文章编号：1007－4627(2010)04－0445－05

基于 GEANT4 的 CsI(Tl)闪烁体探测器的 Monte Carlo 模拟*

岳 珂[1,2]，徐瑚珊[1]，梁晋洁[1]，孙志宇[1]，王建松[1]，苏光辉[1,2]，
胡正国[1]，陈若富[1]，肖志刚[3]，郑 川[1]，张雪荧[1]，
涂小林[1,2]，陈金达[1,2]，章学恒[1]，陈俊岭[1]
(1 中国科学院近代物理研究所，甘肃 兰州 730000；
2 中国科学院研究生院，北京 100049；
3 清华大学物理系，北京 100084)

摘 要：对闪烁光在晶体内的传输以及光电子倍增过程进行了建模，基于 GEANT4 软件包对 CsI(T1)闪烁体探测器进行了蒙特卡罗模拟，得到了不同形状、尺寸和包装的 CsI(Tl)晶体测量 γ 射线的能谱。对比模拟和测试结果，两者得到了很好的符合，从而验证了模拟参数的合理性和可靠性。该模拟程序的建立为闪烁体探测器的设计提供了更精确的开发工具。

关 键 词：GEANT4；闪烁体探测器；蒙特卡罗模拟；光电倍增管
中图分类号：O571.1 **文献标识码**：A

1 引言

近年来随着新型无机闪烁体种类的不断增加，闪烁体探测器越来越广泛地应用于核物理、粒子物理、天文物理以及核医学成像等研究领域。其中，CsI(Tl)晶体因为具有较高的密度、光产额、辐照硬度和相对低廉的价格等优点，成为研制大型电磁量能器的理想晶体材料[1—3]。目前中国科学院近代物理研究所已具备批量生产加工大尺寸 CsI(Tl)晶体的能力[4]，并正在用 CsI(Tl)晶体在兰州重离子加速器冷却储存环(HIRFL-CSR)外靶实验终端设计建造一个近 4π 结构的 γ 量能器[5]。

对于闪烁体探测器的设计，蒙特卡罗模拟作为一种既节约时间又节约成本的工具而被广泛应用[6,7]。模拟程序可以在不浪费晶体材料的前提下对闪烁体探测器进行详细的建模，包括能量在晶体内的沉积，闪烁光的产生、传输，最终被光子探测器探测等一系列过程。通过修改晶体形状、性质、包装材料等相关参数，就可以快速得到不同闪烁体探测器性能的优化结果。

GEANT4 是由欧洲核子中心(CERN)基于 C＋＋语言开发的一种用于核物理和高能物理实验的蒙特卡罗模拟程序包[8]。GEANT4 提供了种类全面的粒子与物质相互作用的反应截面，用于精确计算粒子在介质中的输运过程。GEANT4 还提供了构造各种晶体材料和几何结构的基础方法和用户接口，以便用户构建复杂的探测器结构。目前，闪烁体探测器的模拟工作主要以模拟能量沉积为主，探测器的能量分辨则通过公式计算得到[9,10]。这种模拟缺乏对闪烁光在晶体内部传输过程描述的精确性，特别是对晶体表面包装的光学性质的描述更粗糙。GEANT4 提供了对可见光光子的追踪功能以及对不同介质界面光学性质参数化的描述方法，为闪烁体探测器的设计提供了更精确的模拟平台。

本文利用 GEANT4 这种光子追踪的功能，通过模拟 CsI(Tl)晶体中闪烁光产生、传输和收集过程，并且对光电倍增管读出进行了建模。通过对光电子数目分布进行统计，可以直接给出闪烁体探测器的能量分辨。根据蒙特卡罗模拟得到了不同形状 CsI(Tl)晶体测量 662 keVγ 射线时的能量分辨。本文还给出了一组合理的模拟参数。最后对比实验室

* **收稿日期**：2010－03－25；**修改日期**：2010－04－21
* **基金项目**：中国科学院知识创新工程重大项目资助(KJCX2-YW-N44，KJCX1-YW-004)；国家重点基础研究发展规划项目(2008CB817702)；国家自然科学基金资助项目(10635080)；国家杰出青年科学基金资助项目(10925526)
作者简介：岳珂(1983－)，男(汉族)，陕西汉中人，博士研究生，从事实验核物理研究；E-mail：yueke@impcas.ac.cn

