

液体探测器中瑞利散射蒙特卡洛模拟方法

M. Yu, et al. "A Monte Carlo method for Rayleigh scattering in liquid detectors." *Review of Scientific Instruments* 93.11 (2022).

武汉大学 孙光豹

武汉大学 周详

中国科学院高能物理研究所 于淼

2023. 08. 10 湖北 · 恩施

第二十一届全国核电子学与核探测技术学术年会



内容大纲



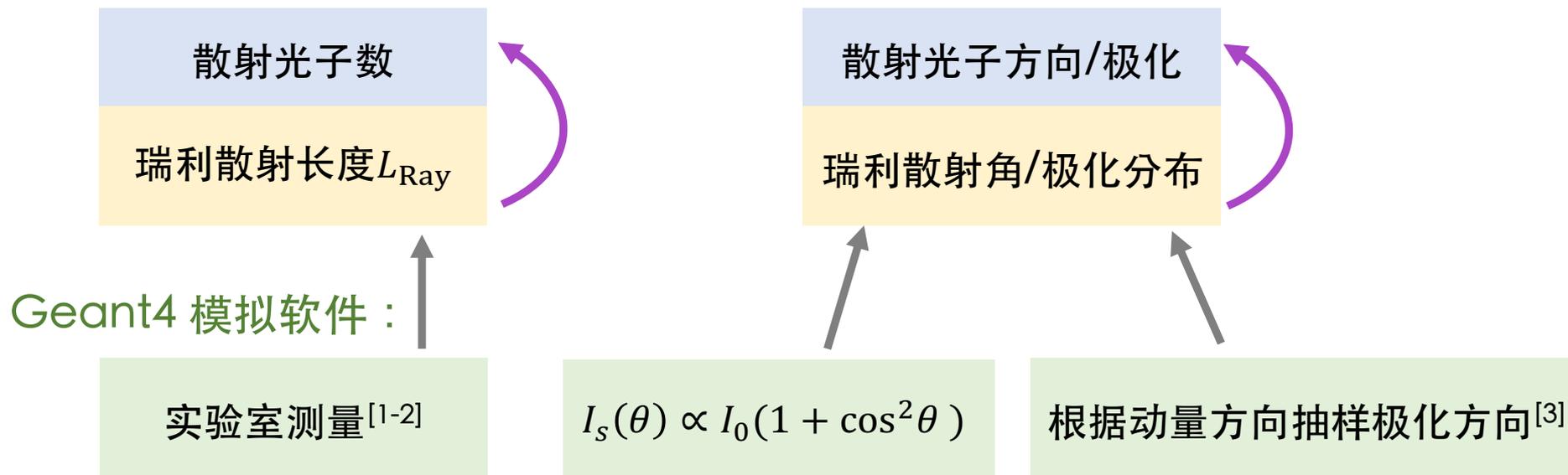
- 研究动机
- 非各向同性液体的瑞利散射
- 蒙特卡洛模拟算法实现
- 实验测量与结果比较
- 结果与讨论



研究动机



瑞利散射是大型液体探测器（例如JUNO等）中的一类重要光学过程，对其的准确描述有利于加深人们对探测器响应的理解。



上述角分布适用于各向同性 (isotropic) 分子，而LAB，水等常用液体探测器材料均为非各向同性分子 (anisotropic)，其角/极化呈现不同分布，但目前并未在Geant4中考虑。

[1] X. Zhou, et al., “Rayleigh scattering of linear alkylbenzene in large liquid scintillator detectors”, Rev. Sci. Instrum. 86 (2015) 7, 073310.

