

Ф. А. Даневич¹, В. В. Кобичев¹, Р. В. Кобичев^{1,2},
Г. Краус³, В. Б. Михайлик^{3,4}, В. М. Мокіна¹

¹ Інститут ядерних досліджень НАН України, Київ, Україна

² Теплоенергетичний факультет, Національний технічний університет України
«Київський політехнічний інститут», Київ, Україна

³ Оксфордський університет, Оксфорд, Великобританія

⁴ Джерело синхротронного випромінювання «Діамант», Дідкот, Великобританія

РОЗРАХУНКИ ЗБОРУ СВІТЛОВИХ ФОТОНІВ У СЦИНТИЛЯЦІЙНИХ ДЕТЕКТОРАХ З КРИСТАЛАМИ ВОЛЬФРАМАТУ КАЛЬЦІЮ

Завдяки високим експлуатаційним властивостям оксидні сцинтилятори є перспективними для криогенних сцинтиляційних експериментів, метою яких є дослідження рідкісних ядерних процесів. Для оптимізації світлових виходу та енергетичної роздільної здатності було виконано розрахунки методом Монте-Карло ефективності збору світла для різних геометрій сцинтиляційного детектора з кристалом CaWO_4 за допомогою програм Litranі, Geant4 і Zemax. Результати розрахунків співставлено з даними вимірювань світлових виходу залежно від форми та стану поверхні кристала, матеріалу та форми відбивача, наявності оптичного контакту. Найкращі результати було отримано з кристалами у вигляді прямої призми з основою у формі трикутника, з повністю шліфованою поверхнею, при використанні дзеркального відбивача у формі зрізаного конуса. Показано, що розрахунки за допомогою пакета Litranі найкраще корелюють із результатами експерименту.

Ключові слова: сцинтиляційний детектор, Монте-Карло моделювання, ефективність збору світла, сцинтилятор CaWO_4 .

Вступ

Високі експлуатаційні властивості, такі як відносно великий світловихід, висока енергетична роздільна здатність, негігроскопічність, велика густина та прозорість, радіоактивна чистота та відповідно низький рівень власного фону, сприяють використанню оксидних сцинтиляторів як у фундаментальних фізичних дослідженнях [1, 2], так і в прикладних задачах комп'ютерної томографії (рентгенівської, позитрон-емісійної томографії [3, 4], однофотонної емісійної комп'ютерної томографії) і контролю вантажів [5].

Однією з основних характеристик сцинтиляційного детектора є його енергетична роздільна здатність. Вона залежить від кількості фотонів, які випромінюються на одиницю енергії збудження (у кращих сцинтиляторах цей параметр досягає 100 000 фотонів на 1 MeV [6]), пропорційності світловиходу та однорідності світлозбору, тобто рівномірності відгуку детектора при однаковій поглиненій енергії, незалежно від точки, в якій відбулась сцинтиляція. З метою по-

кращення роздільної здатності сцинтиляційних детекторів проводяться дослідження по оптимізації світлозбору детекторів, у тому числі з використанням комп'ютерних моделей [7, 8]. Комп'ютерне моделювання світлозбору детекторів дозволяє зменшити економічні затрати на створення та підбір оптимальної геометрії детектора. Проте складність опису процесів розповсюдження оптичних фотонів у сцинтиляційному детекторі потребує ретельного узгодження комп'ютерних моделей.

Вимірювання

У вимірюваннях було використано кристали вольфрамату кальцію CaWO_4 у формі циліндра, а також прямих призм із правильною 6-, 4- і 3-кутною основою. Для забезпечення однакових оптичних властивостей кристали були вирізані з однієї кристалічної булі. Вимірювання було проведено за допомогою фотоелектронного помножувача (ФЕП) XP2412 Philips в умовах, зображених на рис. 1.

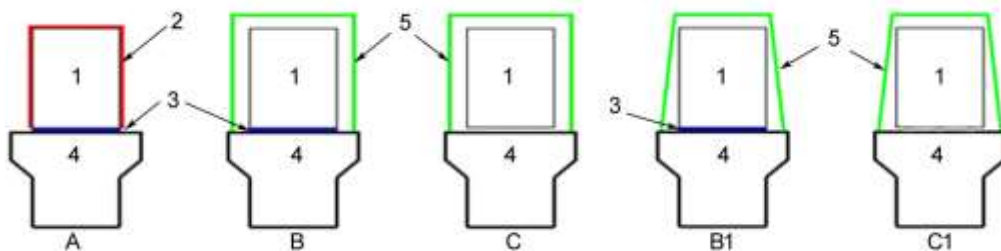


Рис. 1. Умови вимірювань із сцинтиляційними кристалами CaWO_4 (1 - кристал, 2 - тефлонова плівка, 3 - оптичний контакт, 4 - фотоелектронний помножувач, 5 - дзеркальний відбивач світла 3М).