测试结果，验证了模拟程序的合理性，为闪烁探测器设计提供一个可靠的依据。

2 实验室测试结果

为了给探测器模拟提供实验依据，首先对 CsI(Tl)晶体的性能进行了测试。测试工作在一个避光的金属箱中进行，共测试了 3 种不同的 CsI(Tl)晶体样品：1#晶体为 10 mm×10 mm×10 mm 的立方体；2#晶体的尺寸为 10 mm×10 mm×50 mm；3#晶体为圆柱体，尺寸为 ϕ25.4 mm×25.4 mm。使用的样品全部由中国科学院近代物理研究所生产加工。所有晶体表面抛光，除读出端以外，均使用白色 Teflon 材料(FR104-1，上海三爱富新材料股份有限公司生产)包装，每面包 3 层。3#晶体还被置于一端开放的铝制外壳内。光子读出器件使用 Hamamatsu 公司生产的 R7724 型光电倍增管，工作电压为 1500 V，由 CAEN 公司的 N470 电源供电。晶体读出端与光倍管入射窗之间采用光学硅脂(Bicron BC-630)耦合。

经铅光阑准直的^{137}Cs 放射源照射晶体样品，信号进入放大器(ORTEC 572A)成形放大，输入 peak ADC(Phillips 7164)进行 A-D 转换，并由 CAMAC 数据获取系统读出。

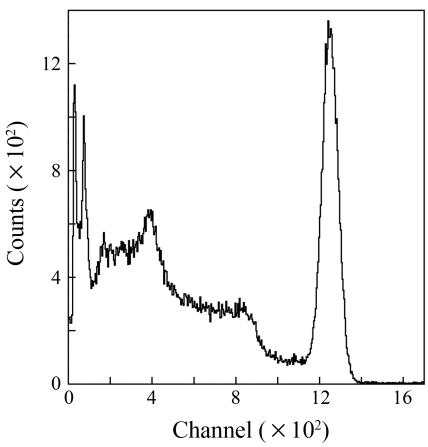

图 1 1#晶体样品测量 662 keV 的 γ 射线的能谱

图 1 给出了 1#晶体样品测量 662 keV 的 γ 射线的能谱。拟合得到光电全能峰的能量分辨为(6.33±0.07)%。所有 CsI(Tl)样品能量分辨的测试结果详见 3.3 节的表 2。1#和 2#晶体不仅测试了包装 Teflon 时的能量分辨，而且还测试了没有任何包装情况下的能量分辨。

为确保测试系统稳定性，在晶体测试前后，都使用同一块标准晶体刻度测试系统。测试结果表明，系统的稳定性非常好，信号幅度变化小于 1%。

3 Monte Carlo 模拟

编写的模拟程序主要考虑了对电磁相互作用和闪烁光传输两方面过程的模拟。电磁相互作用主要包括以下一些物理过程：光电效应、康普顿散射、电子对效应，以及相关的电离、电子对湮灭、切伦科夫辐射、韧致辐射、瑞利散射等过程。这些物理过程由 Geant4 提供的类来描述。γ 射线及带电粒子与物质的相互作用也通过 GEANT4 提供的低能电磁相互作用过程(Low Energy Electromagnetic Processes)来描述。闪烁体的几何结构、光产额、光学性质、表面性质以及光子的探测则通过外部的参数来设置。该程序使用 ROOT 软件包[11]作为数据分析的工具。

3.1 CsI(Tl)晶体的建模

图 2 给出了利用模拟程序构建的 1#和 3#两个 CsI(Tl)晶体探测器的几何结构，CsI(Tl)晶体下

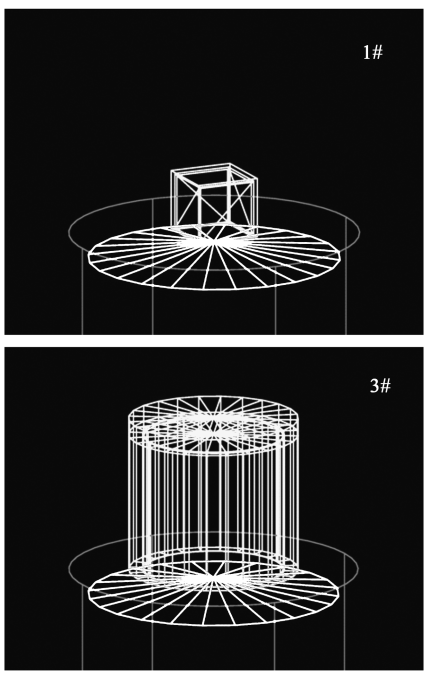

图 2 模拟程序构建的 CsI(Tl)晶体探测器的几何结构

方是光电倍增管及光阴极，整个探测器被放置在空气中。CsI(Tl)晶体的物理性质通过外部参数来设置，密度为 4.5 g/cm^3，折射率为 1.78，光衰减长

度设为 1 m，光产额为 61000 photons/MeV[12]。闪烁光的发光能谱也需要在程序中定义。光电倍增管入射窗的材料为派热克斯玻璃(Pyrex Glass)，折射率为 1.524。