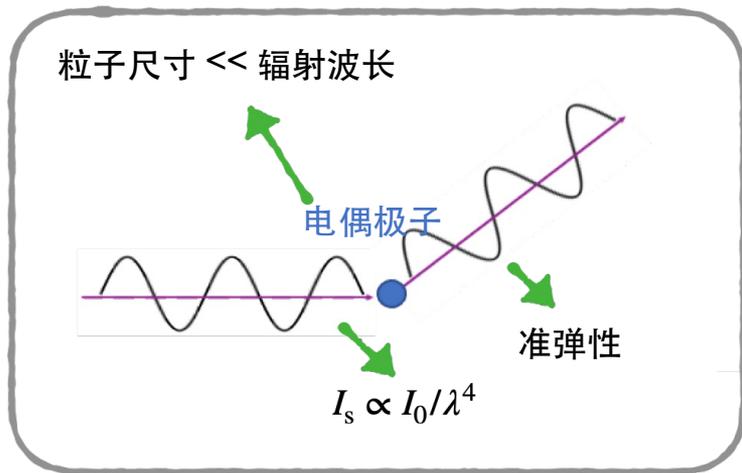
[2] M. Yu, et al., “Measurements of Rayleigh ratios in linear alkylbenzene”, Rev. Sci. Instrum. 93 (2022) 6, 063106.

[3] Depaola, G. O. “New Monte Carlo method for Compton and Rayleigh scattering by polarized gamma rays”, Nucl.Instrum.Meth.A, 512.3 (2003): 619-630.

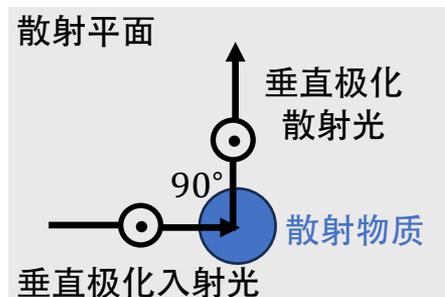
瑞利散射的物理起源



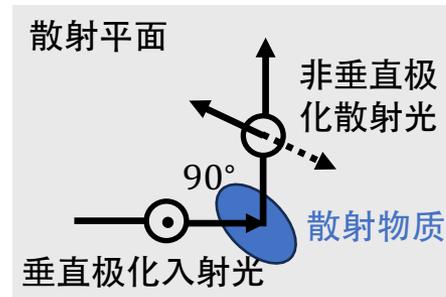
物理起源：分子的极化率 (α)



非各项同性分子的重要特征：**非零去极化率 (ρ)**
 主要起源于**极化率张量的取向涨落**。



各向同性分子

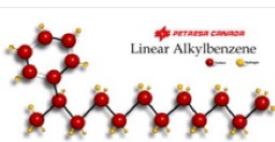


非各向同性分子



定义：90度散射方向水平极化与垂直极化散射光光强比

- 非极化入射光： $\rho_u \equiv H_u / V_u$
- 垂直极化入射光： $\rho_v \equiv H_v / V_v$



分子类型	极化率 (α)	散射长度	角分布	极化分布
各向同性	标量	Einstein-Smoluchowski 公式	$I_s(\theta) \propto I_0(1 + \cos^2\theta)$	线性极化
非各向同性	张量	Cabannes修正 (更短)	$I_s(\theta) \propto I_0(1 + \frac{1 - \rho_v}{1 + 3\rho_v} \cos^2\theta)$	去极化



非各向同性分子的极化率



- 根据散射理论： $f_s \propto \langle [\epsilon_s \cdot \alpha \cdot \epsilon_i]^2 \rangle$, ϵ_i 和 ϵ_s 分别是入射光子和散射光子的极化方向矢量；
- 因此需要先计算分子的极化率张量 α

在主轴上 (考虑分子对称性) :

$$\alpha = \begin{bmatrix} \alpha_{\parallel} & 0 & 0 \\ 0 & \alpha_{\perp} & 0 \\ 0 & 0 & \alpha_{\perp} \end{bmatrix}$$