© Ф. А. Даневич, В. В. Кобичев, Р. В. Кобичев,
Г. Краус, В. Б. Михайлик, В. М. Мокіна, 2015

А. Кристал було обгорнуто двома-трьома шарами тефлонової плівки та приєднано до ФЕП за допомогою оптичної змазки.

В. Кристал був оточений циліндричним дзеркальним відбивачем світла фірми 3М розмірами $\varnothing 23,5 \times 21$ мм і приєднаний до ФЕП за допомогою оптичної змазки.

С. Кристал був оточений циліндричним дзеркальним відбивачем 3М розмірами $\varnothing 23,5 \times 21$ мм і розміщений на ФЕП за допомогою трьох кубиків із плексигласу розмірами $2 \times 2 \times 2$ мм без оптичного контакту.

В1. Кристал був оточений дзеркальним відбивачем 3М у формі зрізаного конуса розмірами $\varnothing 23,5 \times 21$ мм і за допомогою оптичної змазки приєднаний до ФЕП.

С1. Кристал був оточений дзеркальним відбивачем 3М у формі зрізаного конуса розмірами $\varnothing 23,5 \times 21$ мм і розміщений на ФЕП за допомогою скляних волокон діаметром 0,3 мм без оптичного контакту.

У кожному експерименті змінювався тип обробки поверхні для кожного з кристалів:

- 1) усі поверхні поліровані;
- 2) дифузна бічна поверхня, інші поліровані;
- 3) дифузні бічна та горішня поверхні, нижня полірована;
- 4) усі поверхні дифузні.

Для забезпечення оптичного контакту (умови А, В, В1) використовувалась оптична змазка Dow Corning Q2-3067. Кристали опромінювались майже паралельним пучком гамма-квантів 661,7 кеВ від віддаленого точкового джерела ^{137}Cs на осі детектора.

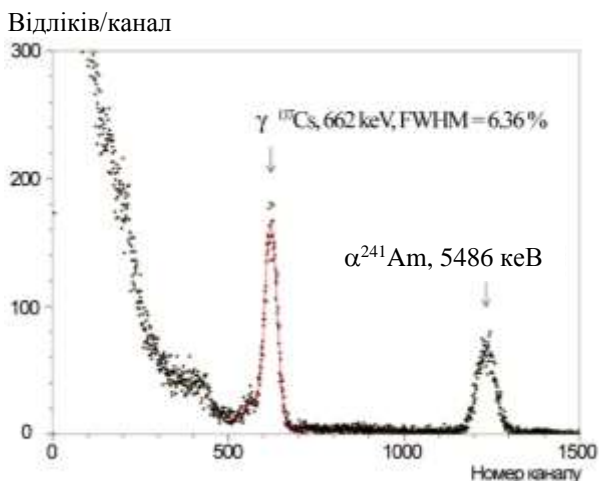


Рис. 2. Енергетичний спектр гамма-квантів ^{137}Cs , який було отримано зі сцинтиляційним кристалом CaWO_4 у формі прямої правильної трикутної призми з дифузною бічною поверхнею з відбивачем світла у формі зрізаного конуса, без оптичного контакту кристала з фотопомножувачем.

Для контролю енергетичної шкали детектора використовувався приклеєний до фотокатода ФЕП додатковий сцинтиляційний кристал CaWO_4 розмірами $5 \times 5 \times 1$ мм із встановленим на ньому колімованим джерелом альфа-частинок ^{241}Am . Умови світлозбору для цього опорного сцинтилятора не змінювалися впродовж усього циклу вимірювань. Сцинтиляційні імпульси від опорного сцинтилятора оброблялися в тому ж тракті, що й імпульси від досліджуваних кристалів, і записувалися до того ж самого енергетичного спектра. На рис. 2 зображено один із вимірених спектрів.

Моделювання розповсюдження фотонів

Метод Монте-Карло

Методом Монте-Карло в широкому розумінні називається моделювання природних та соціальних процесів, що залежать від великої кількості випадкових величин. Основною ідеєю методу є отримання стохастичної моделі, що має ймовірнісні характеристики, аналогічні величинам реального процесу. Основною областю його використання є процеси, для яких неможливо скласти детермінований алгоритм. Як правило, моделювання здійснюється за допомогою комп'ютерів.

Існує багато програмних пакетів для реалізації методу Монте-Карло в галузі фізики ядра, високих енергій та оптики, наприклад: Geant4 [9, 10], Litrani [11 - 13], MCNP (Monte Carlo N-Particle) [14, 15], EGS (Electron Gamma Shower) [16, 17], Zemax [18]. У даній роботі були застосовані пакети Geant4, Litrani і Zemax. Нижче ми дамо коротку характеристику програмних пакетів з точки зору їхнього застосування до моделювання розповсюдження світлових фотонів.

