

清华大学

综合论文训练

题目：GPU 光线追踪液闪探测器模拟

系 别：工程物理系

专 业：工程物理专业

姓 名：刘学伟

指导教师：续本达教授

2020年6月3日

GPU 光线追踪液闪探测器模拟

刘学伟

关于学位论文使用授权的说明

本人完全了解清华大学有关保留、使用学位论文的规定，即：学校有权保留学位论文的复印件，允许该论文被查阅和借阅；学校可以公布该论文的全部或部分内 容，可以采用影印、缩印或其他复制手段保存该论文。

(涉密的学位论文在解密后应遵守此规定)

签 名：_____ 导师签名：_____ 日 期：_____

中文摘要

在目前的中微子物理实验中，我们需要对探测得到的信号和数据有着足够准确的理解，为此往往通过蒙特卡罗方法对探测器进行建模和模拟。一些大型的中微子探测器通过在液体闪烁体表面安装光电倍增管，检测单光子级别的微弱信号，进而对光电倍增管输出的信号进行分析处理、重建得到入射粒子的一系列信息。在这个过程中，液闪光学性质和探测器结构直接影响闪烁光子在液闪探测器内部的传播过程，进而对探测器 PMT 接收光子信号产生影响。本论文基于目前液闪中微子实验的蒙特卡罗模拟背景，探讨了液闪中存在的几种主要的光学物理过程；使用 GPU 加速探测器模拟中耗时最多的光线传播部分，减少了模拟用时。

- 论文对涉及液闪不同组分 (LAB、PPO 和 bis-MSB 等) 光学性质的主要指标进行了调研，包括衰减长度、瑞利散射、吸收-重发射、光谱和荧光量子产额等，并归纳和比较了来自不同中微子实验的测量结果，得到对液闪光学性质的基本理解。调研结果可作为 GPU 光子模拟部分的材料特性输入。
- 论文介绍了 Geant4 和 Nvidia® OptiX™ 的基本功能实现。为了将 CPU 上进行的 Geant4 基础物理模拟与 GPU 上进行的光子传播模拟结合起来，论文参考了 Simon Blyth 的工作 Opticks，根据其实现思路完成了初步的 GPU 加速模拟实现，并得到了比较可观的加速效果。

关键词：液体闪烁体；光学性质；GPU；蒙特卡罗

ABSTRACT

In the current neutrino physics experiments, we need to have accurate understanding of the detected signals and data. Therefore, the detectors are usually modeled and simulated by Monte Carlo(MC) method. Some large neutrino detectors look for weak signals at single photon level by installing photomultiplier tubes(PMT) on the surface of liquid scintillator(LS). Then the output signals of PMT are analyzed and reconstructed to obtain various information of incident particles. In the processes, LS optical properties and detector structure have a direct influence on the propagation of scintillation photons in LS detector. As a result, the photon signals received by PMTs are also affected. Based on a survey of previous liquid scintillator neutrino experiments and Monte Carlo simulation method, the thesis explores several dominant optical physical processes occurring in LS; In addition, GPU is used to accelerate the photon propagation part in MC simulation, which dramatically reduces total MC simulation time.

- The optical properties of different components(LAB, PPO and bis-MSB) in LS are investigated, including attenuation length, scattering length, emission spectrum and fluorescence quantum yield. The measurement results from different neutrino experiments are summarized and compared, which are used as the input of material properties for GPU photon simulation.
- The basic functions of Geant4 and NVIDIA® OptiX™ are introduced in this part. In order to combine basic physical simulation on Geant4 with the photon simulation on GPU, this paper refers to Simon Blyth's Opticks project. The preliminary GPU acceleration simulation is completed, which shows considerable acceleration.

Keywords: liquid scintillator; optical property; GPU; Monte Carlo

目 录

第 1 章 引言	1
1.1 中微子物理	1
1.1.1 中微子振荡图像	2
1.1.2 中微子实验回顾	4
1.2 粒子物理蒙特卡罗模拟	6
1.3 论文工作简介	7
第 2 章 液体闪烁体的光学性质	8
2.1 主要光学物理过程	8
2.2 衰减长度	9
2.3 瑞利散射	12
2.3.1 散射长度	13
2.3.2 瑞利散射长度测量原理	13
2.3.3 测量结果	17
2.4 吸收-重发射	17
2.4.1 光谱	17
2.4.2 荧光量子产额	19
第 3 章 基于 GPU 的液闪探测器模拟	22
3.1 Geant4 模拟	22
3.1.1 历史	22
3.1.2 功能描述	23
3.2 GPU 光子传播计算	23
3.2.1 背景	23
3.2.2 NVIDIA® OptiX™	24
3.3 混合工作流	25
3.3.1 Geometry 分析	26
3.3.2 光学物理过程编写	28
3.4 已有结果	28

第 4 章 结果	31
4.1 工作总结	31
4.2 待解决问题和计划	31
插图索引	33
表格索引	34
公式索引	35
参考文献	37
致 谢	40
声 明	41
附录 A 外文资料的调研阅读报告	42

主要符号对照表

GPU	图形处理器 (Graphics Processing Unit)
LS	液体闪烁体 (Liquid Scintillator)
MC	蒙特卡罗 (Monte Carlo)
SM	标准模型 (Standard Model)

第 1 章 引言

1.1 中微子物理

中微子是一种电中性的基本粒子，自旋量子数 $1/2$ ，为费米子，参与弱相互作用和引力相互作用。由于中微子质量非常小，可以认为引力相互作用基本不起作用，主要相互作用为弱相互作用。

粒子物理的标准模型 (Standard Model, SM) 理论描述了宇宙中的基本粒子之间的已知四种相互作用力的三种相互作用力 (电磁相互作用、强相互作用和弱相互作用，除引力相互作用)，在 20 世纪中后期得到了充足的发展，并成功预言了夸克、轻子、Higgs 玻色子等基本粒子的存在 (图1.1)。

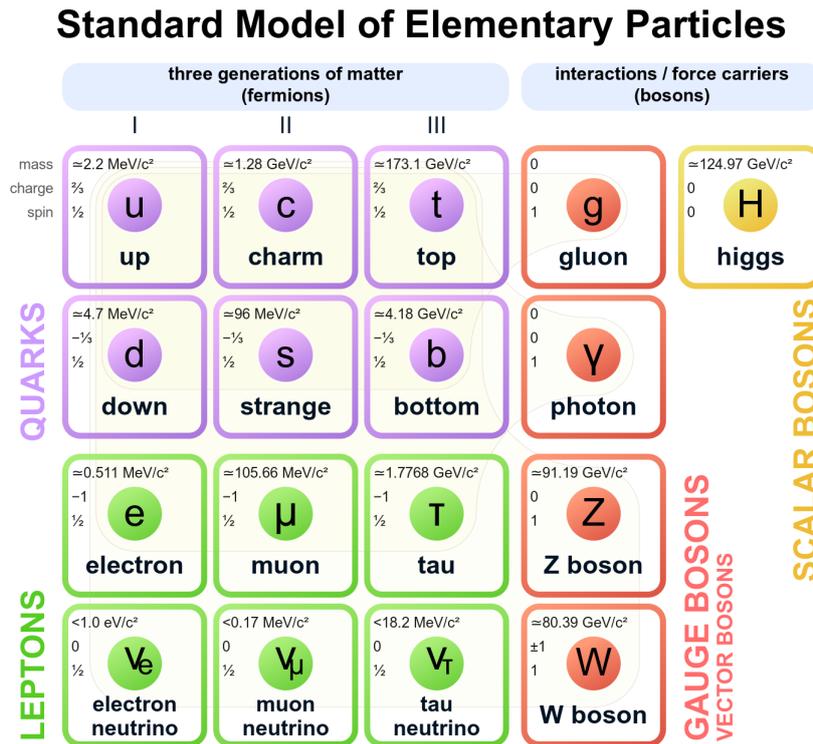


图 1.1 粒子物理标准模型^[1]

标准模型给出了与三代轻子 (e 、 μ 和 τ) 相对应的三代中微子: e 中微子 (ν_e)、 μ 中微子 (ν_μ) 和 τ 中微子 (ν_τ)。每个“味”的中微子存在与它们自旋量子数相同

(1/2)、且同为电中性的反粒子 $\bar{\nu}_e$ 、 $\bar{\nu}_\mu$ 和 $\bar{\nu}_\tau$ 。由于中微子振荡现象在实验上得到了证实，证明中微子存在非零质量，随后标准模型基于这一结果进行了扩充。

1.1.1 中微子振荡图像

若只考虑两个中微子味道本征态 ν_μ 和 ν_e 的情形，每个味道本征态是两个质量本征态 ν_1 和 ν_2 的线性叠加。可以通过一个包含混合角 θ 的么正变换将它们联系起来：

$$\begin{pmatrix} \nu_\mu \\ \nu_e \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos \theta & \sin \theta \\ -\sin \theta & \cos \theta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \nu_1 \\ \nu_2 \end{pmatrix} \quad (1-1)$$

$$\nu_\mu = \nu_1 \cos \theta + \nu_2 \sin \theta$$

$$\nu_e = -\nu_1 \sin \theta + \nu_2 \cos \theta$$

其中波函数 ν_μ 和 ν_e 为正交态。

中微子随时间的变化应从质量本征态出发，由 Schödinger 方程描写：

$$i \frac{\partial}{\partial t} |\nu_i(t)\rangle = H |\nu_i(t)\rangle$$

$$|\nu_i(t)\rangle = |\nu_i(0)\rangle e^{-iE_i t}$$

则中微子质量本征态 ν_1 和 ν_2 在真空中的传播可表示为

$$|\nu_1(t)\rangle = |\nu_1(0)\rangle e^{-iE_1 t}$$

$$|\nu_2(t)\rangle = |\nu_2(0)\rangle e^{-iE_2 t} \quad (1-2)$$

考虑相对论近似 $m_i \ll E_i$ ，其中 $i = 1, 2$ ，则

$$E_i = \sqrt{p_i^2 + m_i^2} \approx p_i \left(1 + \frac{m_i^2}{2p_i^2} \right) \approx E + \frac{m_i^2}{2E} \quad (1-3)$$

(1-3) 中 E 可理解为产生中微子的平均能量，也可理解为 $m_i = 0$ 时的中微子能量。若 $t = 0$ 时为 μ 中微子，即 $\nu_\mu(0) = 1$ ， $\nu_e(0) = 0$ ，由 (1-1) 得

$$\nu_1(0) = \nu_\mu(0) \cos \theta \quad (1-4)$$

$$\nu_2(0) = \nu_\mu(0) \sin \theta$$

$$\nu_\mu(t) = \cos \theta \nu_1(t) + \sin \theta \nu_2(t) \quad (1-5)$$

由 (1-2)(1-4)(1-5) 可得时间 t 处观测到 μ 中微子的幅度 A_μ 和概率 P_μ 分别为

$$A_\mu = \frac{v_\mu(t)}{v_\mu(0)} = \cos^2 \theta e^{-iE_1 t} + \sin^2 \theta e^{-iE_2 t} \quad (1-6)$$

$$P_\mu = \frac{I_\mu(t)}{I_\mu(0)} = A_\mu A_\mu^* = 1 - \sin^2 2\theta \sin^2 \frac{(E_2 - E_1)t}{2} \quad (1-7)$$

由于中微子质量很小，速度 $v_i = p_i/E_i \approx 1$ ，飞行距离 L 所用时间 $t = L/v$ ，可作近似 $t \sim L$ 。令 $\Delta m = m_2^2 - m_1^2$ ，结合 (1-3) 可得

$$P(\nu_\mu \rightarrow \nu_\mu) = 1 - \sin^2 2\theta \sin^2 \frac{\Delta m L}{4E} \quad (1-8)$$

$$P(\nu_\mu \rightarrow \nu_e) = 1 - P(\nu_\mu \rightarrow \nu_\mu) \quad (1-9)$$

由 (1-8) 和 (1-9) 可知，对于给定的混合角 θ ，随着传播距离 L 的变化， ν_μ 转化为 ν_e 的概率以正弦式变化，且对于 $\Delta m L/(4E) = k\pi$ (k 为整数) 将回到 ν_μ 。为了使中微子振荡发生，必须存在混合 (θ)，且质量必须不相等。

对于目前已知的三代中微子的味道本征态 ν_α (ν_e 、 ν_μ 和 ν_τ) 和质量本征态 ν_j (ν_1 、 ν_2 和 ν_3)，可通过一个混合矩阵 $U_{\alpha j}$ 将它们联系起来：

$$|\nu_\alpha\rangle = U_{\alpha j}^* |\nu_j\rangle \quad (1-10)$$

$$\mathbf{U} = \begin{pmatrix} U_{e1} & U_{e2} & U_{e3} \\ U_{\mu1} & U_{\mu2} & U_{\mu3} \\ U_{\tau1} & U_{\tau2} & U_{\tau3} \end{pmatrix} \quad (1-11)$$

对该么正混合矩阵参数化得到

$$\mathbf{U} = \begin{pmatrix} c_{13}c_{12} & c_{13}s_{12} & s_{13}e^{-i\delta} \\ -c_{23}s_{12} - s_{13}c_{12}s_{23}e^{+i\delta} & c_{23}c_{12} - s_{13}s_{12}s_{23}e^{+i\delta} & c_{13}s_{23} \\ s_{23}s_{12} - s_{13}c_{12}c_{23}e^{+i\delta} & s_{23}c_{12} - s_{13}s_{12}c_{23}e^{+i\delta} & c_{13}s_{23} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & & \\ & e^{i\alpha} & \\ & & e^{i\beta} \end{pmatrix} \quad (1-12)$$

其中 $s_{ij} = \sin \theta_{ij}$ ， $c_{ij} = \cos \theta_{ij}$ ， δ 为 Dirac 相位， α 和 β 为两个 Majorana 相位。直观起见，可以对 \mathbf{U} 矩阵作如下分解

$$\mathbf{U} = \begin{pmatrix} 1 & & \\ & c_{23} & s_{23} \\ & -s_{23} & c_{23} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_{13} & s_{13}e^{-i\delta} \\ & 1 \\ -s_{13}e^{i\delta} & c_{13} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_{12} & s_{12} \\ -s_{12} & c_{12} \\ & & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & & \\ & e^{i\alpha} & \\ & & e^{i\beta} \end{pmatrix} \quad (1-13)$$