可测量量

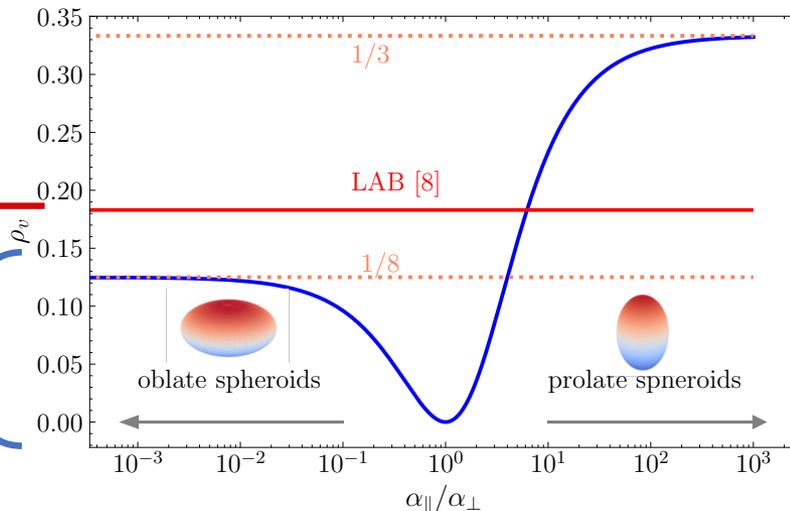
$$\rho_v = \frac{3(\alpha_{\parallel} - \alpha_{\perp})^2}{5(\alpha_{\parallel} + 2\alpha_{\perp})^2 + 4(\alpha_{\parallel} - \alpha_{\perp})^2}$$

非各向同性分子去极化率主要起源于极化率张量的取向涨落。

宏观散射光子的分布仅依赖于去极化率，与具体的分子几何构型无关，因此双解应该给出一致的宏观物理结果。

LAB分子仅存在单解

[0, 1/8]取值区间存在双解

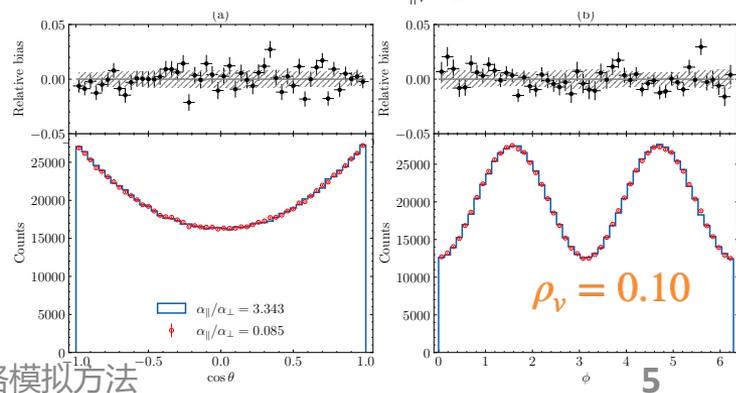


算法只取双解的其中一支： $\alpha_{\parallel} = 1 > \alpha_{\perp}$

因此散射概率可写作：

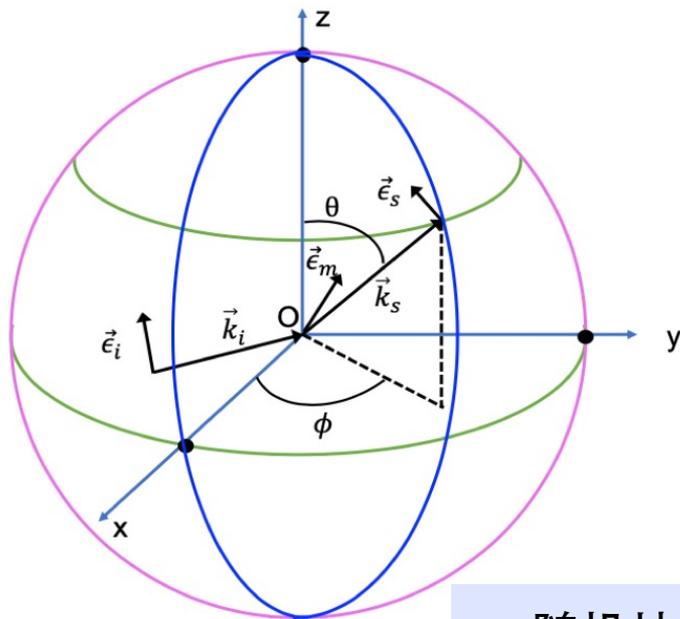
$$P = |\epsilon_s \cdot \alpha' \cdot \epsilon_i|^2 = |\epsilon_s M^T \cdot \alpha \cdot M \epsilon_i|^2$$

$$= \begin{bmatrix} \epsilon_s^{x'} \\ \epsilon_s^{y'} \\ \epsilon_s^{z'} \end{bmatrix}^T \begin{bmatrix} \alpha_{\parallel} & 0 & 0 \\ 0 & \alpha_{\perp} & 0 \\ 0 & 0 & \alpha_{\perp} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \epsilon_i^{x'} \\ \epsilon_i^{y'} \\ \epsilon_i^{z'} \end{bmatrix} \leq 1, \text{ 其中 } M \text{ 是任意旋转矩阵。}$$