Пакет програм Geant4 був розроблений головним чином для потреб експериментів у фізиці високих енергій. Він складається з набору бібліотек для комп'ютерного моделювання процесів проходження елементарних частинок, атомних ядер та оптичних фотонів через речовини. Робота з Geant4 полягає у написанні програми на C++, що дозволяє описати тривимірну геометричну модель системи, характеристики матеріалів, що є її складовими, детекторів, що входять до складу системи. Матеріали у Geant4 мають такі спектральні (залежні від довжини хвилі) оптичні властивості, як коефіцієнт відбиття, коефіцієнт поглинання, діелектричні константи та властивості поверхні. Також можливо задати властивості спектра фотонів (у сцинтиляційному процесі – часова структура спектра сцинтиляцій з повільними та швидкими компонентами).

Програмний продукт Zemax розроблений для

моделювання, аналізу та проектування оптичних систем. У цьому пакеті є алгоритми для обробки як послідовного (sequential), так і непослідовного режимів, урахування ефектів поляризації. Цей пакет має графічний інтерфейс користувача, надає можливість швидкого моделювання з використанням діалогових вікон. Робота з Zemax полягає у створенні певного набору поверхонь та встановлення їхніх параметрів у редакторі LDE (Lens Data Editor). Підтримка користувачів організована на досить високому рівні – створена окрема база знань для пошуку рішень конкретних проблем.

Програмний пакет Litranі являє собою набір бібліотек для моделювання поширення світла, описаних за допомогою програмного пакета ROOT. Основними особливостями програмного продукту є можливість використання оптичної ізоτροпії/анізотропії для діелектричної константи та довжини поглинання, тобто завдання цих величин стати скалярами або симетричними тензорами, а також можливість моделювати системи з різними фотодетекторами: фотодіодами, фотоелектронними помножувачами, газовими детекторами фотонів.

Верифікація програм

Була прийнята одноточкова модель висвітлювання. Положення точки висвітлювання при розрахунках були випадково розподілені у кристалі: рівномірно вздовж осей *x* та *y*, а вздовж осі *z* – за законом $\sim \exp(-z/l)$, де $l = 14.47$ мм – середній пробіг гамма-квантів 662 кеВ у сцинтиляторі CaWO₄ (крім пакета Zemax, який дозволяє тільки рівномірний розподіл). Фотони, що випромінюються, мають випадковий ізотропний розподіл за

напрямом та випадкову поляризацію. Для визначення найкращого програмного пакета для моделювання розповсюдження оптичних фотонів у сцинтиляційних детекторах було використано критерій мінімальності середньоквадратичного відхилення експериментальних даних від розрахункових. Дані було нормовано відносно максимальної експериментальної точки та відповідних точок, отриманих у результаті моделювання. Середньоквадратичне відхилення розраховувалось за формулою

$$\psi = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^n (a_i - b_i)^2}{n \cdot (n - 1)}}$$

де a_i – експериментальні значення; b_i – відповідні дані чисельних експериментів для кожного з програмних пакетів; n – кількість ступенів свободи (для використаного набору експериментальних та розрахункових даних $n = 80$). Було отримано такі значення середньоквадратичних відхилень: $\psi = 0,039$ для Geant4, $\psi = 0,038$ для Zemax і $\psi = 0,028$ для Litranі.

Таким чином, можна стверджувати, що кращу узгодженість з експериментальними даними (найменше значення середньоквадратичного відхилення) у даних умовах показав програмний пакет Litranі. Враховуючи цей результат, було прийняте рішення використати пакет Litranі для моделювання і порівняння з експериментом.

Результати моделювання

Вхідні параметри для моделювання світлових фотонів наведено нижче. Спектральні характеристики матеріалів та фотокатода показано на рис. 3 і 4.

Вхідні параметри для моделювання

Розмір циліндра	40×40 мм
Розмір 3-, 6- та 4-кутної призми	Зовнішній діаметр 40 мм, висота 40 мм
Показник заломлення CaWO ₄	1,92 [19]
Показник заломлення змазки для забезпечення оптичного контакту	1,4658 (дані виробника)
Показник заломлення скла ФЕП	1,5 (дані виробника)
Показник відбивання плівки ЗМ	0,99 (дані виробника)
Кількість фотонів для моделі	10 000 фотонів × × 10 000 вертексів = 10 ⁸
Розмір фотокатода ФЕП	Діаметр 78 мм
Імовірність емісії фотона з певною довжиною хвилі в CaWO ₄	Рис. 3 (дані з [20])
Спектральна залежність квантового виходу фотокатода ФЕП	Рис. 3 (дані виробника)
Показник відбивання тефлону	Рис. 4 (дані виробника)

Результати моделювання за допомогою пакета програм Litranі сцинтиляторів різної форми, у різних геометріях рефлектора й оптичного контакту та з різними типами обробки поверхні наведено на рис. 5 - 8. Діаметр кружечків та числа в них на графіках відповідають відсотку кількості

фотоелектронів (вони утворилися при потрап- лянні фотонів на фотокатод ФЕП) від кількості випромінених фотонів. Експериментальні значення відносної амплітуди сигналів нормовано для даних, отриманих із полірованим циліндром в усіх умовах вимірювань.

