$$

Wir berechnen zuerst wiederum nur den Term  $d\theta_1/d\theta_2$ :

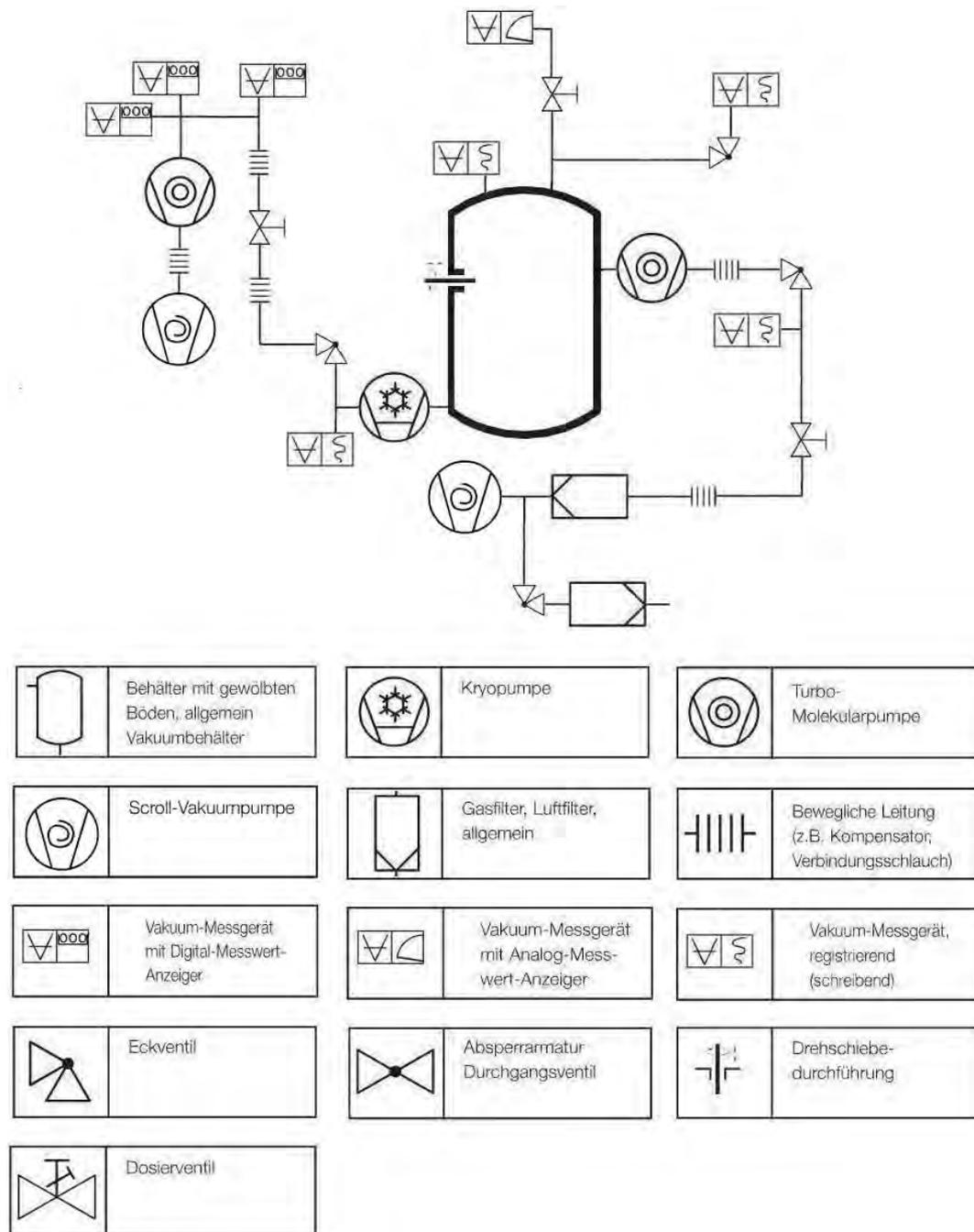
$$\frac{d\theta_1}{d\theta_2} = \frac{d}{d\theta_2} \left( \arcsin \left( \sqrt{\frac{B_1}{B_2}} \sin \theta_2 \right) \right) = \frac{\sqrt{\frac{B_1}{B_2}} \cos \theta_2}{\sqrt{1 - \frac{B_1}{B_2} \sin^2 \theta_2}}. \quad (\text{A.8})$$

