

MODÉLISATION MONTE CARLO D'UN DÉTECTEUR SCINTRONIQUE À HAUTE RÉSOLUTION SPATIO-TEMPORELLE COUPLÉ À UN TUBE MULTIPLICATEUR À GALETTE DE MICRO-CANAUX

Soutenance de thèse de Laurie Cappellugola
Aix-Marseille Univ, CNRS/IN2P3, CPPM, Marseille, France
7 juillet 2023

Sommaire

I. Contexte et introduction :

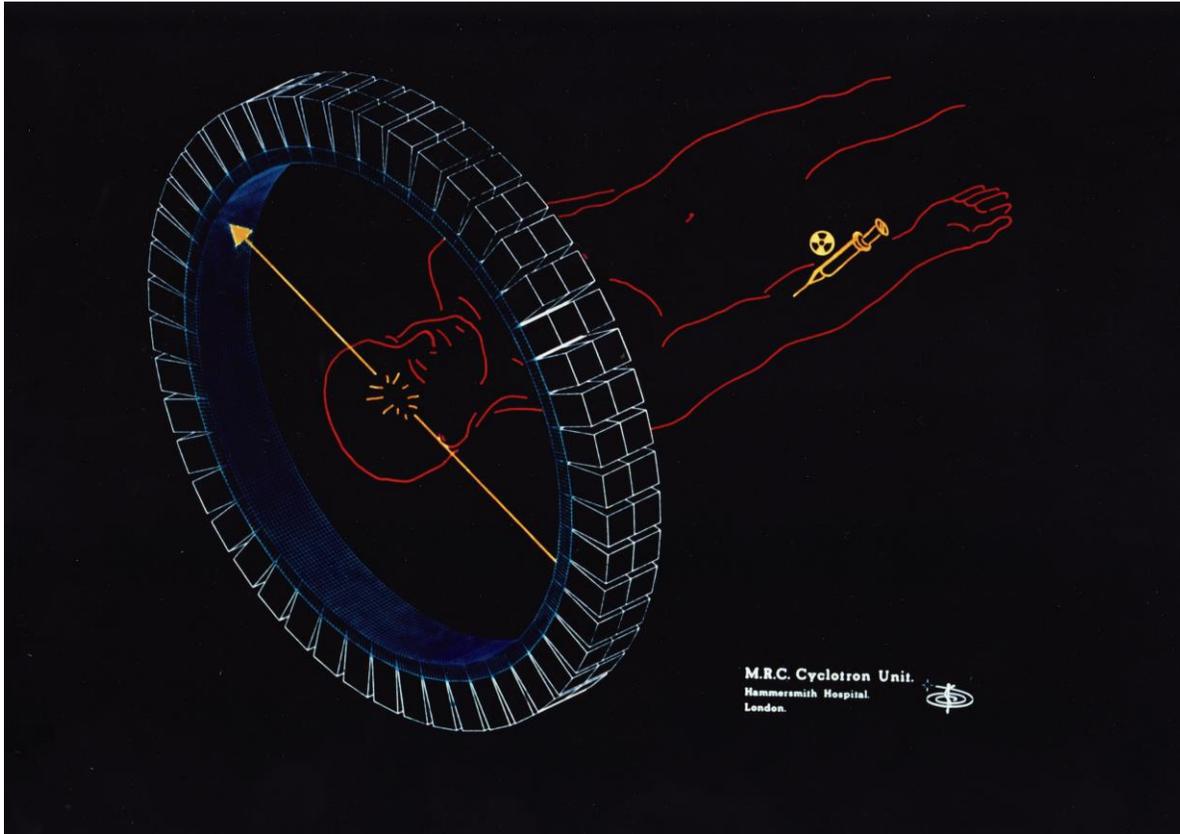
- La tomographie par émission de positrons
- Le projet ClearMind
- Protection de la photocathode par une couche mince