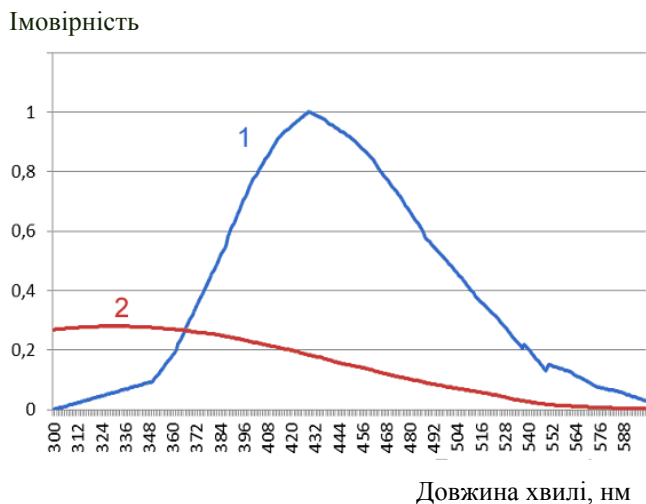


Рис. 3. Спектр емісії CaWO_4 (1), нормований на одиницю в максимумі, та спектральна залежність квантової ефективності фотокатода ФЕП (2).

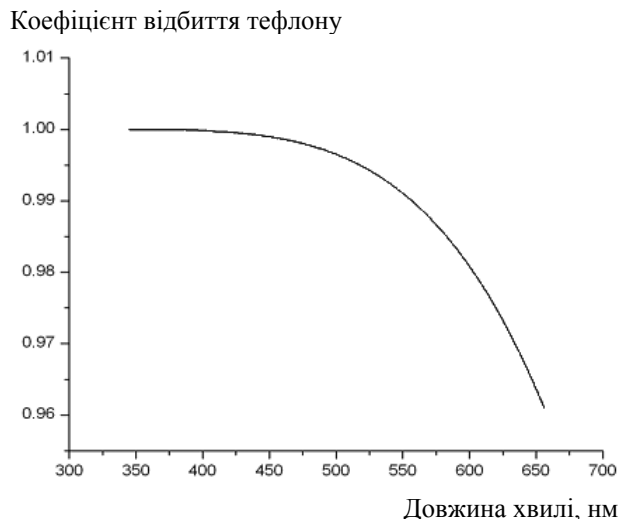


Рис. 4. Крива спектральної залежності коефіцієнта відбивання тефлонової плівки від довжини хвилі.