Durch Einsetzen in  $\omega(\theta_2)$  und Vereinfachen kommen wir zu dem endgültigen Ergebnis

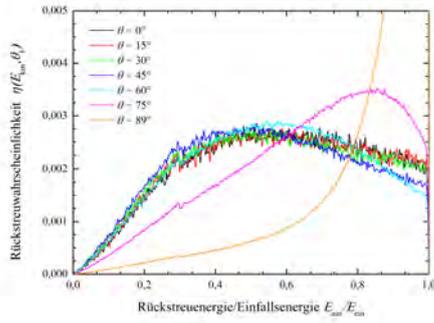
$$\omega(\theta_2) = \frac{B_0}{B_2} \frac{\sin \theta_2 \cos \theta_2}{\sqrt{1 - \frac{B_0}{B_2} \sin^2 \theta_2}}. \quad (\text{A.9})$$

Aus dieser Berechnung ist ersichtlich, dass sich durch mehrmaliges Ändern des Magnetfeldes keine Änderung in der mathematischen Beschreibung der Verteilungsfunktion ergibt. Sie ist ausschließlich vom Verhältnis zwischen Anfangs- und Endmagnetfeld abhängig. Das größte Maximum im Magnetfeld zwischen Anfangs- und Endpunkt bestimmt lediglich den größtmöglichen Winkel aller am Endpunkt ankommenden Teilchen.

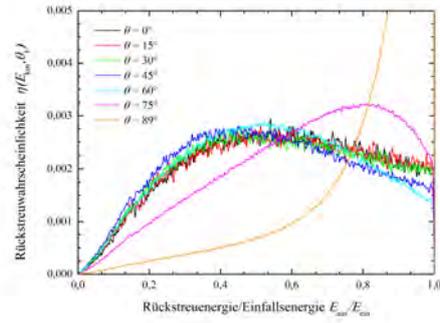
## Abbildungen



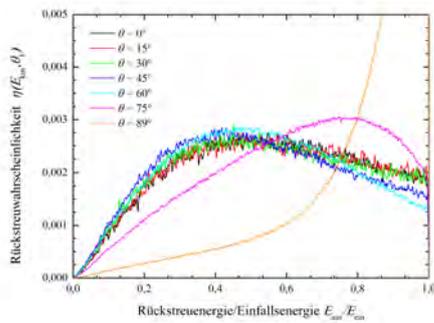
**Abbildung A.1:** Schaltplan des Vakuumsystems der Detektoreinheit von PERKEO III mit allen zur Erzeugung eines Hochvakuums notwendigen Komponenten, wie Pumpen, Ventilen und Drucksensoren [45].