入射粒子由模拟程序的事件产生器产生，点状的射线源发射出 662 keV 的 γ 射线从晶体侧面竖直入射。γ 射线与探测介质相互作用并沉积能量。模拟程序根据沉积能量的大小，在相应位置各向同性地发射一定数目的闪烁光光子。闪烁光在晶体内部传输，经过晶体表面的多次折射和反射后，被衰减吸收或者被光电倍增管的光阴极收集。

用于晶体表面包装的 Teflon 材料的光学性质采用 UNIFIED[13] 模型来描述。调节与 CsI(Tl)晶体材料和表面光学性质相关的模拟参数，通过反复对比实验室测试结果，得到了一组较为接近真实情况的参数设置。包装层和晶体之间的界面类型设置为 dielectric_dielectric。虽然测试使用的晶体表面是抛光处理，但实际上不可能达到理想的光滑平面，而且由于 CsI(Tl)表面和 Teflon 接触，会轻微潮解起雾。因此，在程序中设置 CsI(Tl)晶体表面的抛光类型为 groundbackpainted，描述表面粗糙程度的参数 sigma alpha 设置为 0.06 rad。同时，设定晶体表面反射成份中波瓣反射(specular lobe)占 95%，漫反射成分(diffuse lobe)占 5%，包装材料的反射率设为 0.98。对于没有包装的晶体，其他条件不变，只需将包装材料的反射率设置为 0 即可。

3.2　光电子倍增过程的建模

用 CsI(Tl)晶体探测 γ 射线时，最终得到的是具有一定展宽的能谱。这一展宽主要决定于光电倍增管阳极收集到的电子数的统计涨落。电子数 Q_{pe} 可以用下面的公式来描述：

$$Q_{pe} = N_p \times \eta_{\text{Light transport}} \times QE \times M \ , \qquad (1)$$

其中，N_p是晶体沉积能量后产生的闪烁光的光子数，$\eta_{\text{Light transport}}$是闪烁光在晶体中传输直到被光阴极收集的传输效率，$QE$ 是光阴极将光子转化为电子的量子效率。在光子波长 $\lambda = 540$ nm 处，R7724 型光电倍增管光阴极的量子效率为 8.7%[14]，M 则是光电倍增管的放大倍数。

公式(1)中的 4 项参数都会对最终能谱的展宽具有贡献。其中，闪烁光子数 N_p的涨落带来的分辨被称为晶体的本征能量分辨，主要由晶体材料的性质决定。对 662 keV 的 γ 射线，模拟程序中 CsI(Tl)的本征能量分辨取 3.6%(FWHM)[15]，这一参数可以在模拟程序中直接设置。对于闪烁光在晶体中的传输效率，通过上一节的方法可以直接得到光阴极上收集到的光子数及其统计误差。

光电倍增管对于光电子的放大倍数可以表示为[16]

$$M = \prod_{j=1}^{n} \delta_j \ , \qquad (2)$$

其中，n 是光倍管打拿极的个数，δ_j是第 j 级打拿极的放大倍数。由此可以得到对光电子进行放大时带来的误差为

$$\nu(M) = \sum_{i=1}^{n} \prod_{j=1}^{i} \frac{1}{\delta_j} \ 。 \qquad (3)$$

我们使用一组随机数来产生一个标准偏差为

$$\sigma(X) = X\sqrt{\frac{1+\nu(M)}{X}} \qquad (4)$$

的高斯分布，并用这个高斯分布将光阴极探测到的光子谱进行展宽，从而模拟这一过程引入的误差，最终得到接近真实情况的能量分辨。公式(4)中 X 是光阴极探测到的光子数目。

3.3　模拟结果

图 3 给出了模拟 1# 晶体探测能量为 662 keV 的 γ 射线得到的能谱，拟合得到光电全能峰的能量

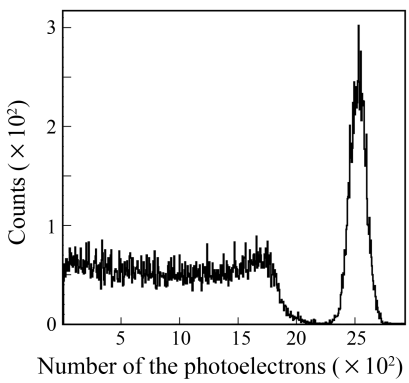

图 3　模拟得到的 1# 晶体探测能量为 662 keV 的 γ 射线的能谱

分辨为 6.43%。从能谱上可以清楚地看到光电全能峰和康普顿平台。由于现阶段的模拟程序中并未考虑实验室内探测器周围的环境，所以能谱中没有出现 γ 反散射峰。根据测试得到的能谱估算，反散射