II. Calcul de la transmittance à travers une couche mince

III. Mesure de la transmittance et de l'efficacité quantique

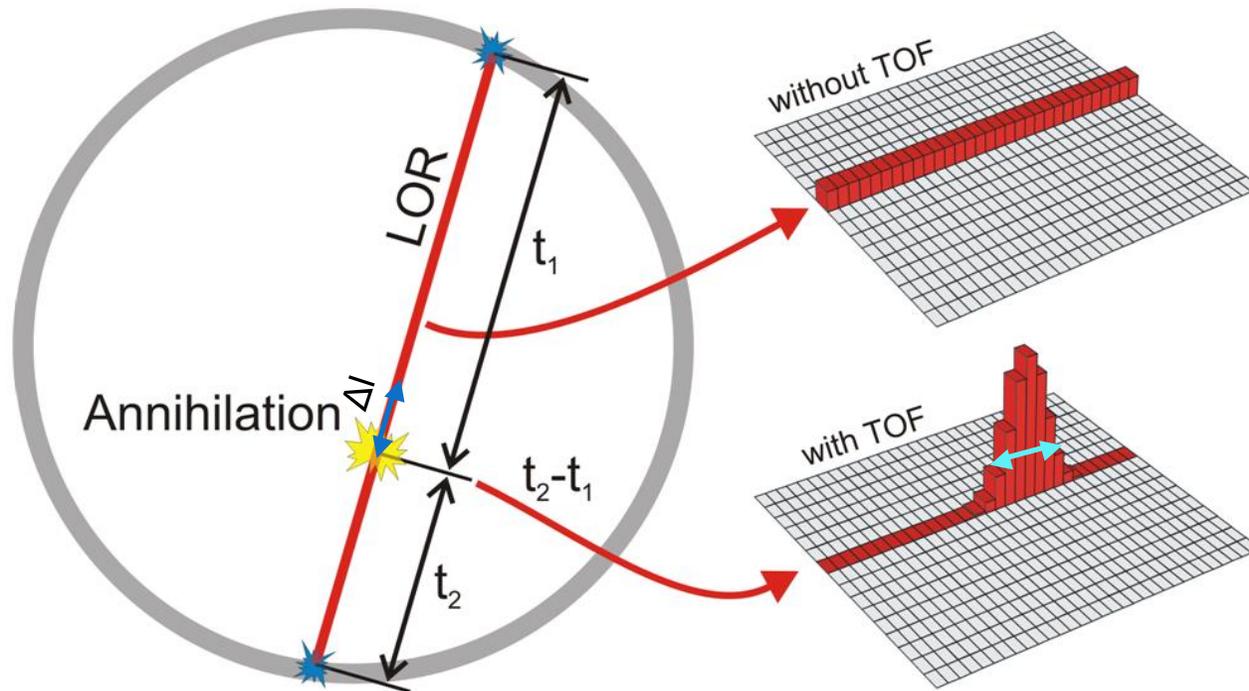
IV. Modélisation complète du module de détection ClearMind

Tomographie par Émission de Positron (TEP)



- Imagerie **fonctionnelle** utilisée en médecine **nucléaire**
- Permet le diagnostic du cancer grâce à la détection en **coïncidence** de gamma d'annihilation de **511 keV** issus de la désintégration d'un radiotracer injecté au patient
- Couplé avec un scanner pour obtenir une imagerie fonctionnelle et anatomique

TEP à temps de vol

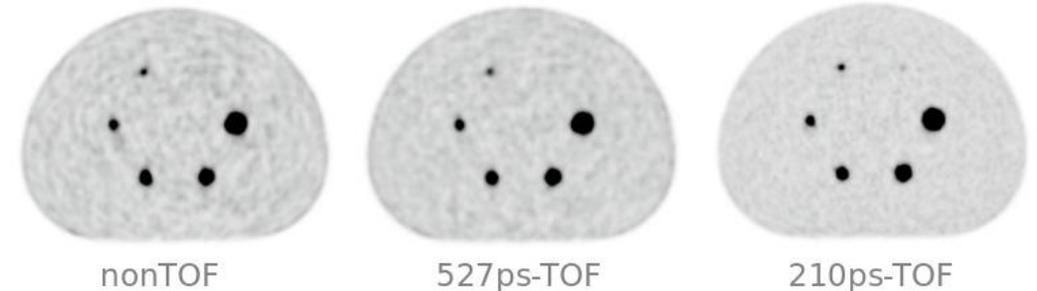


- Estimer la position d'annihilation en prenant en compte les temps d'arrivé des deux photons d'annihilation