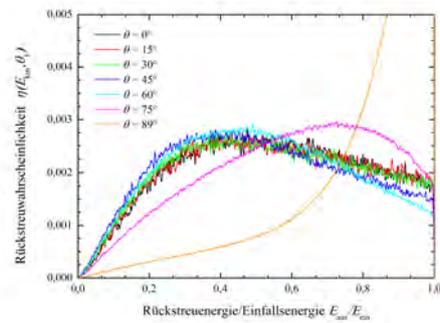
(a) 100 keV



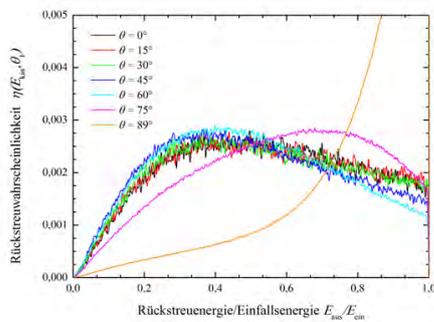
(b) 200 keV



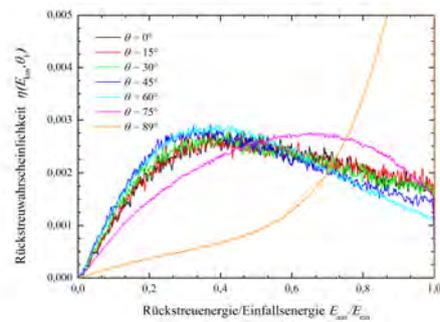
(c) 300 keV



(d) 400 keV

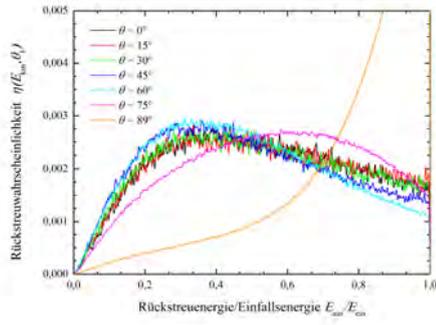


(e) 500 keV

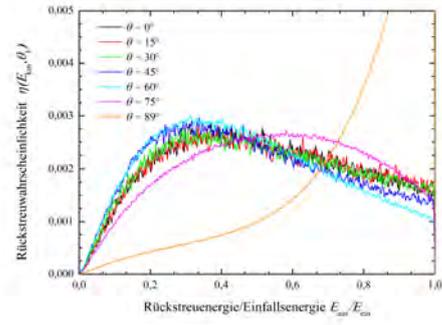


(f) 600 keV

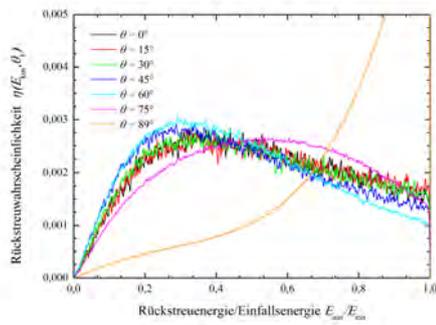
**Abbildung A.2:** Energieverteilung der Rückstreuwahrscheinlichkeit für verschiedene Einfallswinkel und -energien. Auf der  $x$ -Achse ist die Rückstreuenergie auf die Einfallenergie normiert. Die  $y$ -Achse zeigt die Rückstreuwahrscheinlichkeit entsprechend der Normierung auf Eins durch CASINO.



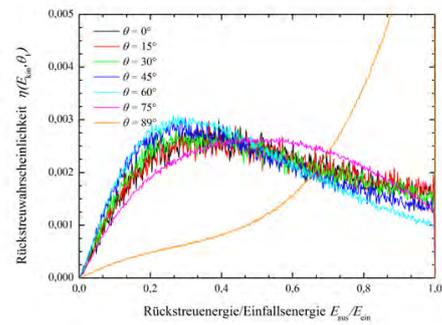
(g) 700 keV



(h) 800 keV



(i) 900 keV



(j) 1000 keV

**Abbildung A.2:** Energieverteilung der Rückstreuwahrscheinlichkeit für verschiedene Einfallswinkel und -energien. Auf der  $x$ -Achse ist die Rückstreuenergie auf die Einfallenergie normiert. Die  $y$ -Achse zeigt die Rückstreuwahrscheinlichkeit entsprechend der Normierung auf Eins durch CASINO.

## Tabellen

**Tabelle A.1:** Auszug aus den Nuclear Data Sheets 2011 für  $^{207}\text{Bi}$  [23] Konversionselektronenlinien (CE) der K, L und M Schale.

Elektron	Energie [keV]	Intensität [%]
CE K	481,694	1,54
CE L	553,837	0,44
CE M	565,847	0,11
CE K	975,651	7,8
CE L	1047,795	1,84
CE M	1059,805	0,44

**Tabelle A.2:** Energie- und winkelabhängige Rückstreukoeffizienten aus den Simulationen mit CASINO.

$E_{\text{kin}}$ [keV]	Rückstreukoeffizienten für verschiedene Einfallswinkel						
	0°	15°	30°	45°	60°	75°	89°
100	0,020	0,020	0,028	0,052	0,130	0,324	0,696
200	0,018	0,018	0,024	0,046	0,118	0,309	0,689
300	0,017	0,016	0,022	0,043	0,111	0,299	0,684
400	0,016	0,016	0,021	0,039	0,105	0,291	0,680
500	0,015	0,015	0,020	0,038	0,100	0,284	0,678
600	0,014	0,014	0,019	0,035	0,095	0,277	0,673
700	0,013	0,013	0,018	0,033	0,090	0,271	0,671
800	0,012	0,012	0,017	0,031	0,087	0,265	0,668
900	0,012	0,012	0,016	0,030	0,083	0,259	0,665
1000	0,011	0,011	0,015	0,029	0,079	0,253	0,663

**Tabelle A.3:** Energieabhängige Koeffizienten  $A_0$ ,  $A_1$  und  $A_2$  für Gleichung (3.4) aus den Rückstreusimulationen mit CASINO.