蒙特卡洛模拟实现



$$\epsilon_m = \frac{\alpha' \epsilon_i}{|\alpha' \epsilon_i|}$$

输入分子的去极化率 ρ_v
计算主轴极化率张量 α

随机旋转 $\alpha \rightarrow \alpha'$
(取向涨落)

随机抽样散射光子动量方向 $k_s(\theta_s, \phi_s)$ ，计算极化方向 ϵ_s
(在 $k_s O \epsilon_m$ 平面上且 $\perp k_s$)

计算散射概率 $P = |\epsilon_s \cdot \alpha' \cdot \epsilon_i|^2$

比较 P 与 $[0, 1]$ 区间内随机数 P_r

如果 $P < P_r$ ，重复

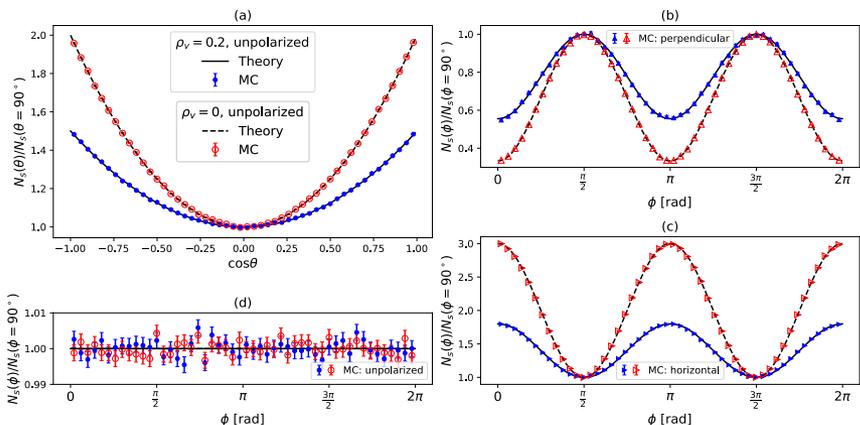
如果 $P > P_r$ ，
接受 k_s 和 ϵ_s

给出当前光子的散射动量与极化方向

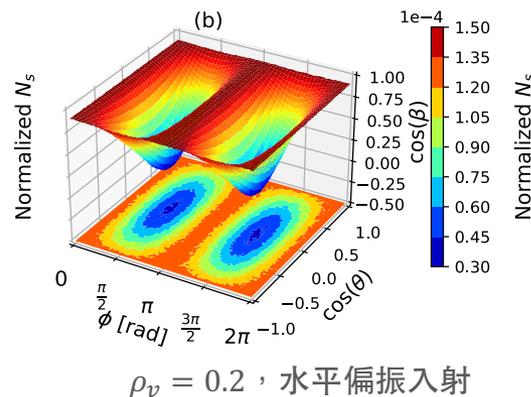
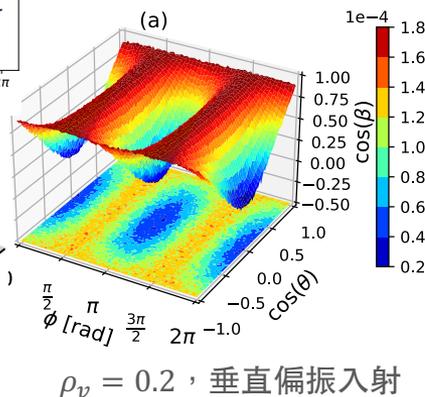
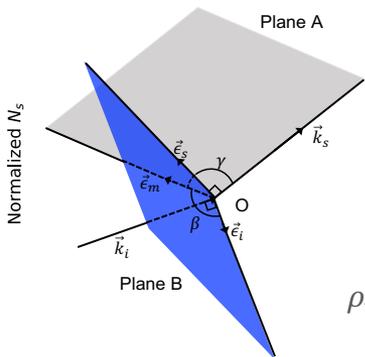
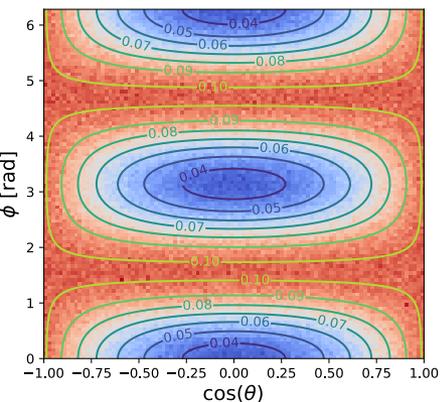
是一个基于单个光子抽样的模拟算法，与Geant4中散射光子的模拟流程一致，易于整合进Geant4框架。