光子的数目大约占光子总数的 7%，相对较小。由于反散射峰这一部分事件丢失，利用该程序来模拟电磁量能器时，会使得模拟得到的探测效率不准确。这是在将来工作中需要对程序改进的方面。

根据测试时的晶体条件，在模拟中构建了不同的探测器结构，分别对这些不同形状、尺寸和包装的 CsI(Tl)晶体进行模拟。表 1 中给出了模拟 3 种 CsI(Tl)晶体探测 662 keV 的 γ 射线得到的能量分辨，其中 1# 和 2# 晶体模拟了包装 Teflon 和没有任何包装两种情况，3# 晶体包装 Teflon 和铝壳。其中，模拟 1 cm^3 包装 Teflon 的晶体得到的能量分辨为 6.43%(FWHM)，而测试得到的能量分辨为 6.33%(FWHM)，在所有模拟的结果中符合得最好。从模拟结果可以看出，对于同样尺寸的晶体，包装 Teflon 的能量分辨要好于无任何包装的情况。

表 1 使用不同形状和包装的 CsI(Tl) 晶体测量 662 keV 的 γ 射线和实验室测试与模拟得到的能量分辨(FWHM)的结果比较

晶体编号及包装	模拟结果(%)	测试结果(%)
1# Teflon	6.43	6.33
1# Naked	12.05	12.38
2# Teflon	9.04	10.04
2# Naked	21.88	20.52
3# Teflon+Al	7.80	7.4

这是由于晶体内的闪烁光在传输到晶体表面时，如果入射角大于全反射角，就会被反射而继续在晶体中传输。当入射角小于全反射角时，则会发生折射，使得闪烁光光子离开晶体进入空气。如果晶体外没有包装材料反射逃出的光子，闪烁光就无法再次返回晶体内，最终使得光子探测器收集到的光子数大大降低，统计降低也就造成了能量分辨的变差。另外，模拟不同形状和尺寸的晶体得到的能量分辨也不相同。一方面是由于不同的尺寸使得闪烁光在晶体内传输的距离不同。传输距离越长，闪烁光照射到晶体表面的次数也越多，其泄露出晶体或被包装材料吸收的概率也就越大，最终光子探测器收集到的光子的统计就会变低。另一方面，不同的晶体形状会使闪烁光入射晶体表面时的入射角度不同，若大多数入射光子的角度大于全反射角度，就有利于光传输。反之，则会降低光传输效率。晶体的尺寸和形状正是通过以上两个原因来影响最终的光子统计以至能量分辨的。

通过对比测试结果表明，虽然这 3 块 CsI(Tl)闪烁体的形状、尺寸都有很大的不同，而且包装也有较大差别，但是模拟得到的能量分辨与实际测试结果都取得了很好的一致。这充分说明本文给出的这组模拟参数的合理性和可靠性，在改变闪烁体的形状和尺寸的情况下，模拟程序都可以取得接近真实的结果。现在的大部分闪烁体模拟程序并不包括对闪烁光的传输和收集过程的细致模拟。探测器的能量分辨只能通过公式计算或者实验测试给出[9, 10]，可信度较低。而利用本文给出的方法，可以使模拟程序适用于更为广泛的闪烁体结构，并得到较为可信的模拟能量分辨，为闪烁体探测器的设计工作提供一个有效而且可靠的研发工具。

4 结论

本文讨论了影响 CsI(Tl)闪烁体探测器能量分辨的几个主要因素。对光电倍增管的电子倍增过程进行了合理的建模，并利用 GEANT4 对 CsI(T1)闪烁体探测器进行了蒙特卡罗模拟，得到了探测器测量 662 keV 的 γ 射线时的能谱以及全能峰能量分辨。通过对比实验室测试结果，得到了一组合理的 CsI(Tl)晶体光学性能的参数。对于不同形状和尺寸的 CsI(Tl)晶体，都得到了与实测数据符合得较好的结果。从而证明了模拟程序的合理性和可靠性。但是由于 CsI(Tl)晶体的光产额较高，而该模拟程序需要追踪所有闪烁光光子的传输，这就使得程序运行需要的时间很长。因此，该程序更适合对较小型的闪烁体探测器的模拟，或者需要运算能力更为强大的计算机。

在本文的工作中，将闪烁体材料限定为 CsI(Tl)，入射 γ 能量为 662 keV。在以后的模拟程序中还可以使用更广泛的闪烁体材料和入射 γ 的能量范围，从而将该工具应用到核物理实验以及核医学成像等更广泛的领域。CsI(Tl)闪烁体细致模拟程序的建立对今后闪烁体探测器的设计将会发挥重要的指导作用。

参考文献(References)：

[1] Zhu Rengyun. Nucl Phys, 1999, B78: 203.