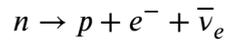
(1-13) 分解得到的三项分别与不同的混合模式 θ_{ij} (θ_{12} 、 θ_{23} 和 θ_{13}) 相关联。

相应地，可以得到三代中微子情形下，中微子在经过一段距离 L 后，由产生时的味道 α 变为探测器探测到的味道 β 的概率为

$$P_{\nu_\alpha \rightarrow \nu_\beta} = \left| \sum_k U_{\beta k}^* \exp\left(-i \frac{m_k^2 L}{2E}\right) U_{\alpha k} \right|^2 \quad (1-14)$$

1.1.2 中微子实验回顾

为了解决 β 衰变实验中测得电子能量的连续谱，与根据能量守恒和动量守恒得到两体衰变的电子能量的分立谱之间的矛盾，Pauli 于 1930 年提出 β 衰变产物中存在当时未被人们观测到的中性粒子，即后来的中微子。中微子的假说帮助 Fermi 建立了 β 衰变的基本理论：



这里，一个中子 (n) 衰变为一个质子 (p)、电子 (e^-) 和反电子中微子 ($\bar{\nu}_e$)。

1934 年，Bethe 和 Peierls 估计了核反应过程中的中微子作用截面^[2]。以反 β 衰变为例： $\bar{\nu}_e + p \rightarrow e^+ + n$ ，对于 1 MeV 的反中微子，相互作用截面的量级约为 10^{-43}cm^2 ，意味着中微子在固体中的平均自由程量级约为数十光年。中微子与物质极小的作用概率给中微子的直接探测带来了很大的难度。

1942 年，王淦昌提出了利用 ^7Be 的 K 层电子俘获核反冲过程来探测中微子的方法： $^7\text{Be} + e^- \rightarrow ^7\text{Li} + \nu_e$ 。根据能量守恒和动量守恒，以及测得的反冲核的能量和动量，即可得到中微子的能量和动量。随后，Allen 根据王淦昌的建议进行实验，从实验上间接地证实了中微子的存在。

对中微子的首次直接探测来自于 Reines 和 Cowan 的实验。利用反 β 衰变的原理，他们在距萨瓦纳河反应堆 11 米、地下 12 米的地方，使用 400 千克氯化镭水溶液和 4200 升液体闪烁体组成的探测器探测反应堆中微子。经过约 100 天的实验，终于探测到少量反中微子 (3.0 ± 0.2 个/小时)^[3]，实验结果与理论符合得很好。Reines 因为这项工作获得了 1995 年的诺贝尔物理学奖。

1962 年，Lederman、Schwartz 和 Steinberger 使用 Brookhaven 实验室的 15 GeV 质子加速器 AGS，建造了世界上第一条中微子束流^[4]，并且探测到了该中微子源在探测器上产生的 μ 子，发现了除 ν_e 之外的第二代中微子 ν_μ ，因此获得了 1988 年的诺贝尔物理学奖。而对于目前已知的第三代中微子 ν_τ ，则是在 2000 年由 FNAL 的 DONUT 实验发现。54 名来自不同国家的科学家通过对几百万例有用反应的长期分析^[3]，最终共观察到 4 个事例。

借助太阳中微子携带的来自太阳内部的信息，我们能够更好地理解太阳结构及其内部发生的物理过程。Raymond Davis 通过太阳中微子与 ^{37}Cl 作用产生放射性 ^{37}Ar 的反应^①来进行探测。1968年，Davis 将一个长 14.6 m、直径 6.1 m、装有 $3.8 \times 10^5\text{L}$ C_2Cl_4 的容器埋在美国 South Dakota 州 Homestake 的一个距离地面 1500 m 深的金矿中，采用化学提纯的方法将生成的 ^{37}Ar 从 C_2Cl_4 中提取出来，通过测量其放射性来计算太阳中微子的通量^[3]。该工作证实了太阳能量来自于核聚变，Davis 因而获得了 2002 年的诺贝尔物理学奖。然而，经过 30 余年的观测，Davis 观测得到的太阳中微子通量大约只有理论预期值的 $1/3$ ^[5]，这就是著名的太阳中微子消失之谜。

20 世纪 80 年代，小柴昌俊在日本神冈建造了使用 3000 吨纯水的水切伦科夫探测装置，用来探测可能的核子衰变事例。1987 年，神冈实验探测到来自超新星 SN1987A 爆发产生的中微子信号，这是人类首次观测到超新星中微子，小柴也因此获得了 2002 年的诺贝尔物理学奖。从 1987 年到 1990 年初，神冈实验与 Davis 的实验测得的太阳中微子通量约为理论值的 $1/2$ 。此外，1988 年 Kajita Takaaki 与他的两位导师小柴昌俊和户冢洋二在神冈实验中发现大气中微子的 ν_μ 与 ν_e 比值比预期少^②，即“大气中微子反常”^[4]。

“太阳中微子消失之谜”和“大气中微子反常”预示着中微子新物理的发现。1991 年，超级神冈实验 (Super-Kamiokande) 开始建造，于 1996 年完成。探测器主体为一个高 41.4 m、直径 39.3 m 的不锈钢圆柱形容容器，盛有 5 万吨的纯水，11000 多个 20 英寸光电倍增管。1998 年，超级神冈实验通过对 ν_μ 和 ν_e 个数和能量等进行精确测量，发现 ν_μ 丢失几率与传播距离的关系。与此同时，位于加拿大 Sudbury 的 SNO (Solar Neutrino Observation) 实验记录到了太阳中微子总通量与理论值相符，且电子中微子约占 35%。SNO 实验使用重水作为探测介质，中微子在重水中可参与如下反应：



其中，带电流 (CC, charged current) 只对电子中微子敏感，中性流 (NC, neutral

① $\nu_e + ^{37}\text{Cl} \rightarrow e^- + ^{37}\text{Ar}$

② 考虑大气中 ν_e 和 ν_μ 的产生过程： $\pi^+ \rightarrow \mu^+ + \nu_\mu$ ， $\mu^+ \rightarrow e^+ + \bar{\nu}_\mu + \nu_e$ ，可知预期 ν_μ/ν_e ($\nu_\mu + \bar{\nu}_\mu$ 通量和 $\nu_e + \bar{\nu}_e$ 通量的比值) 应该约为 2^[6]。

current) 对三种中微子同等敏感, 弹性散射 (ES, elastic scatter) 中电子中微子的反应截面是其他两种中微子的 6 倍^[4]。SNO 和超级神冈实验, 以及随后的 KamLAND 和 KEK 的实验结果给出了中微子振荡的确凿证据, 表明中微子具有质量。

目前仍在运行的中微子振荡实验有:

- 反应堆中微子实验: 大亚湾, 韩国 RENO, 日本 KamLAND;
- 大气中微子实验: 日本 Super-K;
- 太阳中微子实验: 日本 Super-K, 意大利 BOREXINO;
- 加速器中微子实验: 日本 T2K, 美国 NOvA。

此外, 美国的 DUNE、日本的 Hyper-K 和中国的 JUNO 实验正在计划建造中。这些中微子振荡实验致力于更加精确地测量 θ_{13} 、CP 破坏和质量顺序等。其他的一些中微子实验, 如 EXO、Gerda、CUORE 等, 正通过无中微子双 β 实验来确定中微子是否为 Majorana 粒子。

1.2 粒子物理蒙特卡罗模拟

蒙特卡罗 (Monte Carlo) 方法是一种依赖于重复随机采样以获得数值结果的计算方法, 理论基础为概率统计, 即“微观上随机的事件可能导致宏观上确定的结果”。由于粒子物理实验中统计过程的复杂性, 概率论中一般的解析方法完全无能为力。在这种情况下, 蒙特卡罗方法是唯一有效的工具。

粒子物理和核物理中, 为了研究粒子在实验仪器中的运动和分布情况, 基于已有的理论模型和实验经验, 在给定规则限制的情况下 (例如确定的初始能量分布、发生作用的条件和方式等), 对待模拟的对象进行重复地随机抽样, 并按照规则进行模拟过程, 如此反复, 最后根据问题要求输出相应的结果 (如光电倍增管接到的光信号)。得到的结果一般为宏观可复现, 即在已有概率统计规则的要求下重复进行模拟, 结果显示的宏观分布应基本一致。为了使用蒙特卡罗模拟的结果, 必须要对模拟的准确性加以仔细检验, 往往通过与实际的测量结果进行比较、反复调节模拟参数等加以校正^[7]。

历史上使用的粒子物理模拟程序主要有:

- EGS(Electron-Gamma Shower) 电磁簇射的模拟
- GHEISHA 程序 强子簇射的模拟
- FLUKA 一个通用的蒙特卡罗粒子输运模拟工具
- MCNP(Monte Carlo N Particle Transport Code) 计算核物理的中子、光子和电

子输运问题的软件包，用 FORTRAN 语言编写

- GEANT(GEometry ANd Tracking) 最初用于模拟高能物理实验，经过全世界科研人员的开发合作，目前已成为一款强大的通用蒙特卡罗程序，使用 C++ 实现。

由于当今高能物理探测器实验的规模和结构日渐庞大和复杂，相应的建造成本日趋昂贵，往往对社会造成巨大的经济负担，且过去一般的解析计算已不能满足于目前大型高能物理装置的设计和优化，因此蒙特卡罗模拟已经成为了目前探测器设计的主要工具，贯穿整个探测器设计和运行的始终。

1.3 论文工作简介

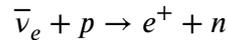
本论文在调研液体闪烁体基本光学性质的同时，探索利用 GPU 加速液闪探测器模拟的可行性，并给出初步的实验结果。对液闪光学性质的研究一方面可以加深我们对于闪烁光信号在液闪传播过程的理解，且对未来液闪探测器的设计具有一定的指导意义；另一方面则为 GPU 上进行的光学模拟模型的定义和实现提供了参考，与实际测量结果比较有助于改善蒙特卡罗模拟的准确度，使模拟结果的可靠性得到保障。而借助 GPU 光子传播加速实现的液闪探测器模拟，在给出模拟过程中所有光子传播的详细信息的基础上极大地减少了总模拟用时。此外，GPU 提供的强大并行计算能力使得通过强行遍历解决问题成为可能，例如对液闪中可能存在的使 PMT 信号分布基本相同的“对偶点”的寻找。由于规划的实际工作量超出了本科毕业设计的范围，论文仅对用到的实验原理和 GPU 加速模拟的思路进行了介绍，并给出初步的加速结果。

第 2 章 液体闪烁体的光学性质

液体闪烁体探测器在实验中微子物理中有着非常重要的地位，在过去的几十年内，有机液体闪烁体已经在一些中微子实验上得到了成功地应用，例如美国的 NOvA、韩国的 RENO 和意大利的 BOREXINO 等。且在最近几年，大型液闪中微子探测器为低能中微子物理作出了重要的贡献。为了更好地理解液闪探测器中光学信号的形成过程，需要对液闪的光学性质进行进一步的研究。

2.1 主要光学物理过程

进入液闪探测器的中微子，通过与液闪分子中质子的弱相互作用 (即反 β 衰变):



产生的正电子最后与 e^+ 与液闪中的电子 e^- 结合湮灭，释放出两个 0.511MeV 的 γ 光子。这些 γ 光子会进一步在液闪中通过光电效应、康普顿效应沉积能量，使得液闪分子电离和激发，最后退激产生一定波长的闪烁光子，闪烁光子的波长与液闪种类有关。如果液闪中掺有钆 (Gd)，由于钆原子有着很大的中子俘获反应截面，产生的中子经液闪分子的氢原子核慢化后极易与 Gd 原子发生 (n,γ) 反应，该反应生成的 γ 光子可以被探测器观测到，从而进一步确定这是一个中微子事例。

然而，从闪烁光子产生到进入光电倍增管 (PMT) 产生电信号，闪烁光子经过的路径往往不是一条理想的直线。由于闪烁光子与探测器内部发生的各种相互作用，如反射、吸收、折射、散射和重发射等，闪烁光子从产生可能要经过多次弯折，最终才有机会进入光电倍增管。在这个过程中，由于瑞利散射、吸收-重发射等作用的存在，传播光子的能量 (波长) 也不是一成不变的，进入光电倍增管的少数光子失去了原初闪烁光子的特征。

闪烁光子在探测器中发生的光学物理过程直接影响了进入 PMT 的光子能量和分布，并进一步影响了生成的电子学信号，而信号的质量则会对入射粒子事例的重建造成影响。因此，对探测器内液闪性质的充分认识有助于探测器的设计和信号形成过程的理解，且对探测器探测能力的提升具有巨大的意义。

2.2 衰减长度

液闪的衰减长度直接决定了在能够进行有效测量的情况下探测器所能达到的最大尺寸。在液闪中光束的衰减情况基本服从指数衰减规律：

$$I = I_0 e^{-\frac{x}{\lambda}} \quad (2-1)$$

其中， I_0 为初始光强， I 为经过距离 x 后的光强， λ 为衰减长度，即光强衰减为原来的 $1/e$ 时在液闪中经过的长度。一般来说，衰减长度 λ 与液闪性质和光束波长有关，且波长越长，衰减长度越长^[8]。故对于给定波长的光束，通过测量经过不同长度液闪的光强与初始光强的比值 (即透光率 $T = I/I_0$)，并按照 (2-1) 进行拟合，即可粗略地评估待测液闪的衰减长度。

上述方法所使用的实验装置一般如图2.1所示。使用中心波长约为 430nm 的发光二极管 (LED) 作为光源，通过脉冲发生器驱动 LED 发光。光线经过准直器、透镜和光阑后变为平行光。盛有液闪样品的圆柱形容器内的液柱长度可调，用于控制光束通过液闪的路径长度。容器下端装有 PMT，用来接收通过液闪的光子，并将其转换为电信号，经过电子学处理后得到通过液闪的光强。实验在暗室进行。