$E_{\text{kin}}$ [keV]	$A_0$	$A_1$	$A_2$	Fit-Residuum
100	0,0081	0,0040	0,0580	$3,3 \cdot 10^{-4}$
200	0,0072	0,0031	0,0607	$2,7 \cdot 10^{-4}$
300	0,0069	0,0027	0,0621	$2,6 \cdot 10^{-4}$
400	0,0070	0,0023	0,0632	$2,2 \cdot 10^{-4}$
500	0,0059	0,0020	0,0652	$2,9 \cdot 10^{-4}$
600	0,0059	0,0018	0,0666	$2,4 \cdot 10^{-4}$
700	0,0062	0,0015	0,0682	$1,9 \cdot 10^{-4}$
800	0,0061	0,0014	0,0695	$1,9 \cdot 10^{-4}$
900	0,0053	0,0013	0,0703	$1,9 \cdot 10^{-4}$
1000	0,0059	0,0011	0,0721	$1,5 \cdot 10^{-4}$

**Tabelle A.4:** Winkelabhängige Transmissionskoeffizienten aus den Simulationen mit CASINO für eine Einfallenergie von 1000 keV.

$0^\circ$	$15^\circ$	$30^\circ$	$45^\circ$	$60^\circ$	$89^\circ$
$2,7 \cdot 10^{-3}$	$1,9 \cdot 10^{-3}$	$9,1 \cdot 10^{-4}$	$3,6 \cdot 10^{-4}$	$1,1 \cdot 10^{-4}$	$1,2 \cdot 10^{-5}$

**Tabelle A.5:** Energie- und winkelabhängige Rückstreukoeffizienten aus den Simulationen mit pyPENELOPE.

$E_{\text{kin}}$ [keV]	Rückstreukoeffizienten für verschiedene Einfallswinkel							
	$0^\circ$	$15^\circ$	$30^\circ$	$45^\circ$	$60^\circ$	$75^\circ$	$82^\circ$	$89^\circ$
500	0,028	0,034	0,059	0,118	0,238	0,457	0,572	0,841
1000	0,021	0,026	0,049	0,105	0,225	0,453	0,621	0,881

**Tabelle A.6:** Energieabhängige Koeffizienten  $A_0$ ,  $A_1$  und  $A_2$  für Gleichung (3.4) aus den Rückstreusimulationen mit pyPENELOPE.

$E_{\text{kin}}$ (keV)	$A_0$	$A_1$	$A_2$	Residuum
500	0,0099	0,014	0,0457	$1,61 \cdot 10^{-3}$
1000	0,0030	0,0120	0,0482	$1,67 \cdot 10^{-4}$

**Tabelle A.7:**  $B$  Koeffizienten zur Funktion aus Gleichung (4.5) für die gesamte Verteilungsfunktion der am Detektor rückgestreuten Elektronen in Abhängigkeit der Rückstreueenergie aus Abbildung 4.5.

$B_0$	$B_1$	$B_2$	$B_3$	$B_4$
0,068	0,382	-0,074	-0,863	0,493

# Literaturverzeichnis

- [1] PAULI, W.: *Scientific correspondence with Bohr, Einstein, Heisenberg a. o.*, Band 2. Springer, 1985.
- [2] CHADWICK, J.: *Intensitätsverteilung im magnetischen Spektrum der  $\beta$ -Strahlen von Radium B+ C.* Verhandlungen der deutschen physikalischen Gesellschaft, 16:383, 1914.
- [3] CHADWICK, J.: *The existence of a neutron.* Proceedings of the Royal Society of London. Series A, 136(830):692–708, 1932.
- [4] FERMI, E.: *Versuch einer Theorie der  $\beta$ -Strahlen. I.* Zeitschrift für Physik, 88(3-4):161–177, 1934.
- [5] JACKSON, J. D., S. B. TREIMAN und H. W. WYLD: *Possible Tests of Time Reversal Invariance in Beta Decay.* Phys. Rev., 106:517–521, 1957.
- [6] MÄRKISCH, B. M.: *Das Spektrometer PERKEO III und der Zerfall des freien Neutrons.* Doktorarbeit, Ruprecht-Karls-Universität Heidelberg, 2006.
- [7] DUBBERS, D., H. ABELE, S. BAESSLER, B. MÄRKISCH, M. SCHUMANN, T. SOLDNER und O. ZIMMER: *A clean, bright, and versatile source of neutron decay products.* Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment, 596(2):238 – 247, 2008.
- [8] WU, C. S., E. AMBLER, R. W. HAYWARD, D. D. HOPPES und R. P. HUDSON: *Experimental Test of Parity Conservation in Beta Decay.* Phys. Rev., 105:1413–1415, Feb 1957.