Python与Geant4版本下的代码仓库：
<https://github.com/YMTheory/RayleighMC>

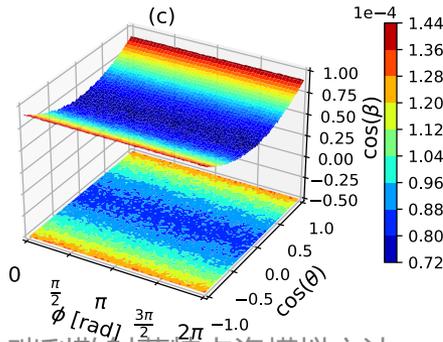
模拟角/极化分布



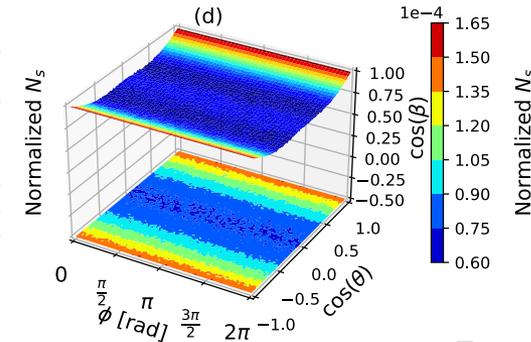
- 模拟给出的一维角分布与宏观计算得到的散射光角分布符合；
- 设置 $\rho_v = 0$ 算法结果给出与各向同性分子一致的结果；
- 随着去极化率增大，散射光强的角度不均匀性降低，影响探测光子的空间分布。