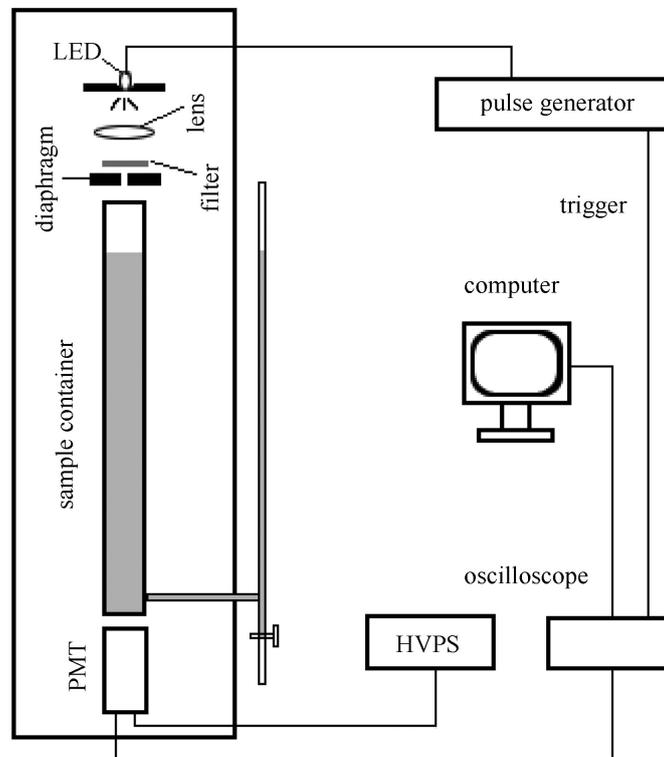


图 2.1 液体闪烁体衰减长度测量装置^[9]

根据大亚湾中微子实验组 2013 年的一篇论文^[9]中给出的测量方案, 该实验分别测量了 LAB(Linear Alkyl Benzene, 直链烷基苯, 用作液闪溶剂), 配制的液闪和掺 Gd 液闪样品的衰减长度, 衰减长度测量结果如表2.1所示。可以看到, 掺入 Gd 的 LS 的衰减长度相比 LS 出现了下降, 但是在该实验中仅下降了约 1m, 衰减长度在 15m 左右, 下降程度不大。

表 2.1 LAB、LS 和 Gd-LS 样品衰减长度测量结果^[9]

待测样品	衰减长度 (Λ)/m
LAB	19.44 ± 0.62
LS	15.99 ± 0.43
Gd-LS	15.10 ± 0.35

为了研究液闪中的不同组分 (LAB、PPO 和 bis-MSB) 的衰减长度^[10], 使用双光束紫外-可见分光光度计对表2.2中所列样品的衰减长度进行了测量, 结果如图2.2所示。可以看到, 对于 $\lambda > 340\text{nm}$ 的情况, LAB 的衰减长度大到足以可以忽略; 且从样品 B、C 和 D 对应的 2、3 和 4 曲线可以看到, 对于 $\lambda > 349\text{nm}$, bis-MSB 对液闪的衰减长度的影响较大; 对于 $\lambda < 349\text{nm}$, LAB/PPO 则对衰减长度造成主要影响。

表 2.2 液闪不同组分衰减长度待测样品

样品编号	溶剂	PPO	bis-MSB
A	LAB	0	0
B	LAB	3 g/L	0
C	LAB	0	15mg/L
D	LAB	3 g/L	15mg/L

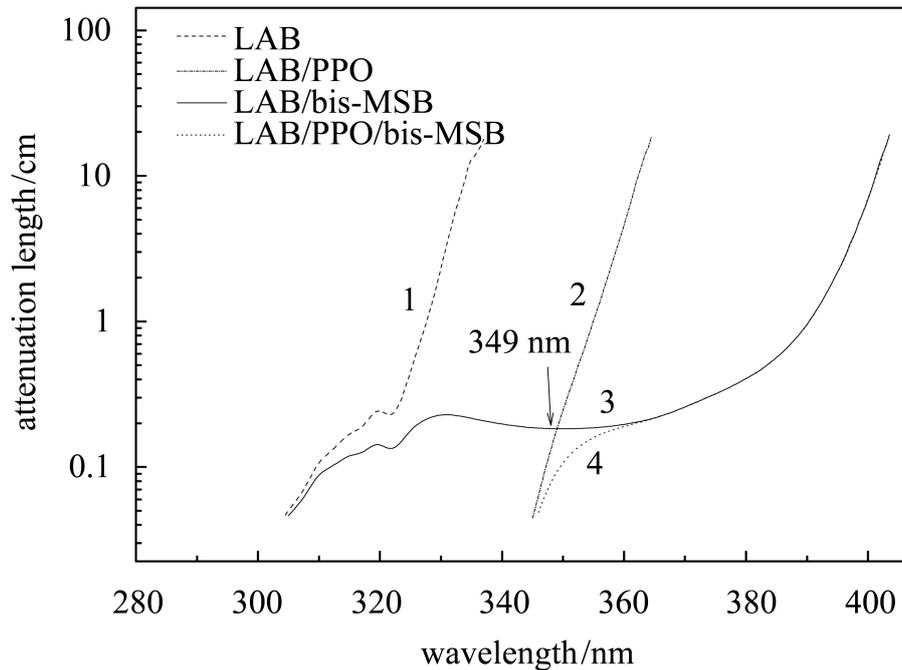


图 2.2 液闪不同组分衰减长度测量结果^[10]

在测量液闪衰减长度的其他实验中，依据了 Lambert-Beer 定律：

$$A(\lambda) = -\log(T) = \epsilon(\lambda)cx \quad (2-2)$$

这里， $A(\lambda)$ 为吸光度，描述光在穿过介质后被吸收的程度； $T = I/I_0$ 为透射比； $\epsilon(\lambda)$ 为摩尔吸光系数； c 为溶液浓度； x 为光沿入射方向通过介质的长度，即介质厚度； λ 为入射光波长。Lambert-Beer 定律描述了光吸收与介质浓度的线性关系，为保证其有效性，使用时至少需要满足如下条件：

- 介质溶液浓度低于 0.01mol/L(减少吸光质点之间的作用)；
- 入射光束为平行单色光且垂直入射；
- 介质溶液稳定均一，为非散射体系。

结合 (2-1) 可以得到用于测量衰减长度的公式：

$$A(\lambda) = \frac{x}{A(\lambda) \ln 10} \approx \frac{0.4343x}{A(\lambda)} \quad (2-3)$$

通过对透射比 T 和光径长度 x 进行测量，便可根据 (2-3) 得到对于波长 λ 待测液闪的衰减长度。韩国的 RENO 反应堆中微子实验对使用的 Gd-LS、LS(除 LAB 外，PPO 3g/L，bis-MSB 30mg/L) 样品的衰减长度进行了测量^[11]，结果分别为 $\geq 10\text{m}$ 和 $\geq 15\text{m}$ ；Johnny^[12] 等人使用了聚四氟乙烯衬里的 2m 不锈钢管盛装液闪样品以

提高测量精度，测量了液闪样品对于若干个波长的衰减长度，结果如表2.3所示。

表 2.3 不同波长液闪样品衰减长度 (m) 测量结果，括号给出 L-B 定律有效时的误差 (1σ)

样品	波长 (nm)			
	405	430	445	470
LAB	21.1(0.5)	28.6(0.6)	40.7(0.9)	47.9(0.6)
LS	0.24	24.6(0.5)	32.2(0.7)	41.8(0.5)
LS	7.9	-	-	-
Gd-LS	0.25	19.9(0.4)	25.7(1.4)	34.5(0.4)
Gd-LS	9.0	-	-	-

一般而言，按衰减长度从大到小排列依次为:LAB > LS > Gd-LS。由于液闪生产工艺和衰减长度测量方法的不同，实际测量结果存在差异。对于 430nm 的波长，LAB 溶剂的衰减长度最大测值可达约 30m；加入 PPO、bis-MSB 后制得的 LS，衰减长度测值范围 20m~25m 不等；掺 Gd 前后 LS 衰减长度下降约 5m，衰减长度范围 10m~20m 不等。此外，溶液中杂质对光子的吸收会对液闪的衰减长度下降造成较大的影响。

2.3 瑞利散射

光子数目在液闪传播过程中的衰减主要与液闪分子的吸收和散射有关。吸收过程(无荧光光子重发射，能量转换为其他形式)会使探测器接受到的总光子数目减少，而散射过程仅改变光子的传播方向，对于 4π 立体角探测的探测器，散射光子(理论上)会全部被探测器的 PMT 收集到，因而不会对探测器的能量分辨率直接造成影响^[13]。一般地，光子在液闪中的衰减主要有以下三种过程^[14]：

- 瑞利散射 (Rayleigh scattering): 发生在液闪分子的束缚电子上
- 米氏散射 (Mie scattering): 主要来自于悬浮在液体中的污垢或灰尘颗粒
- 吸收 (Absorption): 液闪分子吸收闪烁光子变为激发态

除非光子被全部吸收，否则只是表现为传播方向的改变。所以吸收-重发射在某些情况下也可被记为一种特殊形式的散射。由于散射过程一般是角相关的，因此在整个立体角上散射光的强度是各向异性的。例如对于瑞利散射，其微分散射截面

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{\text{ray}} \propto \left(\frac{1 + \cos^2 \theta}{2}\right) \quad (2-4)$$

但是对于重发射过程，散射光（退激光）则可以被认为是各向同性的。

2.3.1 散射长度

一般地，对于光子一维的传播过程，单位长度的衰减光子数量

$$\frac{dN}{dx} = -QN(x) \Rightarrow N(x) = N_0 e^{-Qx} = N_0 e^{-x/L} \quad (2-5)$$

其中 $Q = n\sigma_{\text{tot}}$ ， n 为沿着光线传播方向的散射中心的数密度， σ_{tot} 为总的相互作用截面。而对衰减产生不同贡献的传播长度 $l_i = 1/Q_i$ 与总衰减长度 L 有关系

$$Q = \sum_i Q_i = \sum_i (n\sigma)_i \Rightarrow \frac{1}{L} = \frac{1}{l_A} + \frac{1}{l_S} \quad (2-6)$$

其中散射长度 l_S 里包含了瑞利散射 (l_{ray})、米氏散射 (l_{mie}) 和吸收-重发射 (l_{are}) 的贡献，

$$\frac{1}{l_S} = \frac{1}{l_{\text{ray}}} + \frac{1}{l_{\text{mie}}} + \frac{1}{l_{\text{are}}}$$

实验上在测量散射长度时，为方便起见往往将 l_S 分为各向同性分量 l_{is} 和各向异性分量 l_{an} ：

$$\frac{1}{l_S} = \frac{1}{l_{\text{is}}} + \frac{1}{l_{\text{an}}}$$

2.3.2 瑞利散射长度测量原理

周详等人^[15]在测量瑞利散射长度时依据了如下的原理。一般地，使用 (2-7) 所示的体散射函数来描述瑞利散射：

$$\beta(\theta) = \frac{I(\theta) r^2}{I_0 V} \quad (2-7)$$

其中， $I(\theta)$ 是方向 θ 的散射光强， I_0 是入射光强， r 是到散射中心的距离， V 是散射体积。瑞利散射长度 l_{Ray} 是对 $\beta(\theta)$ 立体角积分的倒数：

$$l_{\text{Ray}} = \left[\iiint \beta(\theta) d\Omega \right]^{-1} \quad (2-8)$$

散射光强 $I(\theta)$ 在散射平面内被划分为平行部分 $I_{\parallel}(\theta)$ 和垂直部分 $I_{\perp}(\theta)$ ：

$$I(\theta) = I_{\parallel}(\theta) + I_{\perp}(\theta) \quad (2-9)$$

根据 (2-4) 瑞利散射对散射光强各向异性的贡献，并考虑散射光的各向同性部分，散射光强的角分布可以写做

$$I_{\parallel}(\theta) = \frac{\cos^2 \theta}{2} A + \frac{1}{2} B \quad (2-10)$$

$$I_{\perp}(\theta) = \frac{1}{2} A + \frac{1}{2} B \quad (2-11)$$

其中 A 和 B 是待测量，类似的讨论可见后面 Wurm 的工作。

散射光在 90° 的极化用去偏光率 δ (depolarization ratio) 来描述

$$\delta = \frac{I_{\parallel}(90^\circ)}{I_{\perp}(90^\circ)} = \frac{B}{A+B} \quad (2-12)$$

定义瑞利比率 R (Rayleigh ratio) 为体散射函数 $\beta(\theta)$ 在 90° 处的值

$$R \equiv \beta(90^\circ) = \frac{I(90^\circ) r^2}{I_0 V} \quad (2-13)$$

则体散射函数 $\beta(\theta)$ 和瑞利散射长度可表示为

$$\beta(\theta) = R \left(1 + \frac{1-\delta}{1+\delta} \cos^2 \theta \right) \quad (2-14)$$

$$l_{\text{Ray}} = \left[\frac{8\pi}{3} R \frac{2+\delta}{1+\delta} \right]^{-1} \quad (2-15)$$

(2-15) 显示瑞利散射长度不只由瑞利散射长度 l_{Ray} 或瑞利比率 R 描述，且与去偏光率 δ 有关。对于各向同性液体， $\delta = 0$ ，仅与 R 有关。

根据 Einstein-Smoluchowski 理论，各向同性液体的瑞利比率 R_{iso} 为：

$$R_{\text{iso}} = \frac{\pi^2}{2\lambda^4} \left[\rho \left(\frac{\partial \epsilon}{\partial \rho} \right)_T \right]^2 kT \kappa_T \quad (2-16)$$

其中 λ 为散射光的波长， ρ 为液体密度， ϵ 为液体的平均介电常数， k 是玻尔兹曼常数， T 是温度， κ_T 是等温压缩系数。根据 Cabannes 的结果^[16]， R 和 R_{iso} 的比率为

$$\frac{R}{R_{\text{iso}}} = \frac{6+6\delta}{6-7\delta} \quad (2-17)$$

R_{iso} 可以被看作是总瑞利比率 R 的各向同性成分。

对于 $\rho \left(\frac{\partial \epsilon}{\partial \rho} \right)_T$ ，一般用已有的实验规律来描述它。使用下面的 Eykman 公式^[17]

来描述有机液体的 $\rho \left(\frac{\partial \epsilon}{\partial \rho} \right)_T$:

$$\rho \left(\frac{\partial \epsilon}{\partial \rho} \right)_T = \frac{(n^2 - 1)(2n^2 + 0.8n)}{n^2 + 0.8n + 1} \quad (2-18)$$

其中 n 是液体的折射率。

由 (2-15)(2-16)(2-17)(2-18), 可以得到用来确定瑞利散射长度的 Einstein-Smoluchowski-Cabannes 公式:

$$l_{\text{ray}} = \left\{ \frac{8\pi^3}{3\lambda^4} \left[\frac{(n^2 - 1)(2n^2 + 0.8n)}{n^2 + 0.8n + 1} \right]^2 kT\kappa_T \frac{6 + 3\delta}{6 - 7\delta} \right\}^{-1} \quad (2-19)$$