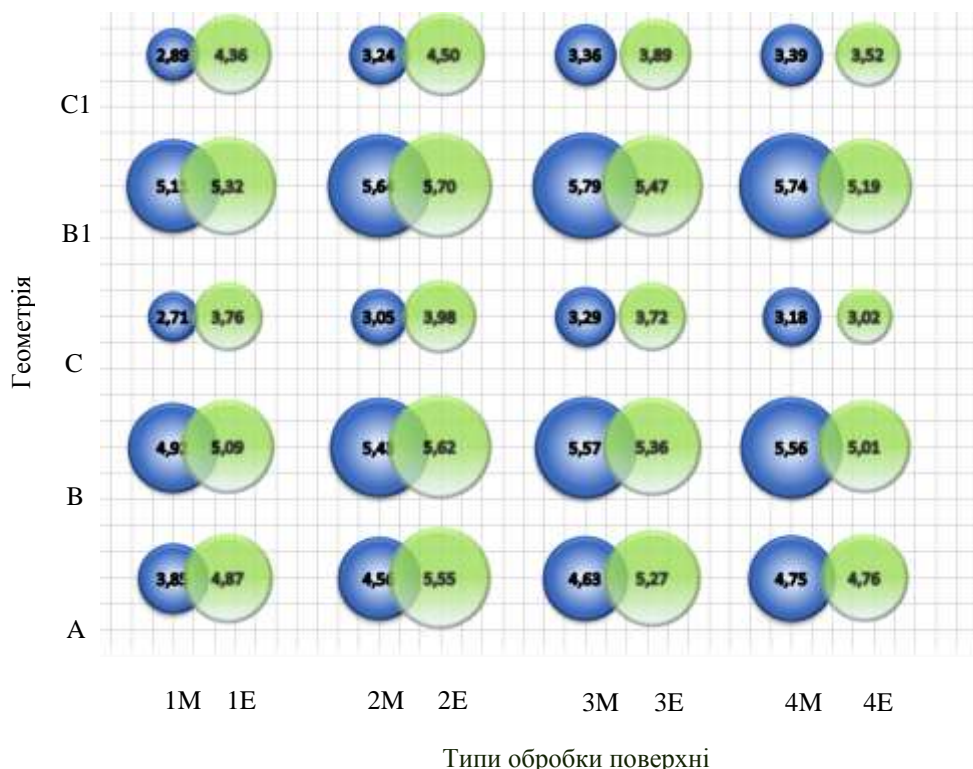


Рис. 5. Результати для циліндричного кристала. Діаметр кружечків та числа в них відповідають відсотку кількості фотоелектронів на ФЕП від кількості випромінених фотонів. Тут і далі типи обробки: 1 – усі поверхні поліровані; 2 – дифузна бічна поверхня, інші поліровані; 3 – дифузні бічна та горішня поверхні, нижня полірована; 4 – усі поверхні дифузні. Результати моделювання позначено літерою М, експериментальні дані – літерою Е. «Геометрія» позначає умови вимірювань (див. рис. 1). (Див. кольоровий рисунок на сайті журналу.)

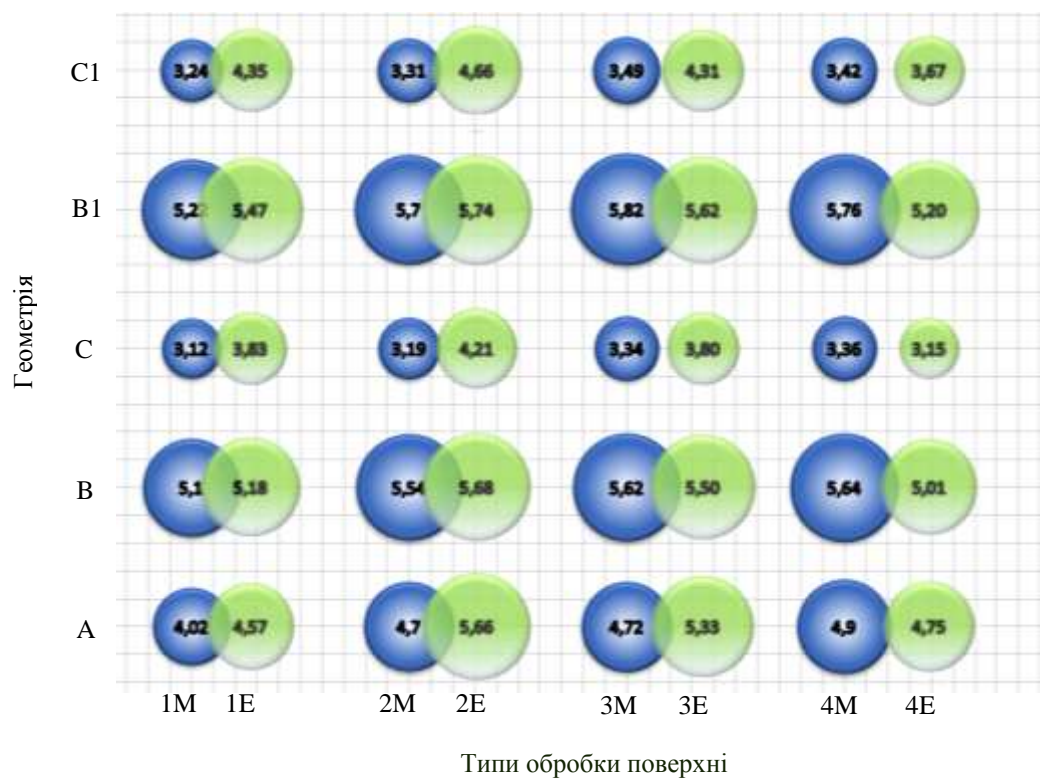


Рис. 6. Результати для гексагонального кристала (пряма призма з правильною 6-кутною основою).
(Див. кольоровий рисунок на сайті журналу.)