- [9] CABIBBO, N.: *Unitary Symmetry and Leptonic Decays*. Phys. Rev. Lett., 10:531–533, 1963.
- [10] KOBAYASHI, M. und T. MASKAWA: *CP-Violation in the Renormalizable Theory of Weak Interaction*. Progress of Theoretical Physics, 49(2):652–657, 1973.
- [11] BERINGER, J., J. F. ARGUIN, R. M. BARNETT, K. COPIC, O. DAHL, D. E. GROOM, C. J. LIN, J. LYS, H. MURAYAMA, C. G. WOHL und ANDERE: *Review of particle physics*. Physical Review D, 86(1), 2012.
- [12] GÖSSELSBERGER, C., H. ABELE, G. BADUREK, E. JERICHA, S. NOWAK, G. WAUTISCHER und A. WELZL: *Design of a novel pulsed spin resonator for the beta-decay experiment PERC*. Physics Procedia, 17:62–68, 2011. 2nd International Workshop on the Physics of Fundamental Symmetries and Interactions - PSI2010.
- [13] ABELE, H., M. ASTRUC HOFFMANN, S. BAESSLER, D. DUBBERS, F. GLÜCK, U. MÜLLER, V. NESVIZHEVSKY, J. REICH und O. ZIMMER: *Is the Unitarity of the Quark-Mixing CKM Matrix Violated in Neutron  $\beta$ -Decay?* Phys. Rev. Lett., 88:211801, 2002.
- [14] BOPP, P., E. KLEMT, J. LAST, H. SCHÜTZE, D. DUBBERS und S. F. FREEDMAN: *The superconducting neutron decay spectrometer PERKEO*. Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment, 267(2):436–447, 1988.
- [15] REICH, J., H. ABELE, M. HOFFMANN ASTRUC, S. BAESSLER, PV. BÜLOW, D. DUBBERS, V. NESVIZHEVSKY, U. PESCHKE und O. ZIMMER: *A measurement of the beta asymmetry in neutron decay with PERKEO II*. Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment, 440(3):535–538, 2000.
- [16] MUND, D, B MÄRKISCH, M DEISSENROTH, J KREMPEL, M SCHUMANN, H ABELE, A PETOUKHOV und T SOLDNER: *Determination of*

- the Weak Axial Vector Coupling  $\lambda = g_A/g_V$  from a Measurement of the  $\beta$ -Asymmetry Parameter  $A$  in Neutron Beta Decay.* Physical review letters, 110(17):172502, 2013.
- [17] MEST, H. F.: *Measurement of the Beta-Asymmetry in the Decay of Free Polarized Neutrons with the Spectrometer Perkeo III.* Doktorarbeit, Ruprecht-Karls-Universität Heidelberg, 2011.
- [18] WILKINSON, D. H.: *Analysis of neutron  $\beta$ -decay.* Nuclear Physics A, 377(2-3):474 – 504, 1982.
- [19] *Comsol Multiphysics, url: <http://www.comsol.com>, 08.08.2013.*
- [20] JACKSON, J. D.: *Klassische Elektrodynamik.* Walter de Gruyter, Weinheim, 2006.
- [21] *The Vacuum Technology Book.* Pfeiffer Vacuum GmbH, 2008.
- [22] RAIZER, Y. P., V. I. KISIN und J. E. ALLEN: *Gas discharge physics,* Band 1. Springer-Verlag, Berlin, 1991.
- [23] KONDEV, F.G. und S. LALKOVSKI: *Nuclear Data Sheets for  $A = 207$ .* Nuclear Data Sheets, 112(3):782–799, 2011.
- [24] BROWNE, E. und J. K. TULI: *Nuclear Data Sheets for  $A = 137$ .* Nuclear Data Sheets, 108(10):2173 – 2318, 2007.
- [25] CERVINKA, T.: *Simulation und erste Messungen des Magnetfeldes eines PERKEO III Detektorsystems: Bestimmung der optimalen Probenposition zur Charakterisierung eines Elektronendetektors für PERC.* Bachelor-Arbeit, Atominstitut der TU Wien, 2011.
- [26] SAINT-GOBAIN INDUSTRIAL CERAMICS, INC.: *Bicron BC-400 Data Sheet.*
- [27] ELJEN TECHNOLOGY: *Eljen EJ-200 Data Sheet.*
- [28] TORRISI, L.: *Radiation damage in polyvinyltoluene (PVT).* Radiation Physics and Chemistry, 63(1):89–92, 2002.