对 (2-19) 中的各项 (n 、 k_T 和 δ) 进行确定, 便可测得待测样品的瑞利散射长度。

Wurm 等人^[14] 的原理与周详等人的类似。基于图2.3所示的实验装置, 定义 $q(\theta, p)$ 为两个 PMT 接收到的光子数比值:

$$q(\theta, p) = \frac{N_S}{N_B} \quad (2-20)$$

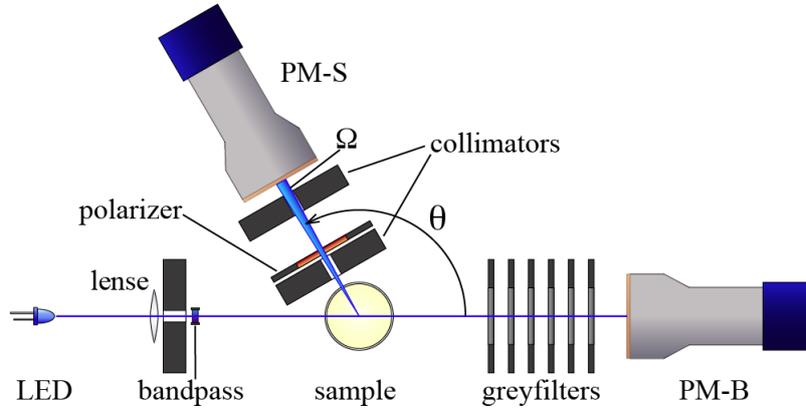


图 2.3 瑞利散射长度测量实验装置^[14]

其中 θ 为散射角, p 表示偏振方向。考虑到暗噪声、偏振片、滤光片、两个光电倍增管本身的效率以及光束在盛有样品的玻璃表面反射的影响, 对 (2-20) 进行修正:

$$q_{\text{cor}} = T\epsilon(1 - \rho) \left(\frac{N_S}{N_B} - \frac{N_{S,bg}}{N_{B,bg}} \right) = T\epsilon(1 - \rho) (q - q_{bg})$$

由于 PM-S 测得的光子数比散射光子总数要小的多 (PM-S 前孔径很小, 不能收集到来自这个方向的所有散射光子, 且散射光在盛样品的容器上存在反射和

散射), 考虑通过蒙卡模拟方法来修正这一影响。对 Geant4 模拟的各向同性散射, $q_{MC}(\theta) = N_S/N_0$, 其中包含了立体角、PM-S 位置、玻璃容器和样品表面的影响, 输入的散射长度 $l_{MC} = 1\text{m}$, 散射长度的实验值与 MC 长度的比值应该和 q_{cor} 与 q_{MC} 的比值相符^[14]。定义 $Q(\theta) = q_{cor}(\theta)/(q_{MC}(\theta)l_{MC})$, 经过测量和模拟, 得到了对于四个散射角 θ (75° 、 90° 、 105° 和 120°) 和两个方向 p (\parallel 和 \perp) 的 $Q(\theta, p)$ (共 8 个值)^[14]。

发生在样品中的散射被估计为两个部分: 偏振的各向异性部分 $\mathcal{A}_p(\theta)$ ($f_{an}(\theta) = (1 + \cos^2 \theta)/2$) 和非偏振的各向同性部分 \mathcal{I} ($f_{is}(\theta) = 1$)。由于对 θ 和 p 有不同的依赖, 通过测得的 $Q(\theta, p)$ 对 $\mathcal{A}_p(\theta) + \mathcal{I}$ 进行拟合 (Q_{an} 和 Q_{is} 是拟合参数, 分别代表各向异性和各向同性的贡献):

$$\begin{aligned} Q_{\perp}(\theta) &\stackrel{!}{=} \mathcal{A}_{\perp} + \mathcal{I} = \frac{1}{2}Q_{an} + \frac{1}{2}Q_{is} \\ Q_{\parallel}(\theta) &\stackrel{!}{=} \mathcal{A}_{\parallel} + \mathcal{I} = \frac{\cos^2 \theta}{2}Q_{an} + \frac{1}{2}Q_{is} \end{aligned}$$

对分散严重没法很好拟合的数据点, 采用取平均值的方法估计:

$$Q_{an} = \frac{2\langle Q_{\perp} \rangle - 2\langle Q_{\parallel} \rangle}{1 - \langle \cos^2 \theta \rangle}, \quad Q_{is} = \frac{2\langle Q_{\parallel} \rangle - 2\langle Q_{\perp} \rangle \langle \cos^2 \theta \rangle}{1 - \langle \cos^2 \theta \rangle}$$

最后, 根据估计得到的 Q_{an} 和 Q_{is} , 分别求出各向同性和各向异性散射长度 l_{is} 和 l_{an} , 以及总散射长度 L_S :

$$\begin{aligned} l_{is} &= \frac{1}{Q_{is}} \\ l_{an} &= \frac{\int f_{is}(\theta) d\theta}{\int f_{an}(\theta) d\theta} \frac{1}{Q_{an}} = \frac{4}{3} \frac{1}{Q_{an}} \\ L_S &= \frac{1}{l_{an}} + \frac{1}{l_{is}} \end{aligned} \tag{2-21}$$

需要注意的是, 对待测量的散射长度, 周详和 Wurm 在论文里给出了不同的理解。Wurm 等人认为散射长度的各向异性部分来自瑞利散射的贡献 (遵循 $1 + \cos^2 \theta$ 的分布), 各向同性部分来自于吸收-重发射的贡献; 而周详等人认为 LAB 对波长大于 340nm 的光的吸收很微弱, 相比与瑞利散射, 吸收-重发射带来的影响可以被忽略, 因而瑞利散射与传统的 $(1 + \cos^2 \theta)$ 分布有所偏离。考虑到将来模拟实验中散射部分的实现, 本文倾向于前一种解释。

2.3.3 测量结果

通过对 (2-19) 中的各项 (n 、 k_T 和 δ) 分别进行测量, 周详等人得到了 LAB 样品在 430nm 处的瑞利散射长度, 结果如表 2.4^[15] 所示。

表 2.4 LAB 样品瑞利散射长度测量结果^[15]

Sample	$\lambda(\text{nm})$	$T(^{\circ}\text{C})$	n	$k_T(10^{-10}\text{Pa}^{-1})$	δ	$l_{\text{Ray}}(\text{m})$
LAB	430	23	1.498 ± 0.004	7.743 ± 0.035	0.31 ± 0.04	27.0 ± 2.3

另一篇论文^[18] 采用了不同的方法评估待测样品的偏光率 δ , 得到室温下 430nm 处 LAB 的瑞利散射长度 L_S 约为 $28.2 \pm 1.0\text{m}$ 。结合已有的衰减长度数据 (衰减长度 $L = 19.44 \pm 0.62\text{m}$, 430nm), 可由 $1/L = 1/L_S + 1/L_A$ 得到 LAB 样品的吸收长度 L_A 约为 $62.5 \pm 7.9\text{m}$ 。

2.4 吸收-重发射

带电粒子在液闪中的移动会激发溶剂分子, 而处于激发态的分子可以通过无辐射能量转移的方式将能量转移到其他分子中, 或通过退激发光返回基态。在不同的波长范围内, 这两种方式在液闪各组分分子所占比重不同。由于芳香族的溶剂分子对它们自身的退激荧光不透明, 因而在大型液闪探测器中往往通过加入波长位移剂 (wavelength shifters) 对液闪进行调节^[19]。目前在大型液闪探测器的设计中广泛将 PPO 和 bis-MSB 用作主波长位移剂和第二波长位移剂。为了理解液闪的吸收-重发射过程对液闪中光子传播的影响, 需要对这些物质的光谱结构和荧光量子产额 (fluorescence quantum yields) 进行研究。

2.4.1 光谱

为了使 PMT 能够尽可能多地接收到闪烁光信号, 溶剂分子发射光谱的主要区域应与主波长位移剂吸收光谱的峰值区域相匹配, 且应使主波长位移剂的发射光谱与第二波长位移剂的吸收光谱尽可能重合。图 2.4^[10] 显示了 LAB、PPO、bis-MSB 及它们组合的发射光谱。可以看到, 3 g/L PPO 的发射光谱与稀释 PPO (dilute PPO) 的相比基本没有什么变化; bis-MSB 的退激荧光并未在 LAB/PPO/bis-MSB 组合物的发射光谱中观察到, 说明组合物中 PPO 到 bis-MSB 的非辐射能量转移过程可以被忽略^[10], 而主要是辐射能量转移过程起作用。

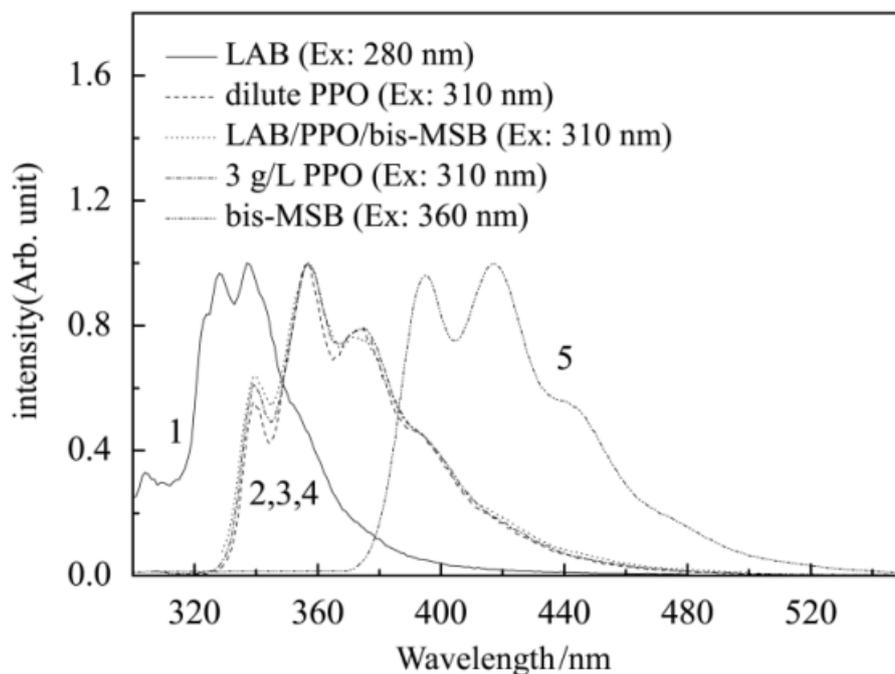


图 2.4 LAB、PPO、bis-MSB 及它们组合的发射光谱^[10]

Buck^[20] 等人测量了稀释于 0.5mg/L 环己烷的 PPO 和 bis-MSB 的发射光谱，并与溶有 3g/L PPO 和 20mg/L bis-MSB 的纯邻苯二甲苯 (ortho-phenylxylyethane, o-PXE) 的发射光谱进行比较。图2.4和图2.5呈现出相似的结构。相似地，PXE 到 PPO 的能量转移方式主要为非辐射方式，而从 PPO 到 bis-MSB 的能量转移主要为辐射方式 (吸收-重发射)。从 PPO 到 bis-MSB 能量转移存在的少量非辐射过程，主要来自于 PPO 的发射谱和 bis-MSB 的吸收谱没有完美地匹配而存在少量的偏差^[20]。

实验发现，随着激发波长的增加，液闪的重发射几率呈现出上升的趋势，并在 bis-MSB 的吸收、重发射产生主要影响前收敛到 PPO 的荧光量子产额^[21]。考虑到 < 350nm 的重发射可能性对切伦科夫光产生的影响，以及光子波长的范围对 PPO 激发的影响 (280 – 350nm 光子直接吸收，< 280nm 为来自溶剂分子 LAB 或 PXE 的非辐射能量转移)，第一波长位移剂 (PPO) 和第二波长位移剂 (bis-MSB) 的荧光量子产额均会对液闪中切伦科夫光模型的建立造成影响^[20]；而对于 > 350nm 的情形，由于此时溶剂分子的自吸收可以被忽略，重发射效应主要由 bis-MSB 的荧光量子产额来评估。

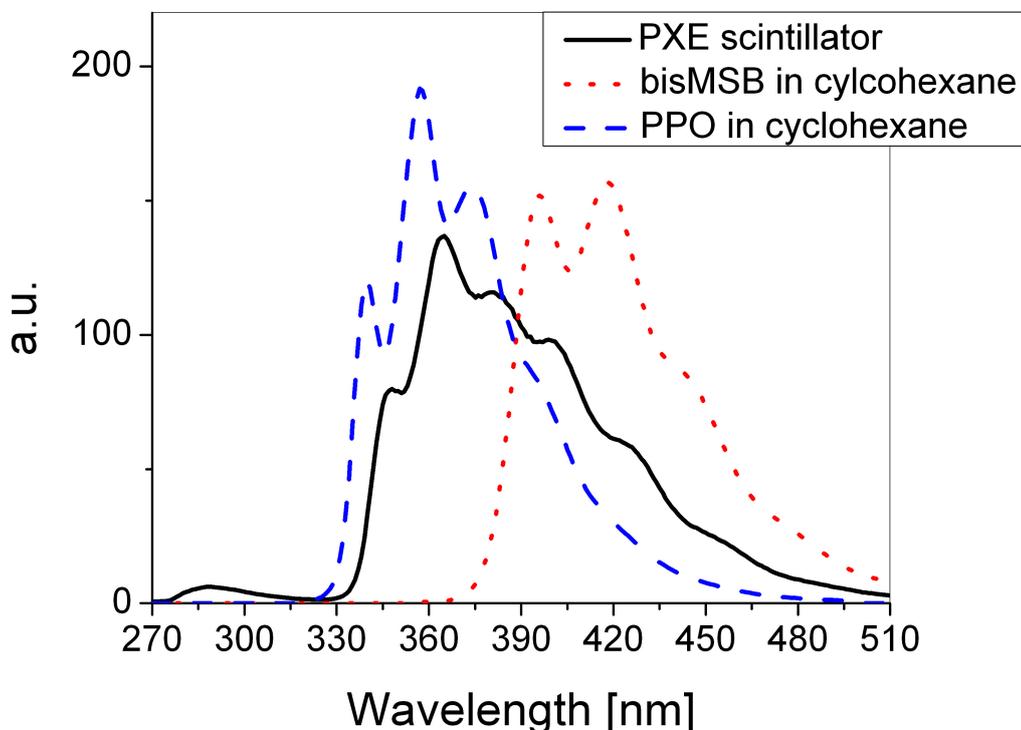


图 2.5 稀释于环己烷的 PPO 和 bis-MSB 的发射谱，以及基于 o-PXE 的液闪 (3g/l PPO, 20mg/l bis-MSB) 的发射谱 (忽略自吸收效应)^[20]