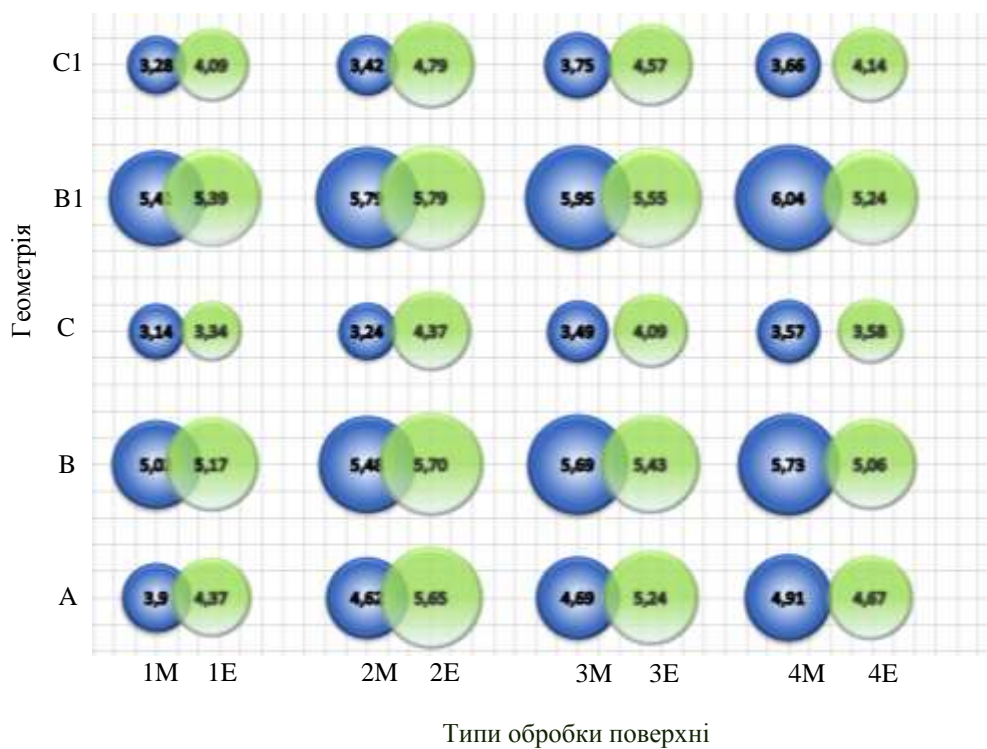


Рис. 7. Результати для прямокутного кристала (пряма призма з квадратною основою).
(Див. кольоровий рисунок на сайті журналу.)

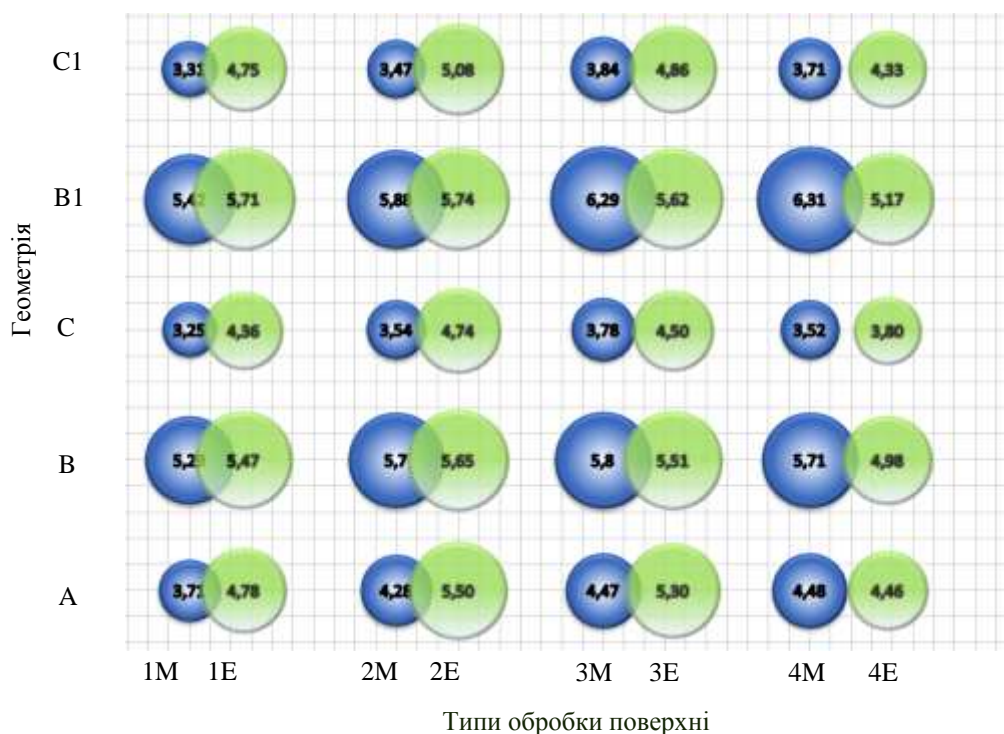


Рис. 8. Результати для трикутного кристала (пряма призма з основою у формі правильного трикутника). (Див. кольоровий рисунок на сайті журналу.)