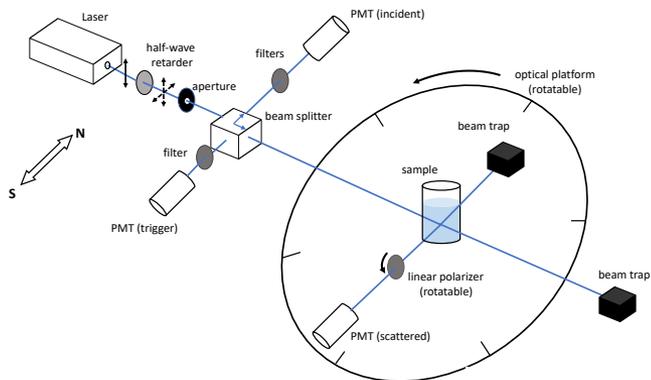
$\rho_v = 0.2$, 自然光入射



$\rho_v = 0$, 自然光入射



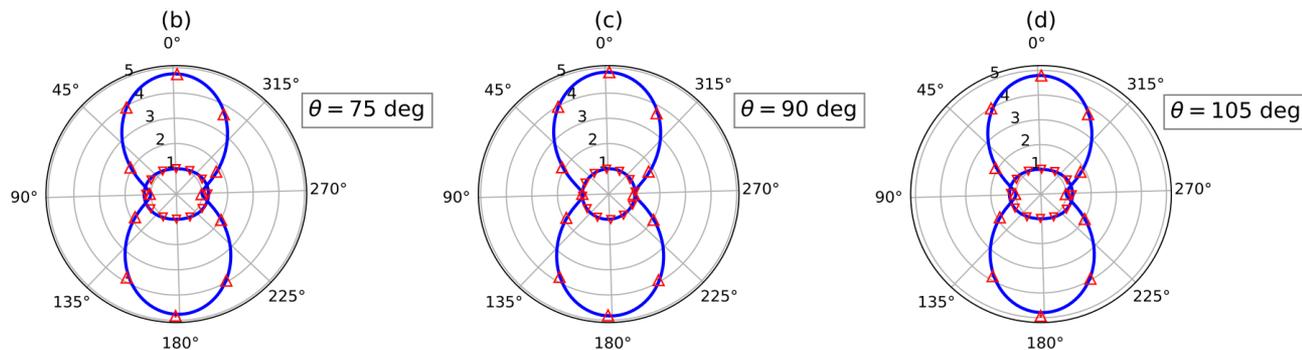
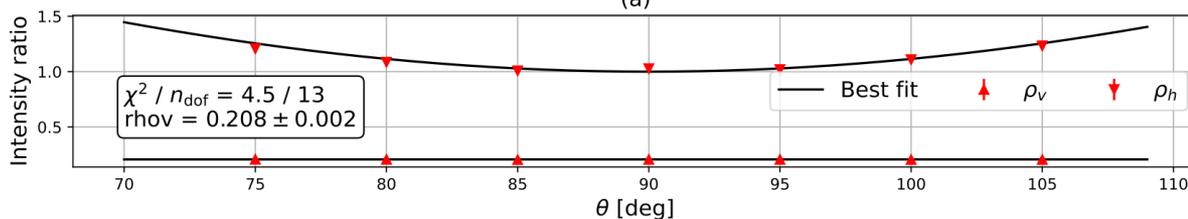
- 散射光子极化方向 ϵ_s 与 ϵ_m 越平行的方向，散射强度越高。



- 测量得到的去极化率为 $\rho_v = 0.208 \pm 0.002$ ，与之前的测量结果在误差范围内一致^[1]；
- 通过结果可以观察到：
 - 实验测量和模拟结果符合；
 - 散射光极化分布关于90度对称，与预期一致。

[1] Q. Liu, et al. "Rayleigh scattering and depolarization ratio in linear alkylbenzene." *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment* 795 (2015): 284-287.

- 使用线偏振激光器+半波片+偏振片可以得到垂直/水平偏振光；
- 在不同的散射角度测量散射光强度，利用偏振片可以测量散射光偏振；
- 90度方向测量散射光极化可以得到当前样品的去极化率 ρ_v 。



△ Exp: vertical ▽ Exp: horizontal — MC



总结与展望



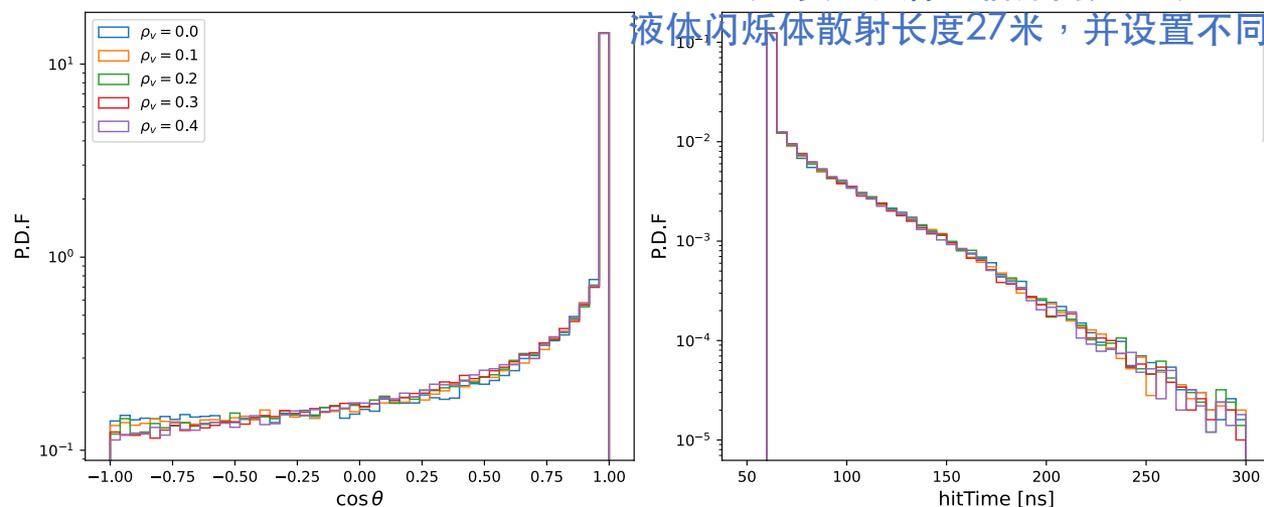
- 在通用模拟软件例如Geant4等中，非各向同性分子的瑞利散射需要更正确的描述，从而更准确理解大型液体探测器响应；
- 提出了一种从散射微观机制出发的瑞利散射模拟算法，可以给出与理论计算和实验测量相一致的瑞利散射光子角分布与极化分布结果；
- 同时设计了多角度散射测量装置，可以测量和验证不同角度的散射结果；