- [29] SAUERZOPF, C.: *Aufbau und Inbetriebnahme eines Detektorsystems zum Beta-Zerfall des Neutrons*. Diplomarbeit, Atominstitut der TU Wien, 2011.
- [30] KOVACS, C.: *Bachelor-Arbeit*. Atominstitut der TU Wien, Bachelor-Arbeit, 2013, in Arbeit.
- [31] GEANT-COLLABORATION: *Introduction to GEANT4*. E-Publishing, Version: Geant4, 9:14, 2007.
- [32] SELTZER, S. M.: *Electron-photon Monte Carlo calculations: the ETRAN code*. International Journal of Radiation Applications and Instrumentation. Part A. Applied Radiation and Isotopes, 42(10):917–941, 1991.
- [33] SALVAT, F., J. M. FERNÁNDEZ-VAREA und J. SEMPAU: *PENELOPE-2006: A code system for Monte Carlo simulation of electron and photon transport*. In: *Workshop Proceedings*, Band 4, Seite 7, 2006.
- [34] DROUIN, D., A. R. COUTURE, D. JOLY, X. TASTET, V. AIMEZ und R. GAUVIN: *CASINO V2.42 - A Fast and Easy-to-use Modeling Tool for Scanning Electron Microscopy and Microanalysis Users*. Scanning, 29(3):92 – 101, 2007.
- [35] PYPENELOPE: *GUI for the program PENELOPE2011*. <http://pypenelope.sourceforge.net/>, 2013.
- [36] WIETFELDT, F. E., C. TRULL, R. ANDERMAN, F. B. BATEMAN, M. S. DEWEY, A. KOMIVES, A. K. THOMPSON, S. BALASHOV und Y. MOSTOVOY: *A backscatter-suppressed beta spectrometer for neutron decay studies*. Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment, 538:574 – 591, 2005.
- [37] MARTIN, J. W., J. YUAN, M. J. BETANCOURT, B. W. FILIPPONE, S. A. HOEDL, T. M. ITO, B. PLASTER und A. R. YOUNG: *New measurements and quantitative analysis of electron backscattering in the energy range of neutron  $\beta$ -decay*. Phys. Rev. C, 73:015501, 2006.

- [38] PRESS, W. H., B. P. FLANNERY, S. A. TEUKOLSKY, W. T. VETTERLING und J. R. CHIPPERFIELD: *Numerical recipes: the art of scientific computing* : Cambridge University. 199(0):293 – 294, 1987.
- [39] RUTHERFORD, E.: *The Scattering of  $\alpha$  and  $\beta$  Particles by Matter and the Structure of the Atom*. Phil. Mag, 21(669):1911, 1911.
- [40] MOTT, N. F.: *The scattering of fast electrons by atomic nuclei*. Proceedings of the Royal Society of London. Series A, Containing Papers of a Mathematical and Physical Character, 124(794):425–442, 1929.
- [41] ROICK, C. M.: *Untersuchungen zur Elektronendetektion in Neutronenzerfallsexperimenten*. Diplomarbeit, Ruprecht-Karls-Universität Heidelberg, 2013.
- [42] SALVAT, F., A. JABLONSKI und C. J. POWELL: *ELSEPA - Dirac partial-wave calculation of elastic scattering of electrons and positrons by atoms, positive ions and molecules*. Computer Physics Communications, 165(2):157 – 190, 2005.
- [43] KANTER, H.: *Zur Rückstreuung von Elektronen im Energiebereich von 10 bis 100 keV*. Annalen der Physik, 455(1-6):144–166, 1957.
- [44] ERHART, J.: *Dissertation*. Doktorarbeit, Atominstitut der TU Wien, 2014, in Arbeit.
- [45] CERVINKA, T.: *Projektarbeit*. Atominstitut der TU Wien, Projektarbeit, 2013, in Arbeit.