[2] L3 Collaboration. Nucl Instr and Meth, 1999, **A289**: 35.
[3] Auberta B, Bazana A, Bouchama A, *et al*. Nucl Instr and Meth, 2002, **A479**: 1.
[4] Chen Ruofu, Xu Hushan, Fan Ruirui, *et al*. Chinese Phys, 2008, **C32(2)**: 135.
[5] Yue Ke, Xu Hushan, Sun Zhiyu, *et al*. Chinese Phys C, 待发表.
[6] Li Wengfei, Xu Hushan, Sun Zhiyu, *et al*. Nuclear Physics Review, 2004, **21(4)**: 309(in Chinese).
(李文飞，徐瑚珊，孙志宇，等. 原子核物理评论，2004，**21(4)**：309.)
[7] Zhou Jing, Meng Qiuying, Li Xiaomei, *et al*. Nuclear Physics Review, 2004, **21(1)**: 12(in Chinese).
(周静，孟秋英，李笑梅，等. 原子核物理评论，2004，**21(1)**：12.)
[8] Agostinelli S, Allison J, Amako K, *et al*. Nucl Instr and Meth, 2003, **A506**: 250.
[9] Rothfuss H, Byars L, Casey M E, *et al*. Nucl Instr and Meth, 2007, **A580**: 1087.
[10] Cheng Pinjing, Ling Qiu. Journal of University of South China (Science and Technology), 2009, **23(3)**: 1(in Chinese).
(程品晶，凌球. 华南大学学报(自然科学版)，2009，**23(3)**：1.)
[11] The ROOT Development Team. http://root.cern.ch/.
[12] Moszyňski M, Kapusta M, Mayhugh M, *et al*. IEEE Trans Nucl Sci, 1997, **44**: 1052.
[13] Levin A, Moisan C. IEEE Nuclear Science Symposium, 1996, **2**: 702.
[14] Hamamatus SiAPD S8664-1010, Japan. http://www.hamamatsu.com.
[15] Balcerzyk M, Moszynski M, Mengesha W, *et al*. http://www.ipj.gov.pl/～balcerzm/dowziecia/IntrinsicEnergyResolution.pdf.
[16] Dorenbos P, de Haas J T M, van Eijk C W E. IEEE Trans Nucl Sci, 1995, **42**: 2190.

Monte Carlo Simulation of CsI(Tl) Scintillator Detector with GEANT4 ToolKit*

YUE Ke[1,2,1)], XU Hu-shan[1], LIANG Jin-jie[1], SUN Zhi-yu[1], WANG Jian-song[1], SU Guang-hui[1,2], HU Zheng-guo[1], CHEN Ruo-fu[1], XIAO Zhi-gang[3], ZHENG Chuan[1], ZHANG Xue-ying[1], TU Xiao-lin[1,2], CHEN Jin-da[1,2], ZHANG Xue-heng[1], CHEN Jun-ling[1]

(1 *Institute of Modern Physics*, *Chinese Academy of Sciences*, *Lanzhou* 730000, *China*;
2 *Graduate University of Chinese Academy of Sciences*, *Beijing* 100049, *China*;
3 *Department of Physics*, *Tsinghua University*, *Beijing* 100084, *China*)

Abstract: With the modeling of the light transportation in crystal and electron multiplication in the PMT, a Monte Carlo simulation of CsI(Tl) scintillator detector has been implemented with Geant4 toolkit. The energy spectra simulated with different crystal shape, size and wrappings are obtained. And the reliability of the simulation parameters is confirmed by comparing with the measurements. The simulation code can be used as an reliable tool for the design of scintillator detectors.

Key words: GEANT4; Scintillator detector; Monte Carlo simulation; PMT

* **Received date**: 25 Mar. 2010; **Revised date**: 21 Apr. 2010
* **Foundation item**: Knowledge Innovation Project of Chinese Academy of Sciences(KJCX2-YW-No44, KJCX1-YW-004); Major State Key Basic Research Development Program of China(2008CB817702); National Natural Science Foundation of China (10635080); National Science Fund for Distinguished Young Scholars(10925526)

1) E-mail: yueke@impcas.ac.cn