

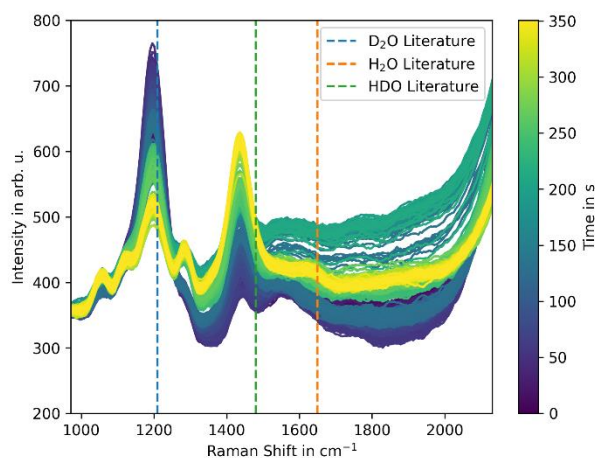


# Cryogenic Temperature Calibration of the T<sub>2</sub>ApIR Experiment

## Bachelor's project at IAP-TLK

### Background

There are 3 relevant isotopes of the hydrogen atom: <sup>1</sup>H protium (99.9885%), <sup>2</sup>H or D deuterium (0.0115%), and <sup>3</sup>H or T tritium (10<sup>-15</sup>%). The heavy isotopes of hydrogen, deuterium and tritium, are widely used both in energy generation in heavy water (D<sub>2</sub>O) reactors or future fusion power plants, and in the life sciences to track molecules labeled with D or T in metabolic processes. For these processes, the hydrogen isotopes are often bound in water molecules, for example as H<sub>2</sub>O, HDO, or D<sub>2</sub>O. To optimize processes that use these water isotopes, such as the enrichment and extraction of deuterium, real-time, in-line monitoring of the concentration of the water isotopes is essential. The measuring systems used for this purpose must be able to cover a wide range of concentrations, from the natural isotope ratio to the pure substance.



### Tasks

This project consists of an experimental and an analytical part. The focus of this work is on determining the detection limit of a Micro-Raman system for HDO and D<sub>2</sub>O in H<sub>2</sub>O. For this purpose, mixtures with different concentrations of H<sub>2</sub>O, D<sub>2</sub>O and HDO are produced or purchased and measured with the Micro-Raman system. The experimental setup is to be optimized to achieve the best possible accuracy and reproducibility. The ultimate goal of the work is to demonstrate that concentrations of HDO corresponding to the natural isotope ratio of deuterium (0.0115%) can be reliably detected and monitored in real time.



## Organisation of the bachelor's project

Training phase: Basics on raman spectroscopy, data analysis

Afterwards, an introductory presentation will be given.

Experimental phase:

- Carrying out measurements on H<sub>2</sub>O, D<sub>2</sub>O and HDO mixtures with a Micro-Raman system
- Optimization of the test setup for reproducibility and accuracy

Analysis phase:

- Determination of the lower detection limit for HDO from the measurements performed

Writing phase: Writing up the bachelor's thesis

Final presentation: After submission of the thesis

## Relevant Topics

- Raman spectroscopy
- Synthesis of calibration mixtures
- Data analysis, e.g. with Python
- Scientific research and communication of the results

## What will be helpful

- Aiming to acquire experience in a lab environment
- Careful consideration of potential factors affecting a measurement

## Supervision:

**Dr. Robin Größle**

[robin.groessle@kit.edu](mailto:robin.groessle@kit.edu)

**Dr. Alexander Marsteller**

[alexander.marsteller@kit.edu](mailto:alexander.marsteller@kit.edu)

**Prof. Dr. Kathrin Valerius**

[kathrin.valerius@kit.edu](mailto:kathrin.valerius@kit.edu)

**The bachelor's project will take place  
at IAP-TLK at KIT Campus North.**



# Sensitivitätsstudie eines Micro-Raman Systems für das Monitoring von Wasserisotopen

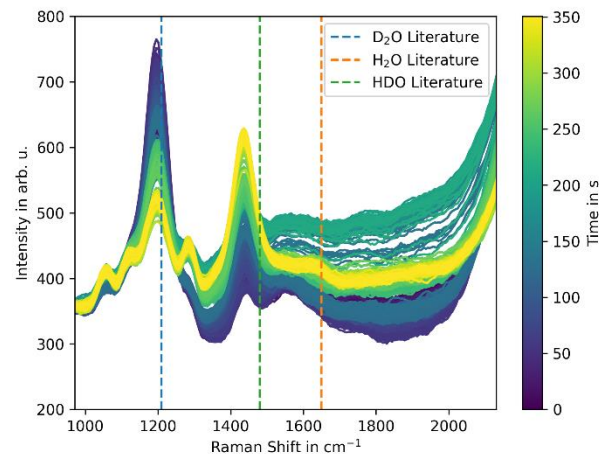
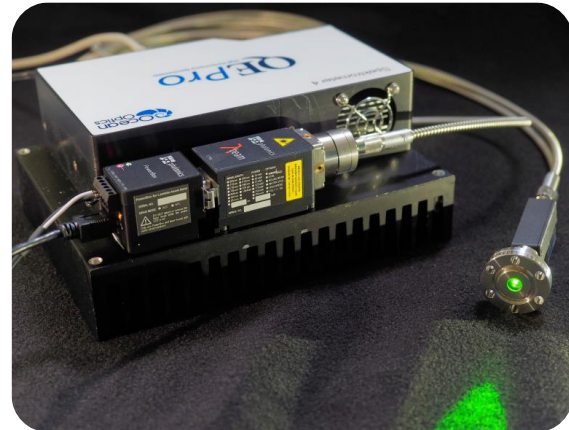
## Bachelor Projekt am IAP-TLK