Висновки

Розроблено методи розрахунку ефективності світлозбору у скінтіляційних детекторах з кристалами вольфрамату кальцію за допомогою пакетів програм Geant4, Litrani і Zemax. Краще узгодження з експериментом досягнуто в розрахунках за допомогою пакета Litrani. Проте ми не стверджуємо, що цей пакет має переваги над іншими, а лише констатуємо факт кращого узгодження розрахунків, виконаних за допомогою цього програмного засобу, з нашими вимірюваннями.

Як вимірювання, так і моделювання показали, що при наявності оптичного контакту з фотоприймачем найвищу ефективність світлозбору мають скінтіляційні детектори з кристалами CaWO_4 у формі трикутної та прямокутної призм із повністю дифузною поверхнею в геометрії B1 (дзеркальний відбивач світла у формі зрізаного конуса). В умовах вимірювань без оптичного контакту, що відповідає умовам світлозбору у

криогенних скінтіляційних болометрах, найвища ефективність світлозбору теж отримана для трикутної та прямокутної призм із повністю дифузною поверхнею в геометрії C1 (дзеркальний відбивач світла у формі зрізаного конуса).

Результати і висновки даної роботи можна застосувати для цілого ряду скінтіляційних кристалів, перспективних з огляду на їхнє використання у криогенних експериментах із пошуку подвійного бета-розпаду й темної матерії, а саме: вольфраматів кадмію (CdWO_4) і цинку (ZnWO_4), молібдатів кальцію (CaMoO_4), літію (Li_2MoO_4) і цинку (ZnMoO_4), селеніду цинку (ZnSe).

Дослідження, описані у цій статті, частково були підтримані грантом Королівського наукового товариства Великої Британії “Cryogenic scintillating bolometers for priority experiments in particle physics” («Криогенні скінтіляційні болометри для пріоритетних експериментів у фізиці частинок»).

СПИСОК ЛІТЕРАТУРИ

REFERENCES

1. Даневич Ф.А. Сцинтилляторы в астрофизике частиц // Тр. междунар. конф. «Инженерия сцинтилляционных материалов и радиационные технологии» (ИСМАРТ-2008). - Харьков: ИСМА, 2009. - С. 54 - 92. (Danevich F.A. Scintillators in particle astrophysics // Proc. of the Intern. Conf. “Engineering of the scintillation materials and radiation technologies” (ESMRT-2008). - Kharkov: ISMA, 2009. - P. 54 - 92. (Rus))
2. Mikhailik V.B., Kraus H. Performance of scintillation materials at cryogenic temperatures // Phys. Status Solidi B. - 2010. - Vol. 247, No. 7. - P. 1583 - 1599.
3. Lorincz E., Erdei G., Peczei I. et al. Modeling and

- Optimization of Scintillator Arrays for PET Detectors // IEEE Transactions on Nuclear Science. - 2010. - Vol. 57. - P. 48 - 54.
4. Melcher C.L. Scintillation Crystals for PET // The Journal of Nuclear Medicine. - 2000. - Vol. 41. - P. 1051.
 5. Orphan V.J., Muenchau E., Gormley J., Richardson R. Advanced γ ray technology for scanning cargo containers // Applied Radiation and Isotopes. - 2005. - Vol. 63. - P. 723.
 6. Cherepy N.J., Smestad G.P., Grätzel M., Zhang J.Z. Strontium and barium iodide high light yield scintillators // Applied Physics Letters. - 2008. - Vol. 92. - P. 083508.
 7. F.A. Danevich, R.V. Kobychев, V.V. Kobychев et al. Optimization of light collection from crystal scintillators for cryogenic experiments // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research A. - 2014. - Vol. 744. - P. 41.
 8. Danevich F.A., Kobychев V.V., Kobychев R.V. et al. Impact of geometry on light collection efficiency of scintillation detectors for cryogenic rare event searches // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B. - 2014. - Vol. 336. - P. 26 - 30.
 9. Allison J., Amako K., Apostolakis J. et al. Geant4 developments and applications // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research A. - 1996. - Vol. 369. - P. 164.
 10. Agostinelli S., Allison J., Amako K. et al. Geant4 - a simulation toolkit // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research A. - 2003. - Vol. 506. - P. 250 - 303.
 11. Home page of Litrani. Режим доступу до ресурсу: <http://gentitfx.fr/litrani/>
 12. General presentation of Litrani 2. Режим доступу до ресурсу: <http://gentitfx.fr/litrani/intro/intro2.html>
 13. Gentit F.X. Litrani: a general purpose Monte-Carlo program simulating light propagation in isotropic or anisotropic media // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research A. - 2002. - Vol. 486. - P. 35.
 14. Los Alamos National Laboratory: MCNP Home Page. Режим доступу до ресурсу: <https://mcnp.lanl.gov/>
 15. Briesmeister J.F. MCNPТМ - A general Monte Carlo N-particle transport code, Version 4C, LA-13709-M, Los Alamos National Laboratory, 2000.
 16. Electron Gamma Shower Explained. Режим доступу до ресурсу: <http://durpdg.dur.ac.uk/vvc/egs/Default.htm>
 17. Kawrakow I., Rogers D.W.O. The EGSnrc code system: Monte Carlo simulation of electron and photon transport: NRCC Report PIRS-701. - Ottawa, 2003. - P. 287.
 18. Zemax - Optical and Illumination Design Software. Режим доступу до ресурсу: <http://www.radiantzemax.com/en/zemax>
 19. Derenzo S.E., Moses W.W. Experimental Efforts and Results in Finding New Heavy Scintillators // Heavy Scintillators for Scientific and Industrial Applications: Proc. of the "Crystal 2000" Intern. Workshop / Ed. F. De Notaristefani, P. Lecoq, M. Schneegans. - Editions Frontieres, 1993. - ISBN 9782863321287. - 625 p.
 20. Mikhailik V.B., Kraus H., Miller G. et al. Luminescence of CaWO₄, CaMoO₄, and ZnWO₄ scintillating crystals under different excitations // Journal of Applied Physics. - 2005. - Vol. 97. - P. 083523.