2.4.2 荧光量子产额

荧光量子产额被定义为发射光子数目 N_{emitted} 与吸收光子数目 N_{abs} 的比值，可以用它来描述经过一次吸收后发生重发射的可能性：

$$\varphi(\lambda_{\text{ex}}) = \frac{N_{\text{emitted}}}{N_{\text{abs}}(\lambda_{\text{ex}})} \quad (2-22)$$

其中 λ_{ex} 为激发光子的波长。一般地，发射光子数目可以用下式表示：

$$N_{\text{emitted}} = \alpha n^2 I_0 \int s(\lambda) d\lambda \quad (2-23)$$

其中 $s(\lambda)$ 为波长为 λ 的每单位光强的激发光对应的荧光强度，即发射谱； I_0 为总激发光强； n 为待测样品的折射率修正； α 为荧光强度与发射光子数目的比例修正系数，包含了几何因素和 PMT 计数率的影响。一般在大于激发波长的范围内，几何条件基本不变的情况下，光路上样品对光子的吸收可以被看作是均匀的；而当激发光子波长较短时，样品吸收可能会随测量条件和几何情况出现较大变化。在实验中进行荧光量子产额的相关测量时，往往采用与标准样品对比的方式以减

少测量的不确定度。此时，由 (2-22) 和 (2-23) 可以得到实验上用于测量荧光量子效率的公式

$$\Phi_x = \Phi_r \frac{B_r \int s_x(\lambda) d\lambda n_x^2}{B_x \int s_r(\lambda) d\lambda n_r^2} \quad (2-24)$$

其中下标 r 和 x 分别表示参考的标准样品和待测荧光量子产额的未知样品。 B 表示被样品吸收的激发光子占比，与透射比 $T = I/I_0$ 有关系

$$B = 1 - T$$

相对法测量样品荧光量子效率的准确性显然受制于参考标准溶液的质量。实验中一般使用一定浓度硫酸溶解的哈尔满碱 (HARMANE, 荧光量子产额 0.83^[22]) 或硫酸奎宁 (quinine sulfate, 荧光量子产额 0.55^[23]) 用作标准样品。一些实验^[10] 在对待测样品和标准样品的折射率进行测量时，按照光谱分布对不同波长的折射率取平均 (2-25):

$$\bar{n} = \frac{\int s(\lambda) n(\lambda) d\lambda}{\int s(\lambda) d\lambda} \quad (2-25)$$

由于 LAB 溶剂的荧光发射效率较低，其能量主要通过无辐射的方式转移到 PPO；波长位移剂 bis-MSB 的吸收光谱需能够覆盖 PPO 的发射光谱，因此液闪中的吸收-重发射过程主要发生在 bis-MSB 上^[24]。

目前已有一些实验对 PPO 和 bis-MSB 的荧光量子产额进行了测量。Buck 等人^[20] 对 PPO 和 bis-MSB 在一定波长范围内 (分别为 300–330nm 和 300–380nm) 的荧光量子产额进行了测量，平均值分别为 0.842 和 0.863；Xue-Feng 等^[24] 对 JUNO 实验用到的 bis-MSB 在不同波长位置的荧光量子产额进行了测量，结合肖华林^[10] 的测量 (PPO: 0.77, bis-MSB: 0.96) 给出了图2.6所示的结果，且与 Buck 的测量结果一致。对于 bis-MSB 吸收最强的位置 (约 350nm 处)，荧光量子产额为 0.926 ± 0.053 。此外，由于在大于 400nm 的波长范围内 LAB 分子的吸收比重上升但重发射很少^[24]，导致液闪整体的重发射可能性在 400nm 后出现了下降。

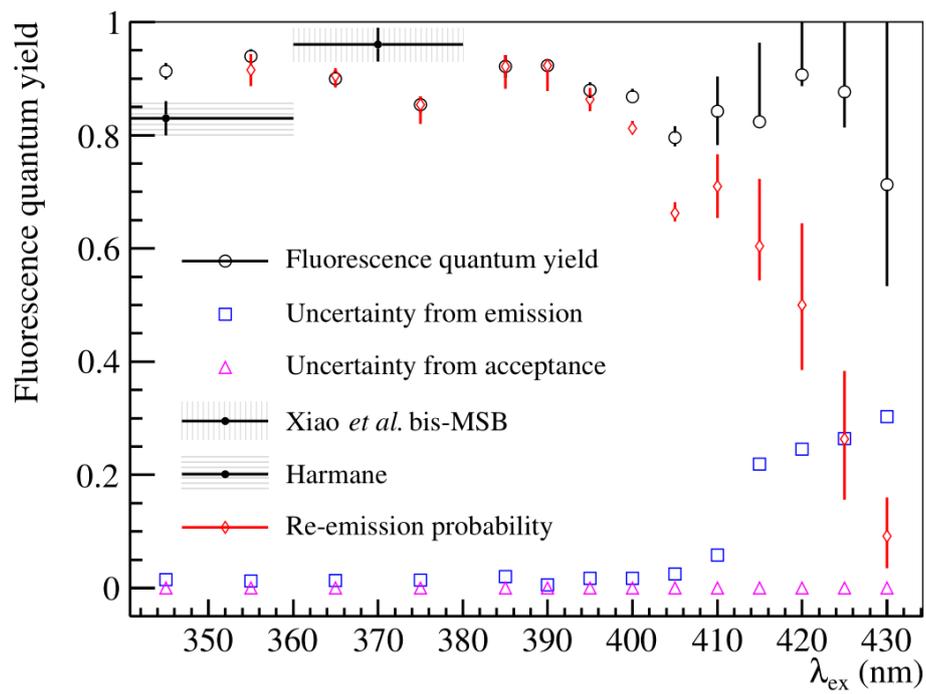


图 2.6 bis-MSB 的荧光量子产额测量结果^[24]

第 3 章 基于 GPU 的液闪探测器模拟

日益增大的探测器规模和复杂的探测器结构不仅使对探测器信号形成过程的解析计算变得几乎不可能，也为目前的蒙特卡罗模拟带来高昂的时间和硬件成本。而寻求新的模拟技术和手段是摆脱这一困境的有效方法。考虑到光子传播模拟与 GPU 计算共有的并行特性，我们使用 GPU 来加速液闪探测器模拟中耗时最多的光子传播部分，从而有效地减少总模拟用时，提高模拟效率。

3.1 Geant4 模拟

Geant4(GEometry ANd Tracking) 是由 CERN(法语 Conseil Européenn pour la Recherche Nucléaire, 欧洲核子研究中心) 开发的用于粒子物理模拟的蒙特卡罗工具包, 其前身为 Geant3, 在高能物理、核物理和加速器物理得到了广泛应用。随着 Geant4 内容和功能在来自全世界不同地区的科学家的支持下不断扩充和发展, 该工具包在医学物理和空间科学等其他方面也得到了越来越多的应用。

Geant4 为探测器模拟的所有领域提供了几何 (geometry)、追踪 (tracking)、探测器响应 (detector response)、运行 (run)、事件和追踪管理 (event and track management)、可视化和用户界面 (visualization and user interface) 等一整套工具。该工具包提供了一系列物理过程, 用来模拟粒子和物质的各种相互作用, 其物理实现的透明性得益于开发所使用的软件工程技术 and 面向对象技术。此外, 由于 Geant4 的源代码是免费公开的, 每个人可以根据自己的问题需求进行定制。最近几年, 由于处理器、多核架构和分布式计算的迅速发展, 为了更好地利用目前存在的优秀算力, Geant4 在最近的几次版本迭代中加入了多线程的技术^[25]。

3.1.1 历史

Geant4 的前身为 Geant3, 后者使用 FORTRAN 语言实现。1993 年^[26], CERN 和 KEK 分别独立地研究了如何应用现代计算技术来对 Geant3 模拟程序进行改进。这些工作于 1994 年秋季被整合到一起, 同时一份关于构建面向对象新程序的提案被提交至 CERN 的探测器研究和开发委员会, 即 RD44。这项计划逐渐发展成为一个大型的国际合作项目, 来自欧洲、日本、加拿大和美国的多个研究所和大学的物理学家和软件工程师参与其中, 目的是基于 C++ 的面向对象特性编

写一个探测器模拟程序，该程序具有满足下一代亚原子物理实验模拟所必需的功能和灵活性。该项目的第一版研发于 1998 年 12 月完成，项目合作成果随后被更名为 Geant4。Geant4 的开发和维护结合了软件工程方法，由一个监督委员会和一个指导委员会以及若干个工作组完成项目管理、维护和用户支持，以及工具包的持续开发和完善等工作。随着来自核物理、加速器、空间科学和医学物理等领域的研究人员的加入，该程序的使用范围从最开始的高能物理领域不断扩大，并迅速发展为具有大量功能特性的模拟工具集。

3.1.2 功能描述

根据实现功能的不同，Geant4 将其实现分为若干个类别，每个类别各司其职，相互协作，共同为蒙特卡罗基本物理过程模拟服务。

与粒子物理过程模拟相关的主要类别如下：

- glbal 包含了单位、常数和随机数处理等的管理部分
- materials 定义了一些常见材料的物理特性
- particles 定义了高能物理中常见粒子的物理特性，结合 materials 类别参与粒子与物质相互作用的模拟实现
- geometry 描述模拟中涉及的几何，例如探测器几何结构等
- track 包含粒子 tracks 和 steps 的类的实现
- processes 包含了物理相互作用模型的实现，例如基本粒子之间的电磁相互作用和强相互作用等的实现
- tracking 管理 processes 对 track 演变的贡献，并提供灵敏体积的击中 (hits) 信息
- event 根据事例的 tracks 对事例进行管理
- run 管理共享束流和探测器实现的事例集合

此外，Geant4 通过 readout 类别内功能将来自 run 的信息读出，并通过 visualization 和 interface 类别实现模拟的可视化和良好的用户交互。

3.2 GPU 光子传播计算

3.2.1 背景

近二十年来，高速发展的光线追踪技术已经在电影、游戏方面得到了广泛应用，其基于的 GPU 计算在数据科学、边缘计算、人工智能、大数据分析和光线渲染等方面占有日益重要的地位。光线追踪的相关技术已经涉及到大型液体闪烁体

探测器模拟中光子传播的几乎所有方面，包括折射、散射、吸收和重发射等。而光子在液闪中的传播是这类大型液体闪烁体探测器模拟中耗时最多的部分，占到了约 80%。由于液闪探测器光子传播模拟和 GPU 光线追踪在计算方法上存在一些共性，因此考虑应用 GPU 上的光线追踪技术加速液闪探测器的模拟进程。

3.2.2 NVIDIA® OptiX™

OptiX 是基于 CUDA 运算架构的一个通用光线追踪引擎，它为光线追踪算法提供了一个简单、递归和灵活的光线追踪管道，管道由用户提供的 CUDA 程序创建。通过 OptiX 提供的 API，用户可以方便地自行定义光线在场景中传播过程的各种运算，如光线生成、材质着色、对象求交和场景遍历等，进而生成自定义的光线追踪内核^[27]。

OptiX 的光线追踪流水线如图 3.1 所示。通过调用内置的 `rtContextLaunch` 来运行用户自定义的 **Ray Generation** 程序，从而开始整个光线追踪计算。在生成光线与场景遍历途中，由用户定义的 **Intersection** 程序进行几何查询，计算光线与几何体的求交情况。当几何遍历找到一个最近的 **intersection** 时，**Closest Hit** 程序将被调用，存储之前光线的信息并生成新的光线。而对于任何光线和几何等相交事件，**Any Hit** 将被调用，对求交和光线发射计算进行更复杂的控制，例如考虑材料的影响等。当然，在场景遍历中也存在一些光线没有与几何体相交，此时 **Miss Program** 来处理这种情况。通过用户定义的光线生成、求交计算和击中处理等程序与 OptiX 内置光线追踪引擎 `rt Trace` 的交互，进而实现自定义的 GPU 光线追踪计算。

在本地光子传播模拟计算的简单实现中，通过发射光线，对场景中的物体进行遍历求交，找到最近的物体，借由所编写光线与物体的物理过程（例如瑞利散射等）进行计算处理。如果光线未被吸收，则可按照一定条件递归地继续发射光线。更加细致复杂的实现可参考 Simon Blyth 的 **Opticks**^[28] 项目。

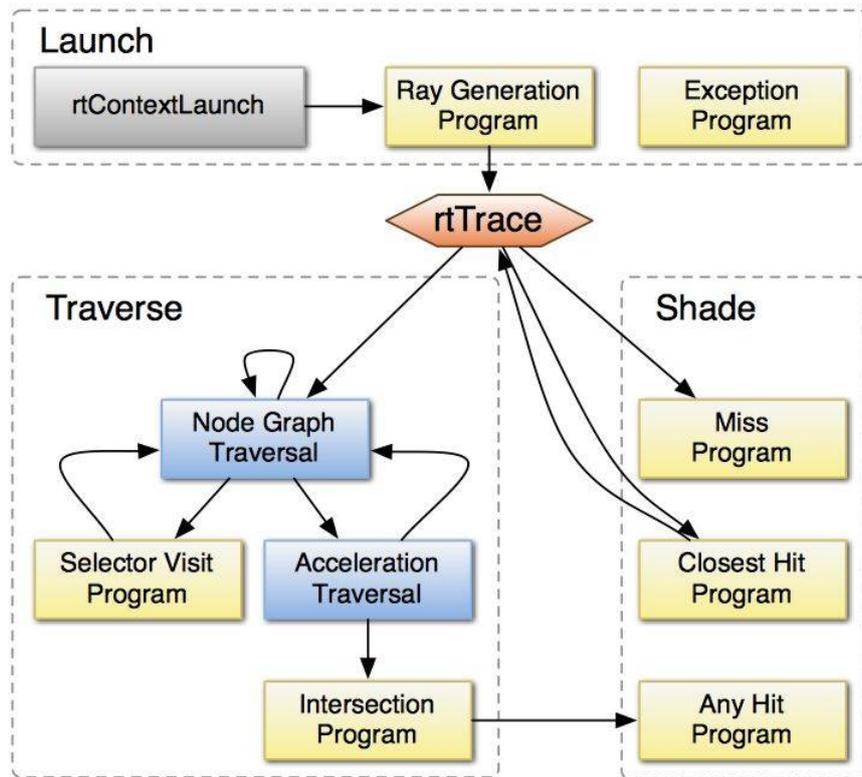


图 3.1 OptiX 光线追踪流水线示意图^[27]