### Hintergrund

Es gibt 3 relevante Isotope des Wasserstoffatoms:  $^1\text{H}$  Protium (99,9885%),  $^2\text{H}$  oder D Deuterium (0,0115%), und  $^3\text{H}$  oder T Tritium ( $10^{-15}\%$ ). Die schweren Isotope des Wasserstoffs, Deuterium und Tritium, finden breite Anwendung, sowohl in der Energiegewinnung in Schwerwasser ( $\text{D}_2\text{O}$ ) Reaktoren oder zukünftigen Fusionskraftwerken, als auch im Bereich von Life Sciences um mit D oder T markierte Moleküle in Stoffwechselprozessen verfolgen zu können. Für diese Prozesse werden die Wasserstoffisotope oftmals in Wassermolekülen gebunden, also zum Beispiel als  $\text{H}_2\text{O}$ ,  $\text{HDO}$ , oder  $\text{D}_2\text{O}$ , verwendet. Zur Optimierung von Prozessen, wie unter anderem die Anreicherung und Gewinnung von Deuterium, welche diese Wasserisotopologe verwenden, ist eine Echtzeit, in-line Überwachung der Konzentration der Wasserisotopologe essentiell. Hierfür zum Einsatz kommende Messsysteme müssen in der Lage sein eine breite Spanne an Konzentrationen, von dem natürlichen Isotopenverhältnis bis hin zum Reinstoff abzudecken.

### Aufgaben

Dieses Projekt besteht aus einem experimentellen und einem analytischen Teil. Der Schwerpunkt dieser Arbeit liegt auf der Bestimmung des Detektionslimits eines Micro-Raman Systems für  $\text{HDO}$  und  $\text{D}_2\text{O}$  in  $\text{H}_2\text{O}$ . Hierzu werden Mischungen mit verschiedenen Konzentrationen an  $\text{H}_2\text{O}$ ,  $\text{D}_2\text{O}$  und  $\text{HDO}$  hergestellt oder bezogen und mit dem Micro-Raman System vermessen. Der experimentelle Aufbau soll dahingehend optimiert werden eine möglichst gute Genauigkeit und Reproduzierbarkeit zu erreichen. Das ultimative Ziel der Arbeit ist es zu demonstrieren, dass Konzentrationen von  $\text{HDO}$  entsprechend dem natürlichen Isotopenverhältnis von Deuterium (0,0115%) zuverlässig detektiert und in Echtzeit überwacht werden können.





## Aufbau des Bachelor Projekts

Trainingsphase: Grundlagen der Raman Spektroskope, Datenanalyse

Anschließend wird ein Einführungsvortrag gehalten.

Experimentierphase:

- Durchführung von Messungen an H<sub>2</sub>O, D<sub>2</sub>O und HDO Mischungen mit einem Micro-Raman System
- Optimierung des Versuchsaufbaus auf Reproduzierbarkeit und Genauigkeit

Analysephase:

- Bestimmung des unteren Detektionslimits für HDO aus den durchgeführten Messungen

Schreibphase: Anfertigen der Bachelorarbeit

Abschlusspräsentation: Nach Abgabe der Bachelorarbeit

## Relevante Themen

- Raman Spektroskopie
- Erstellung von Kalibriermischungen
- Datenanalyse, z.B. mit Python
- Wissenschaftliches Arbeiten und Kommunikation der Ergebnisse

## Hilfreich dabei sind

- Der Wunsch Erfahrung im Laborumfeld zu gewinnen
- Sorgfältige Betrachtung von Faktoren die eine Messung beeinflussen können

## Betreuung:

Dr. Robin Größle

Dr. Alexander Marsteller

Prof. Dr. Kathrin Valerius

[robin.groessle@kit.edu](mailto:robin.groessle@kit.edu)

[alexander.marsteller@kit.edu](mailto:alexander.marsteller@kit.edu)

[kathrin.valerius@kit.edu](mailto:kathrin.valerius@kit.edu)

Dieses Bachelor Projekt wird am IAP-TLK am KIT Campus Nord stattfinden.