**Ф. А. Даневич¹, В. В. Кобычев¹, Р. В. Кобычев^{1,2},
Г. Краус³, В. Б. Михайлик^{3,4}, В. М. Мокина¹**

¹ Інститут ядерних досліджень НАН України, Київ, Україна

² Теплоенергетический факультет, Національний технічний університет України «Київський політехнічний інститут», Київ, Україна

³ Оксфордський університет, Оксфорд, Великобританія

⁴ Істочник синхротронного випромінювання «Діамант», Дідкот, Великобританія

РАСЧЕТЫ СБОРА СВЕТОВЫХ ФОТОНОВ В СЦИНТИЛЯЦИОННЫХ ДЕТЕКТОРАХ С КРИСТАЛЛАМИ ВОЛЬФРАМАТА КАЛЬЦИЯ

Благодаря высоким эксплуатационным свойствам оксидные сцинтилляторы являются перспективными для криогенных сцинтилляционных экспериментов, целью которых является исследование редких ядерных процессов. Для оптимизации световых выходов и энергетического разрешения нами были выполнены расчеты методом Монте-Карло эффективности светосбора для различных геометрий сцинтилляционного детектора с кристаллом CaWO₄ с помощью программ Litrani, Geant4 и Zemax. Результаты расчетов сопоставлены с данными измерений световых выходов в зависимости от формы и состояния поверхности кристалла, материала и формы отражателя, наличия оптического контакта. Лучшие результаты были получены с кристаллами в виде прямой призмы с основанием в форме треугольника, с полностью шлифованной поверхностью, с использованием зеркального отражателя в форме срезанного конуса. Показано, что расчеты с помощью пакета Litrani лучше коррелируют с результатами эксперимента.

Ключевые слова: сцинтилляционный детектор, Монте-Карло моделирование, эффективность сбора света, сцинтиллятор CaWO₄.

**F. A. Danevich¹, V. V. Kobychев¹, R. V. Kobychев^{1,2},
H. Kraus³, V. B. Mikhailik^{3,4}, V. M. Mokina¹**

¹ *Institute for Nuclear Research, National Academy of Sciences of Ukraine, Kyiv, Ukraine*

² *Heat Power Engineering Faculty, National Technical University of Ukraine
"Kyiv Politechnic Institute", Kyiv, Ukraine*

³ *Department of Physics, University of Oxford, Oxford, UK*

⁴ *Diamond Light Source, Didcot, UK*

SIMULATION OF LIGHT COLLECTION IN CALCIUM TUNGSTATE SCINTILLATION DETECTORS

Due high operational properties, the oxide scintillators are perspective for cryogenic scintillation experiments with aim of study of rare nuclear processes. In order to optimize light yield and the energy resolution we performed calculations of the efficiency of light collection for different geometries of scintillation detector with CaWO_4 crystal by Monte-Carlo method using Litrani, Geant4 and Zemax packages. The calculations were compared with experimental data in the same configurations, depending on the crystal shape, surface treatment, material and shape of the reflector and presence of optical contact. The best results were obtained with crystals shaped as the right prism with triangle base, with completely diffused surfaces, using mirror reflector shaped as a truncated cone. Simulations by using Litrani have shown the best correlation with experimental results.

Keywords: scintillation detector, Monte Carlo simulation, light collection efficiency, CaWO_4 crystal scintillator.

Надійшла 20.10.2015

Received 20.10.2015