3.3 混合 workflow

混合模拟 workflow 的思路来自于 Simon 对利用 OptiX 的光线追踪引擎来实现 Geant4 蒙卡模拟中光子传播部分加速的考虑。该思路最终在 Opticks 项目中得到了实现。通过定义 Geant4、OptiX 和其他程序之间关键信息交互的一系列接口，将基础模拟循环、GPU 光子传播模拟、额外的可视化和用户交互等整合到一起，从而构筑成一整套得到加速的用于粒子物理蒙卡模拟的工具集。

传统的 Geant4 模拟对于入射粒子产生的闪烁光子和切仑科夫光子，通过其内部定义类别 (`global`、`materials`、`particles` 和 `processes` 等) 功能实现基于 CPU 的光子传播计算，得到 PMT 的击中信息并进行后续的电子学模拟。而在 Opticks 混合 workflow 的实现中 (图3.2)，首先将 Geant4 中预先定义好的 `geometry` (例如探测器几何和材料数据) 通过一定的方法导入到 GPU 中，即使用 CUDA 语言来描述这些信息，由 `Intersection Program` 对 `geometry` 几何数据进行分析处理，用于之后的光子传播计算。而对于 Geant4 产生的初始光子信息 (能量和动量)，利用 OptiX 的 `Ray Generation` 程序来描述并生成初始光线。随后借助 OptiX 的光线追踪引擎进

行光子传播的模拟计算，得到一系列 Photon Buffer 信息。利用 CUDA Thrust 并行 API，将这些光子缓存信息传回给 Geant4，最终得到 PMT 击中信息。以上在 Geant4 和 OptiX 之间的信息交换通过一个自定义接口 G4Opticks 来实现。

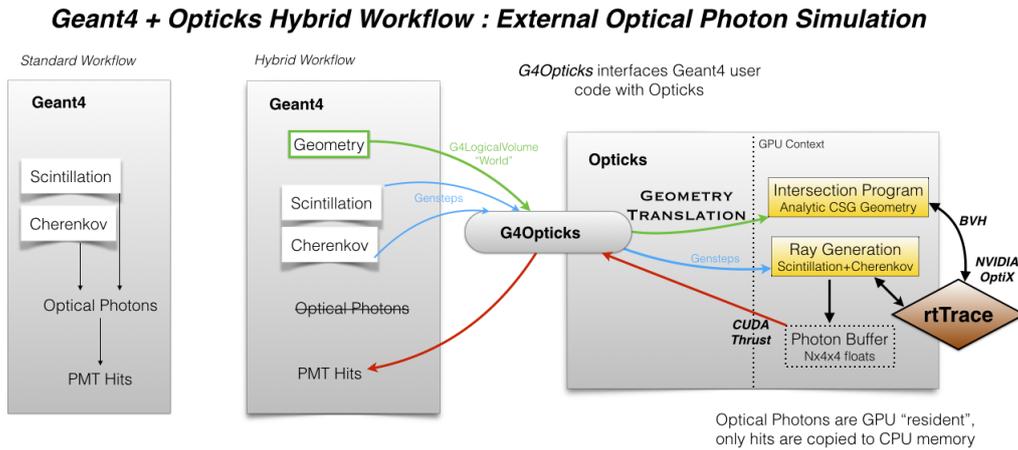


图 3.2 Geant4 光子传播模拟标准 workflow (左) 和 Geant4+Opticks 混合 workflow (右)^[29]

为了保证光子传播模拟计算的可靠性，需要在 OptiX 上提供与 Geant4 相当准确度的计算，这些计算的有效性与 Opticks 在 Geant4 和 OptiX 之间实现的几何转换和物理过程直接相关。

3.3.1 Geometry 分析

为了在 OptiX 上实现与 Geant4 等价的光子传播模拟，需要将 Geant4 的几何、材料和表面特性转换为可供 GPU 使用的格式，即采用 CUDA 语言描述。之前 Opticks 几何转换的实现使用 Geant4 内置的 G4DAE exporter(基于标准 GDML exporter 实现) 将 Geant4 的 CSG(Constructive Solid Geometry) 几何转化为面片数据，得到 dae 文件，该文件可扩展整合波长相关的材料和表面特性，并在之后由修改过的 Assimp asset importer 读取这些信息^[30]。而在最新的实现中放弃了原有的方法，转为直接对 Geant4 的 CSG 几何树进行处理。利用该方法，Opticks 允许内存中的 Geant4 几何直接转换并传至 GPU^[30]，提高了几何转换的效率。相应地，在 Opticks 中已经实现了光线与 10 种基本几何体(球体和圆柱体等)的 intersection 程序^[31]。在进行光子传播计算时，对 CSG 二叉树进行后序遍历以进行迭代运算，寻找每个层次 intersect 较近的两个候选相交节点进行处理。

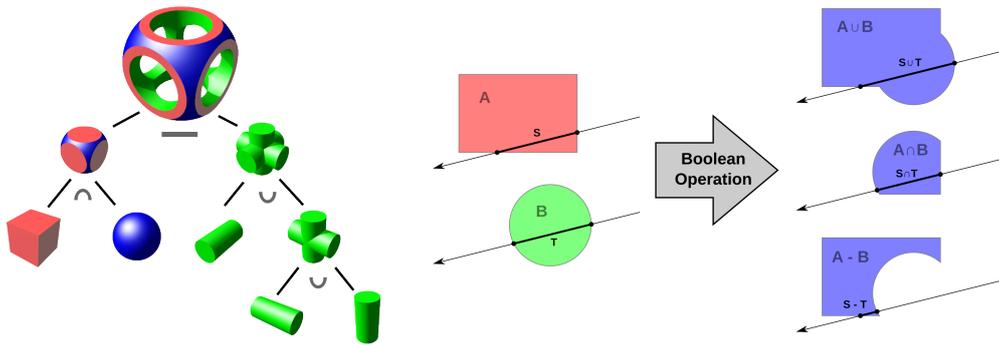


图 3.3 CSG 几何树示例 (左), 其中叶子节点为基本几何体, 中间节点表示对左右子节点进行一次布尔操作 (右)

经过对 Geant4 的 CSG 几何读取, 还可以得到材料和表面特性等信息。Opticks 使用名为 boundary texture 的二维 float4 texture, 将这些波长相关的特性整合到 GPU, 以便插值查找和波长生成。每个 geometry 分配一个 boundary index, 用来索引内外部的材料特性和表面特性, 从而对出射和入射到几何体的光子事例进行处理。为了避免对相同几何元素的重复存储, Opticks 仅对重复元素进行一次存储, 并指定重复元素对应每个实例位置方向变换的 4×4 矩阵, 从而避免 GPU 上信息的重复。

此外, 为了减少大型探测器几何转换耗时, Opticks 实现了一种称作“geocache”的几何体序列化, 允许将 GPU 中转化完成的几何数组信息保存到 NumPy 二进制文件中, 并在随后的运行中加载这些文件, 以避免重复的几何转换。

3.3.2 光学物理过程编写

OptiX 中 Closest Hit 程序的实现需要基于闪烁光子在液闪探测器中发生的光学物理过程。对于反射和折射，可以参考 Fresnel 公式：

$$\begin{aligned}
 R_s &= \left| \frac{n_1 \cos \theta_i - n_2 \cos \theta_t}{n_1 \cos \theta_i + n_2 \cos \theta_t} \right|^2 = \left| \frac{n_1 \cos \theta_i - n_2 \sqrt{1 - \left(\frac{n_1}{n_2} \sin \theta_i\right)^2}}{n_1 \cos \theta_i + n_2 \sqrt{1 - \left(\frac{n_1}{n_2} \sin \theta_i\right)^2}} \right|^2 \\
 R_p &= \left| \frac{n_1 \cos \theta_t - n_2 \cos \theta_i}{n_1 \cos \theta_t + n_2 \cos \theta_i} \right|^2 = \left| \frac{n_1 \sqrt{1 - \left(\frac{n_1}{n_2} \sin \theta_i\right)^2} - n_2 \cos \theta_i}{n_1 \sqrt{1 - \left(\frac{n_1}{n_2} \sin \theta_i\right)^2} + n_2 \cos \theta_i} \right|^2 \quad (3-1) \\
 T_s &= 1 - R_s \\
 T_p &= 1 - R_p
 \end{aligned}$$

其中 R_s 、 R_p 、 T_s 和 T_p 表示光强在两个偏振方向的反射率和透射率； θ_i 和 θ_t 表示入射角和折射角； n_1 和 n_2 表示入射介质和折射介质的折射率。

对于吸收和散射过程，根据已有材料的吸收长度和衰减长度数据，对发生吸收或散射的飞行距离 d 按照指数分布 D 抽样：

$$D \sim \frac{1}{l_{A,S}} \exp\left(-\frac{d}{l_{A,S}}\right) \quad (3-2)$$

选择距离较小的抽样结果，并计算两次 Closest Hit 之间光线传播的距离，比较前者和后者的结果以确定是否发生吸收或散射过程。对于瑞利散射，还需考虑散射光强的各向异性分布 (γ 为散射角， λ 为入射光波长)：

$$I_{\text{ray}} \sim \frac{1 + \cos^2 \gamma}{\lambda^4} \quad (3-3)$$

3.4 已有结果

Simon 在他最新的研究^[29]中给出了采用 Opticks 的混合 workflow 前后蒙卡模拟速度的比较。测试中使用了 Intel Xeon Gold 5118 和 NVIDIA Quadro RTX 8000 GPU，在已有的 JUNO 几何上对 1M-400M 光子进行模拟，以单线程 Geant4 模拟用时为参考衡量 Opticks 实际加速效果，并在开启和关闭 RTX 两种情况下进行测试，结果如图3.4所示。对于 400M 光子模拟计算，该配置下单线程 Geant4 模拟

用时约 95600s，而 Opticks 模拟 (开启 RTX) 仅用时 58s，相当于将模拟速度提高了约 1660 倍^[29]。此外，开启 RTX 模式前后，Opticks 模拟速度提高了约 5 6 倍。

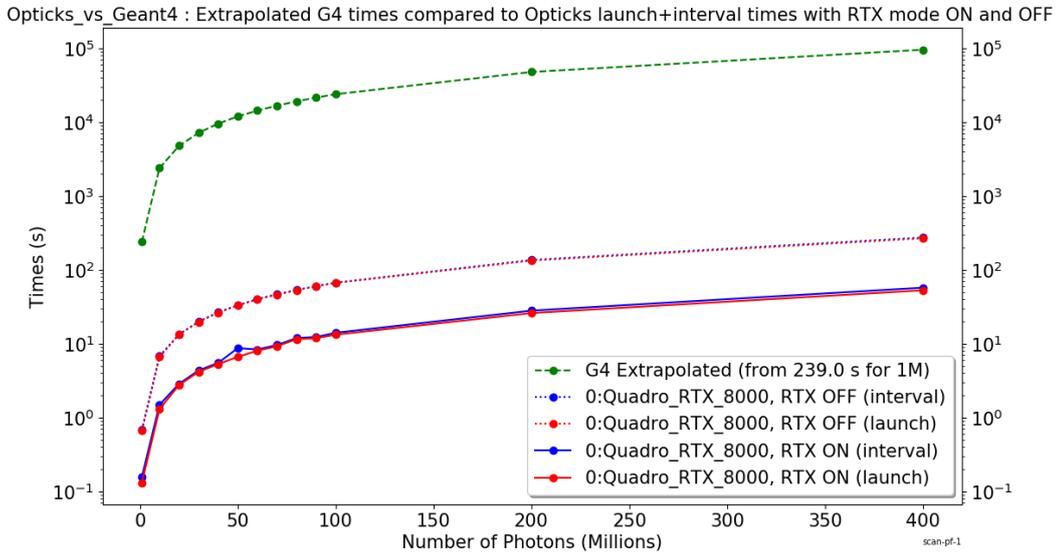


图 3.4 单线程 Geant4 模拟与 Opticks 模拟耗时比较^[29]

在本地 GPU 光子传播计算的简单实现中，对探测器几何均作了简化，采用球体代替原模型的的 PMT。对于一个 300GeV 的 μ 子入射事例产生的约 1.2×10^7 条光线，在传统 Geant4 模拟和加入 OptiX 的模拟分别进行了测试，完整模拟用时和光子传播部分用时如图3.5所示。相比于只在 CPU 上进行的 Geant4 模拟，使用 GPU 加速的总模拟耗时降为前者的约 1/5，其中光子传播部分提速约 250 倍。此外，总模拟耗时基本和光线数量成正比，表明在高能量粒子入射事例模拟中光子传播模拟所占比重很大。