基于Geant4模拟的简单验证

球形液体闪烁体探测器（溶剂LAB），半径17.7m；

430nm光学光子沿+z轴方向产生；

液体闪烁体散射长度27米，并设置不同的去极化率。



- 对大型液体探测器中收集光子的空间分布/时间分布有一定影响；
- 计划移植到例如JUNO等实验中研究其对重建等影响；
- 计划作为一个可选算法整合进Geant4官方软件中。

附录



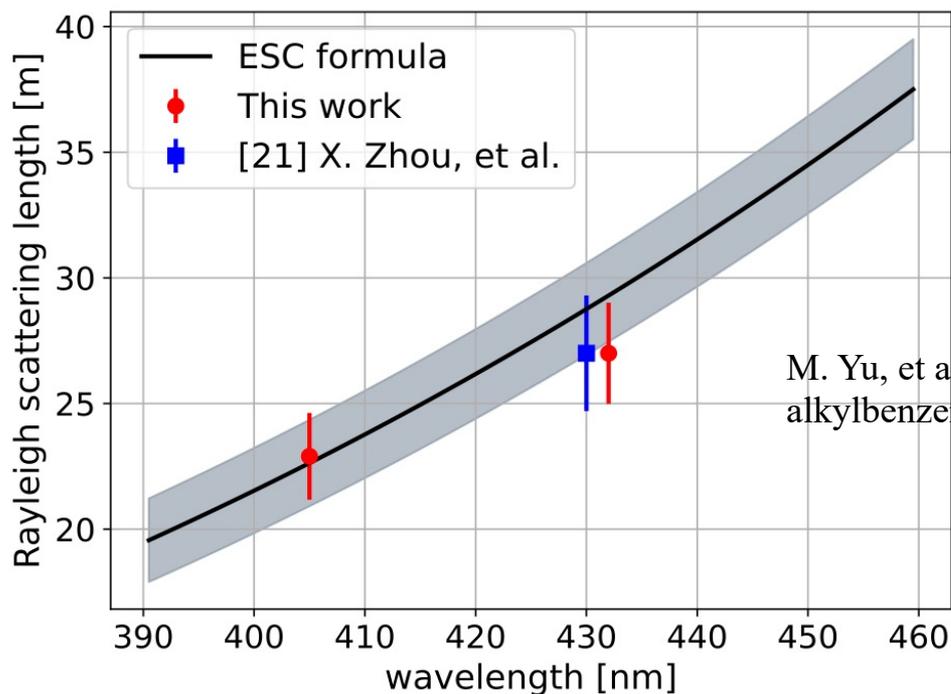
Cabannes修正



Cabannes修正

$$L_{\text{Ray}} = \left\{ \frac{8\pi^3}{3\lambda^4} \left[\frac{(n^2 - 1)(2n^2 + 0.8n)}{n^2 + 0.8n + 1} \right]^2 kT\kappa_T \frac{6 + 3\rho_u}{6 - 7\rho_u} \right\}^{-1}$$

n: 折射率;
k: 玻尔兹曼常数;
T: 温度
 κ_T : 等温压缩率



M. Yu, et al., “Measurements of Rayleigh ratios in linear alkylbenzene”, Rev. Sci. Instrum. 93 (2022) 6, 063106.