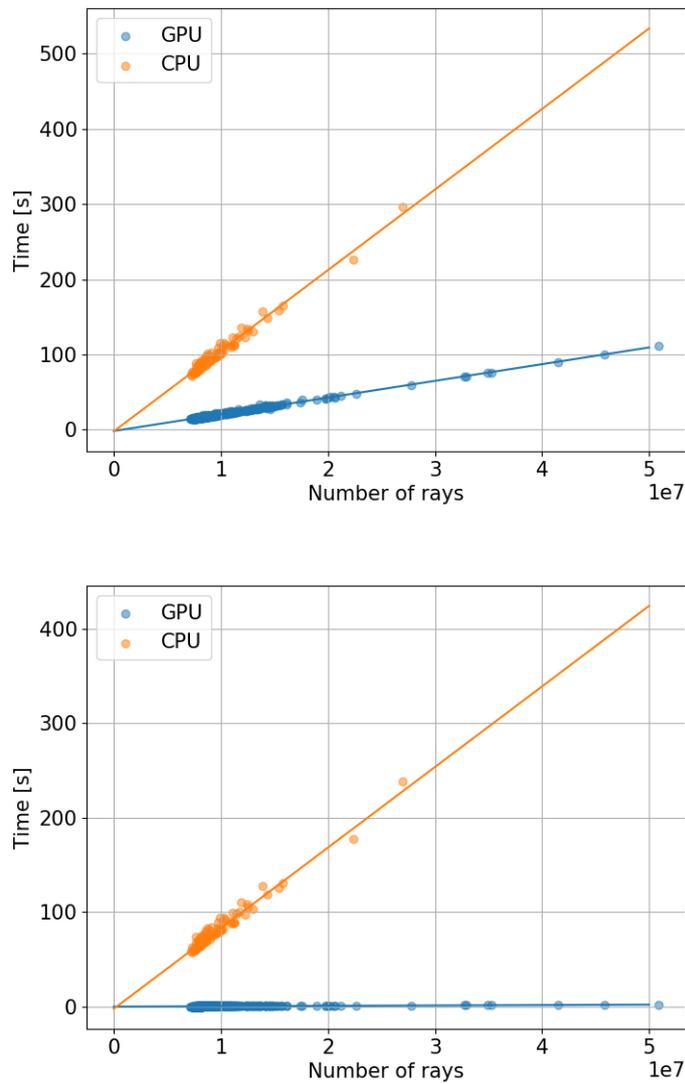


图 3.5 GPU 加速的光子传播模拟和传统 Geant4 模拟用时比较，上图为总模拟用时比较，下图为光子传播部分用时比较

由于本地实现使用的模型较为简单，得到的加速比已经接近 Amdahl 定律所估计的极限，预计在更为复杂的液闪探测器模拟中加速比会有所提升。

第 4 章 结果

4.1 工作总结

本论文主要调研了前人对于中微子实验中常用液体闪烁体光学性质的研究，以及在 GPU 上进行液闪探测器光子传播模拟的实现思路，并对其实现进行了初步尝试。

在液闪光学性质方面，调研了包括瑞利散射和吸收-重发射过程在内，涉及液闪不同组分 (LAB、PPO 和 bis-MSB 等) 光学性质的主要指标，如衰减长度、散射 (瑞利散射) 长度、光谱和荧光量子产额等，并对来自不同实验的测量结果进行了比较。该调研工作作为对液闪探测器内光学过程初步理解的同时，得到的实验测量结果可作为 GPU 光子传播模拟中与液闪光学性质有关的基本常量输入，而对液闪探测器中发生的光学物理基本模型的学习可为 GPU 模拟光线求交算法的实现提供参考。

模拟实现方法方面，介绍了粒子物理模拟常用工具包 Geant4，以及用于 GPU 光子传播模拟设计工具——Nvidia® OptiX™ 的基本功能实现。为了将 CPU 上进行的 Geant4 基础物理模拟与 GPU 上进行的光子传播模拟结合起来，论文还参考了 Simon 的工作 Opticks，根据该工作的实现思路进行了非常初步的 GPU 加速模拟实现，并与只在 CPU 上进行的蒙特卡罗模拟结果进行比较，得到了比较可观的加速效果。

4.2 待解决问题和计划

本论文仅对目前已有的液闪光学性质理解和测量结果进行了初步的归纳和总结，还远未能够建立用于描述液闪探测器内部信号形成的光学物理模型。在实际尝试中，我们对 Simon 提出的 Geant4 + OptiX 混合工作流的实现遇到了较大困难，主要集中在向 GPU 导入光子传播模拟所需的探测器材料与几何的实现方法上，故目前在本地只是暂时实现了不涉及探测器材料物理的光子传播模拟。此外，由于 Simon 的 Opticks 项目过于复杂庞大，在本地对该项目进行编译和结果复现也遇到了很大的困难。之后的工作将在本论文已有结果的基础上继续进行，希望

在不久的将来能够在理解 Opticks 的基础上，完成 JSAP^① 的 GPU 加速模拟实现。

① Jinping Simulation and Analysis Package, 基于 ROOT 和 Geant4 实现, 用于锦屏中微子实验液闪探测器的蒙特卡罗模拟及其数据处理

插图索引

图 1.1	粒子物理标准模型 ^[1]	1
图 2.1	液体闪烁体衰减长度测量装置 ^[9]	9
图 2.2	液闪不同组分衰减长度测量结果 ^[10]	11
图 2.3	瑞利散射长度测量实验装置 ^[14]	15
图 2.4	LAB、PPO、bis-MSB 及它们组合的发射光谱 ^[10]	18
图 2.5	PPO、bis-MSB 和基于 o-PXE 液闪的发射谱 ^[20]	19
图 2.6	bis-MSB 的荧光量子产额测量结果 ^[24]	21
图 3.1	OptiX 光线追踪流水线示意图 ^[27]	25
图 3.2	混合工作流示意图 ^[29]	26
图 3.3	CSG 几何树示例.....	27
图 3.4	单线程 Geant4 模拟与 Opticks 模拟耗时比较 ^[29]	29
图 3.5	总模拟用时和光子传播部分用时比较.....	30
图 A-1	Transmittance spectra and derived light attenuation length.....	44
图 A-2	Comparison of absorption spectra.....	45

表格索引

表 2.1	液闪样品衰减长度测量结果	10
表 2.2	液闪不同组分衰减长度待测样品	10
表 2.3	不同波长下衰减长度测量结果	12
表 2.4	LAB 样品瑞利散射长度测量结果 ^[15]	17

公式索引

公式 1-1	2
公式 1-2	2
公式 1-3	2
公式 1-4	2
公式 1-5	2
公式 1-6	3
公式 1-7	3
公式 1-8	3
公式 1-9	3
公式 1-10	3
公式 1-11	3
公式 1-12	3
公式 1-13	3
公式 1-14	4
公式 2-1	9
公式 2-2	11
公式 2-3	11
公式 2-4	12
公式 2-5	13
公式 2-6	13
公式 2-7	13
公式 2-8	13
公式 2-9	13
公式 2-10	14
公式 2-11	14
公式 2-12	14
公式 2-13	14
公式 2-14	14

公式 2-15	14
公式 2-16	14
公式 2-17	14
公式 2-18	15
公式 2-19	15
公式 2-20	15
公式 2-21	16
公式 2-22	19
公式 2-23	19
公式 2-24	20
公式 2-25	20
公式 3-1	28
公式 3-2	28
公式 3-3	28
公式 A-1	43
公式 A-2	43
公式 A-3	45
公式 A-4	45
公式 A-5	45

参考文献

- [1] Wikipedia. Standard model [EB/OL]. 2002. https://en.wikipedia.org/wiki/Standard_Model.
- [2] Anicin I V. The neutrino - its past, present and future[j]. 2005.
- [3] 胡雨宸, 陆建隆. 中微子研究的突破与诺贝尔物理奖 [J]. 物理教师, 2015, 37:63-68.
- [4] 曹俊. 中微子研究的历史与未来 [J]. 现代物理知识, 2015, 27:4-8.
- [5] Bahcall J N, Davis R. Solar neutrinos: A scientific puzzle [J/OL]. Science, 1976, 191(4224): 264-267. <http://www.jstor.org/stable/1741261>.
- [6] Fukuda Y, Hayakawa T, Ichihara E, et al. Evidence for oscillation of atmospheric neutrinos [J/OL]. Phys. Rev. Lett., 1998, 81:1562-1567. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.81.1562>.
- [7] 陈和生. 高能物理实验的蒙特卡罗模拟 [C]. 中国核学会核电子学与核探测技术分会, 1994: 196-205+223.
- [8] 刘金昌, 李祖豪, 杨长根, 等. 液体闪烁体衰减长度和光产额的测量 [博士学位论文]. 2007.
- [9] Long G, Bo-Xiang Y, Ya-Yun D, et al. Attenuation length measurements of a liquid scintillator with labview and reliability evaluation of the device [J/OL]. Chinese Physics C, 2013, 37(7): 076001. <https://iopscience.iop.org/article/10.1088/1674-1137/37/7/076001/pdf>.
- [10] Xiao H L, Li X B, Zheng D, et al. Study of absorption and re-emission processes in a ternary liquid scintillation system [J/OL]. Chinese Physics C, 2010, 34(11):1724-1728. <https://doi.org/10.1088/1674-1137/34/11/1724>.
- [11] Park J, Lee J, Yeo I, et al. Production and optical properties of gd-loaded liquid scintillator for the reno neutrino detector [J/OL]. Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment, 2013, 707:45 - 53. <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0168900213000168>.
- [12] Goett J, Napolitano J, Yeh M, et al. Optical attenuation measurements in metal-loaded liquid scintillators with a long-pathlength photometer [J/OL]. Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment, 2011, 637(1):47 - 52. <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0168900211003640>.
- [13] Zhou X, Liu Q, Wurm M, et al. Rayleigh scattering of linear alkylbenzene in large liquid scintillator detectors [J/OL]. Review of Scientific Instruments, 2015, 86(7):073310. <https://doi.org/10.1063/1.4927458>.
- [14] Wurm M, von Feilitzsch F, Göger-Neff M, et al. Optical scattering lengths in large liquid-scintillator neutrino detectors [J/OL]. Review of Scientific Instruments, 2010, 81(5):053301. <http://dx.doi.org/10.1063/1.3397322>.

- [15] Zhou X, Liu Q, Wurm M, et al. Rayleigh scattering of linear alkylbenzene in large liquid scintillator detectors [J/OL]. *Review of Scientific Instruments*, 2015, 86(7):073310. <https://doi.org/10.1063/1.4927458>.
- [16] Cabannes, Jean. Relation entre le degré de polarisation et l'intensité de la lumière diffusée par des molécules anisotropes. nouvelle détermination de la constante d'avogadro [J/OL]. *J. Phys. Radium*, 1920, 1(5):129-142. <https://doi.org/10.1051/jphysrad:0192000105012900>.
- [17] Eykman J F. Recherches réfractométriques (suite) [J/OL]. *Recueil des Travaux Chimiques des Pays-Bas*, 1895, 14(7):185-202. <https://onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1002/recl.18950140702>.
- [18] Liu Q, Zhou X, Huang W, et al. Rayleigh scattering and depolarization ratio in linear alkylbenzene [J/OL]. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment*, 2015, 795:284 - 287. <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0168900215006725>.
- [19] Buck C, Gramlich B, Wagner S. Light propagation and fluorescence quantum yields in liquid scintillators [J/OL]. *Journal of Instrumentation*, 2015, 10(09):P09007-P09007. <https://doi.org/10.1088/1748-0221/10/09/P09007>.
- [20] Buck C, Gramlich B, Wagner S. Light propagation and fluorescence quantum yields in liquid scintillators [J/OL]. *Journal of Instrumentation*, 2015, 10(09):P09007-P09007. <https://doi.org/10.1088/1748-0221/10/09/P09007>.
- [21] Wagner S. Energy non-linearity studies and pulse shape analysis of liquid scintillator signals in the Double Chooz experiment [D]. Heidelberg U., 2014.
- [22] Pardo A, Reyman D, Poyato J, et al. Some β -carboline derivatives as fluorescence standards [J/OL]. *Journal of Luminescence*, 1992, 51(5):269 - 274. <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/002223139290077M>.
- [23] Melhuish W H. Quantum efficiencies of fluorescence of organic substances: Effect of solvent and concentration of the fluorescent solute1 [J/OL]. *The Journal of Physical Chemistry*, 1961, 65(2):229-235. <https://doi.org/10.1021/j100820a009>.
- [24] Feng D, Jian W, Xiang Z, et al. Measurement of the fluorescence quantum yield of bis-msb [J/OL]. *Chinese Physics C*, 2015, 39. <https://iopscience.iop.org/article/10.1088/1674-1137/39/12/126001>.
- [25] Allison J, et al. Recent developments in geant4 [J/OL]. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment*, 2016, 835:186 - 225. <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0168900216306957>.
- [26] Agostinelli S, et al. Geant4—a simulation toolkit [J/OL]. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment*, 2003, 506(3):250 - 303. <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0168900203013688>.

- [27] Parker S G, Bigler J, Dietrich A, et al. Optix: A general purpose ray tracing engine [J/OL]. ACM Trans. Graph., 2010, 29(4). <https://doi.org/10.1145/1778765.1778803>.
- [28] Blyth S. Opticks : A gpu accelerated optical photon simulation using nvidia optix [EB/OL]. 2015[2020-5-16]. <https://bitbucket.org/simoncblyth/opticks>.
- [29] Blyth S. Opticks : Gpu optical simulation via nvidia®optix™[EB/OL]. 2019[2019-12]. https://simoncblyth.bitbucket.io/env/presentation/opticks_gpu_optical_photon_simulation_dec2019_ihep_epd_seminar.html.
- [30] C B S. Opticks : GPU optical photon simulation for particle physics using NVIDIA® OptiX™ [J/OL]. Journal of Physics: Conference Series, 2017, 898:042001. <https://doi.org/10.1088/1742-6596/898/4/042001>.
- [31] Blyth, Simon. Opticks : Gpu optical photon simulation for particle physics using nvidia optix™[J/OL]. EPJ Web Conf., 2019, 214:02027. <https://doi.org/10.1051/epjconf/201921402027>.
- [32] 薛瑞尼. ThuThesis: 清华大学学位论文模板 [EB/OL]. 2017[2019-04-27]. <https://github.com/xueruni/thuthesis>.

致 谢

感谢导师续本达教授在学术和技术上给予的支持和帮助，他的以身作则和言传身教将使我终生受益。

感谢近代物理研究所的各位老师和同学对本人的建议和帮助，没有他们我的毕设将会寸步难行。

感谢 Simon Blyth 和他的 Opticks 项目，让我认识到自己毕设做得很糟糕，未来还有很长的路要走。

感谢 L^AT_EX 和 ThuThesis^[32]，帮我节省了不少时间。

声 明

本人郑重声明：所提交的学位论文，是本人在导师指导下，独立进行研究工作所取得的成果。尽我所知，除文中已经注明引用的内容外，本学位论文的研究成果不包含任何他人享有著作权的内容。对本论文所涉及的研究工作做出贡献的其他个人和集体，均已在文中以明确方式标明。

签 名： _____ 日 期： _____

附录 A 外文资料的调研阅读报告

A Brief Overview of Liquid Scintillator Optical Properties

Liquid scintillator detectors play an significant role in experimental neutrino physics. Over the course of several decades, organic liquid scintillators have formed the basis for successful neutrino detectors. And in recent years, large-volume liquid-scintillator detectors have made important contributions to low-energy neutrino physics^[5]. As a result of the generated scintillation light propagation in liquid scintillation detector, the moving track of light signal is not a ideal straight line to PMTs, which involves a variety of interactions between scintillation light and detector, including reflection, absorption, refraction, scattering and so forth. To better understand the produced process of photon signal in liquid scintillator detector, it is essential to ascertain liquid scintillator optical properties.

A.1 Optical Properties

In this section, optical properties of some specific LS detectors are discussed, which is helpful for us to further understand advantages and disadvantages of these designs.

A.1.1 Optical Stability of Gd-doped LS

The Gd is used to detect neutrons following an antineutrino interaction with hydrogen nuclei^[1]. Gadolinium-loaded liquid scintillators provide efficient background suppression for electron antineutrino detection at nuclear reactor plants^[1]. The main advantage of Gd doping the LS is to improve the S/N ratio in the detection of the inverse beta decay $\bar{\nu}_e$ interactions by lowering the neutron capture time of a factor of ~ 10 and increasing the energy of the emitted gamma rays (~ 8 MeV instead of 2.2 MeV)^[2]. However, the requirement for optical and chemical stabilities of Gd-LS is critical factor which greatly restricts its development.

Barabanov et al^[2] evaluated the optical quality of Gd-doped LS by measuring its light transmittance ($T = \frac{I}{I_0}$, which is defined as the ratio of the outgoing(I) to incoming(I_0) light beam intensity, on a slice of media of x [cm] optical path). They

used UV/VIS spectrophotometry, with the wavelength range from 350 to 800 nm, to perform the measurement. According to Lambert-Beer law(A-1)

$$A(\lambda) = -\log(T) = \epsilon(\lambda)cx \quad (\text{A-1})$$

in (A-1), $x[\text{cm}]$ is the optical path, $c[\text{mole}]$ is the concentration of light-absorbing species, $\epsilon(\lambda)[\text{mole}^{-1} \cdot \text{cm}^{-1}]$ is the Molar Extinction Coefficient related to the substance and the wavelength(λ) of light. Accordingly, the light attenuation length $\Lambda(\lambda)$

$$\Lambda(\lambda) = \frac{x}{A(\lambda) \ln 10} \quad (\text{A-2})$$

Therefore, once the transmittance spectrum is measured, we can easily determine Λ . The measurement results shown that the developed Gd complex does not affect immediately the optical properties of the LS for $\lambda \geq 400\text{nm}$ ^[2].

However, the transmittance of all Gd-doped LS samples had decreased in two years, which is showed in figure A-1. For target T3131, the Gd doping delayed impact on T is well below 1%, and the value of Λ deduced from each of samples is $\geq 10\text{m}$ for wavelengths $\geq 420\text{nm}$, which was better than the results of T40. Besides, Barabanov et al studied the transmittance values at 415, 425, 435, 445 nm versus time(~ 800 days in total). The fit results confirmed the stability of T at all the wavelengths^[2].

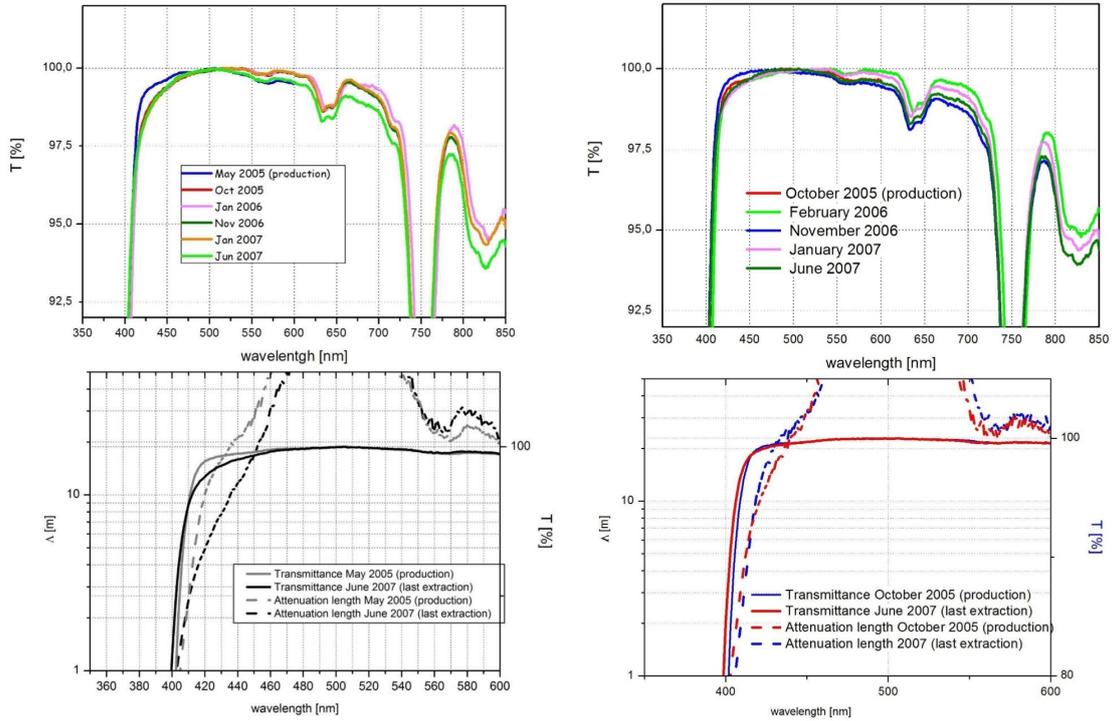


图 A-1 Transmittance spectra(top) of Gd-doped LS samples extracted periodically from tank T40, and the derived light attenuation length(bottom). Two main kinds of LS: LS1(contains $\sim 16\%$ of aromatics) and LS2(contains $\sim 8\%$ of aromatics), and two doped counters: T40(left, LS1 was doped at $[Gd]= 1.05g/l$ in May 2005) and T3131(right, LS2 was doped at $[Gd]=0.93g/l$ in October 2005)

Wanda et al^[3] considered that colored impurities, such as iron and cobalt, had a non-ignorable influence on optical transparency of Gd-LS. They realized that in addition to increasing absorbance from 340 nm to 600 nm, iron affects the chemical stability of Gd-LAB^[3].(Figure A-2).

A.1.2 Optical Scattering Lengths in Large LS Detectors

For liquid-scintillator neutrino detectors of kiloton scale, the transparency of the organic solvent is of central importance^[5]. There are three microscopic processes which have influence on the light propagation: Rayleigh scattering off the bound electrons of molecules in the solvent; Mie scattering from dirt or dust particles suspended in the liquid; absorption of the light by molecules, which is either re-emitted or converted into excitation modes invisible to the photomultipliers. And in the present experiment, both the intensity and polarization of the scattered light are measured for several scattering angles, which is probably helpful for us to identify the contributions of Rayleigh scattering,

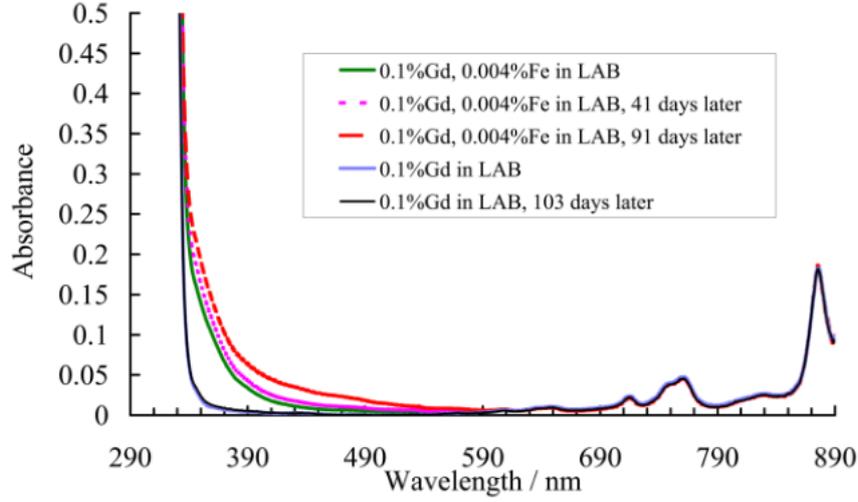


图 A-2 Comparison of absorption spectra of 0.1% Gd-LAB with or without Fe at various times after preparation

Mie scattering and absorption/re-emission processes by their angular dependences^[5].

About one-dimensional propagation, the total number of scattered photons per unit propagation dN/dx is related to the attention length L :

$$N(x) = N_0 e^{-Qx} = N_0 e^{-x/L} \quad (\text{A-3})$$

$Q = n\sigma_{\text{tot}}$ describes the ratio of scattered light per unit length to the incident number of photons $N(x)$ at point x ; n is the number density of scattering centers in the direction of light propagation; σ_{tot} is the total interaction cross section. Considering the contribution of different interactions, ($Q = \sum_i Q_i = \sum_i (n\sigma_{\text{tot}})_i$ and $l_i = 1/Q_i$), we can write attenuation length L as

$$\frac{1}{L} = \frac{1}{l_A} + \frac{1}{l_S} \quad \frac{1}{l_S} = \frac{1}{l_{\text{are}}} + \frac{1}{l_{\text{ray}}} + \frac{1}{l_{\text{mie}}} \quad (\text{A-4})$$

And in the present analysis, the scattering length l_S is described as a combination of anisotropic and isotropic scattering lengths:

$$\frac{1}{l_S} = \frac{1}{l_{\text{an}}} + \frac{1}{l_{\text{is}}} \quad (\text{A-5})$$

Wurm et al^[5] studied the optical scattering lengths of the organic solvents PXE, LAB and Dodocane, in the wavelength range from 415 to 440 nm. The results showed that LAB seems to be the best solution for a large-volume detector ($L = 15 \sim 20\text{m}$ and $l_S = 25\text{m}$, without further purification). As long as the diameter of the scintillator tank

didn't exceed 30 to 40 m, the smearing of the arrival time pattern(due to scattering) had little influence on the time resolution. However, the relatively slow fluorescence decay of LAB may be a drawback in certain applications(e.g. nucleon decay search).

In addition to above, both PC and PXE had low scattering length(10 ~ 20m). PC was considered as an excellent choice for present 100t to 1kt scale detectors^{[4][5]}, while PXE had a visible light absorption in attenuation length measurements. But through purification, PXE was also workable for a detector of 20 to 30 m diameter. The present results can serve as a valuable input for upcoming simulations of the scintillation light transport in large-scale detectors^[5].

A.1.3 Summary

These existing studies have contributed valuable experience about the component choice of liquid scintillator for specific purposes. At present, most researches on the optical properties are mainly about actual comprehensive effect of some LS towards a specific wavelength range. The detailed formation process of scintillation light signal from production to PMTs in detectors need to be understood. Comprehending these situation is crucial for us to reduce the mistakes of reconstruction. Efficient simulation about the process will be helpful.

参考文献

- [1] Christoph Aberle, C Buck, B Gramlich, FX Hartmann, M Lindner, S Schönert, U Schwan, Stefan Wagner, and H Watanabe. Large scale gd-beta-diketonate based organic liquid scintillator production for antineutrino detection. *Journal of Instrumentation*, 7(06):P06008, 2012.
- [2] I. R. Barabanov, L. B. Bezrukov, C. M. Cattadori, N. A. Danilov, A. di Vacri, Yu S. Krilov, L. Ioannucci, E. A. Yanovich, M. Aglietta, A. Bonardi, G. Bruno, W. Fulgione, E. Kemp, A. S. Malguin, A. Porta, and M. Selvi. Performances and stability of a 2.4 ton Gd organic liquid scintillator target for bar ν_e detection. *Journal of Instrumentation*, 5(4):4001, April 2010. doi: 10.1088/1748-0221/5/04/P04001.
- [3] Wanda Beriguete, Jun Cao, Yayun Ding, Sunej Hans, Karsten M. Heeger, Liangming Hu, Aizhong Huang, Kam-Biu Luk, Igor Nemchenok, Ming Qi, Richard Rosero, Hansheng Sun, Ruiguang Wang, Yifang Wang, Liangjian Wen, Yi Yang, Minfang Yeh, Zhiyong Zhang, and Li Zhou. Production of a gadolinium-loaded liquid scintillator for the daya bay reactor neutrino experiment. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment*, 763:82 – 88, 2014. ISSN 0168-9002. doi:

<https://doi.org/10.1016/j.nima.2014.05.119>. URL <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0168900214006834>.

- [4] F. Elisei, F. Gatti, A. Goretti, T. Hagner, F. Masetti, U. Mazzucato, G. Ranucci, S. Schoenert, G. Testera, P. Ullucci, and S. Vitale. Measurements of liquid scintillator properties for the borexino detector. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment*, 400(1):53 – 68, 1997. ISSN 0168-9002. doi: [https://doi.org/10.1016/S0168-9002\(97\)00933-9](https://doi.org/10.1016/S0168-9002(97)00933-9). URL <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0168900297009339>.
- [5] M. Wurm, F. von Feilitzsch, M. Göger-Neff, M. Hofmann, T. Lachenmaier, T. Lewke, T. Marrodán Undagoitia, Q. Meindl, R. Möllenberg, L. Oberauer, W. Potzel, M. Tippmann, S. Todor, C. Traunsteiner, and J. Winter. Optical scattering lengths in large liquid-scintillator neutrino detectors. *Review of Scientific Instruments*, 81(5):053301, 2010. doi: 10.1063/1.3397322. URL <https://doi.org/10.1063/1.3397322>.

综合论文训练记录表

学生姓名		学号		班级	
论文题目					
主要内容以及进度安排	<div style="text-align: right; margin-top: 20px;"> 指导教师签字：_____ </div> <div style="text-align: right; margin-top: 10px;"> 考核组组长签字：_____ </div> <div style="text-align: right; margin-top: 10px;"> 年 月 日 </div>				
中期考核意见	<div style="text-align: right; margin-top: 20px;"> 考核组组长签字：_____ </div> <div style="text-align: right; margin-top: 10px;"> 年 月 日 </div>				

<p style="text-align: center;">指导教师评语</p>	<p style="text-align: right;">指导教师签字：_____</p> <p style="text-align: right;">年 月 日</p>
<p style="text-align: center;">评阅教师评语</p>	<p style="text-align: right;">评阅教师签字：_____</p> <p style="text-align: right;">年 月 日</p>
<p style="text-align: center;">答辩小组评语</p>	<p style="text-align: right;">答辩小组组长签字：_____</p> <p style="text-align: right;">年 月 日</p>

总成绩：_____

教学负责人签字：_____

年 月 日