$$\Delta t = (t_2 - t_1) \pm CTR$$

$$\Delta l = c \frac{\Delta t}{2} \pm c \frac{CTR}{2}$$

CTR : résolution en temps de la coïncidence

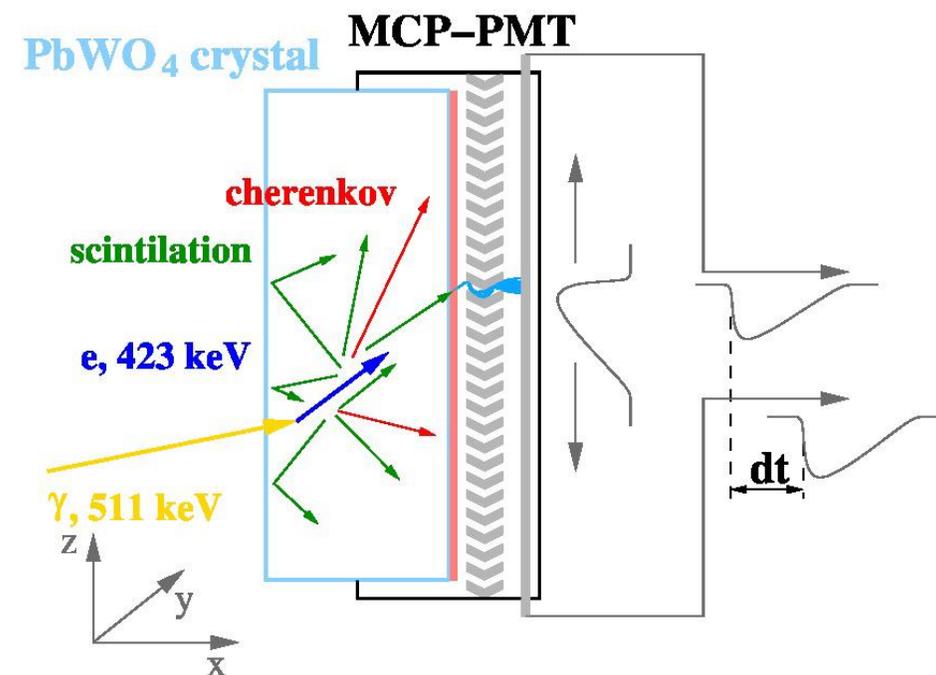


[M. Conti and B. Bendriem, 2019]

Le projet ClearMind



- Développer un nouveau détecteur en vue d'atteindre une CTR inférieure à 100 ps FWHM
 - Cristal scintillant et radiateur Tcherenkov de PbWO_4
 - Augmenter la collection lumineuse → cristal *scintronique*
 - Détection rapide → MCP-PMT



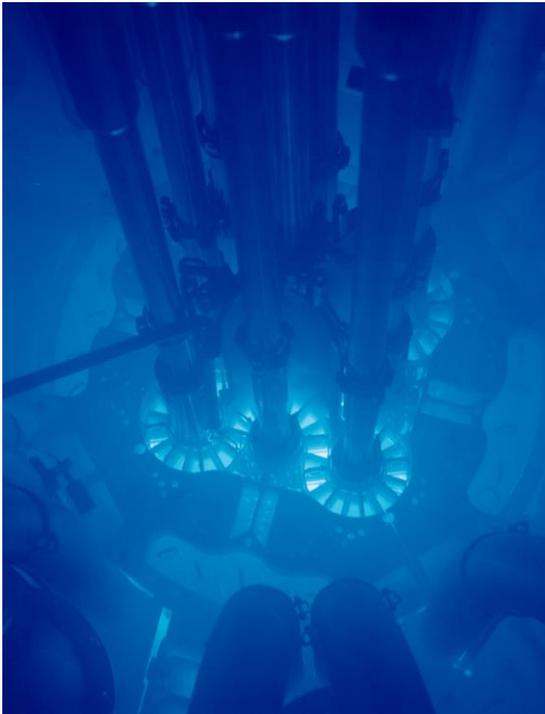
Un cristal scintillant et radiateur Tcherenkov : le PWO

- Rendement de scintillation d'environ 180 photons à 511 keV
- Transparent à partir de 350 nm

Scintillateurs	ρ (g/cm ³)	Z_{eff}	μ_{PE} (cm ⁻¹)	LY (ph/MeV)	τ (ns)	λ_{max} (nm)	n_{max}
NaI(Tl)	3.67	50	0.058	41000	230	415	1.85
CsF	4.64	53.2	0.086	2000	2.9	390	1.49
BaF ₂	4.88	52.7	0.085	11800	0.8, 630	220 - 310	1.53 - 1.5
BGO	7.13	73	0.336	9000	300, 60	480	2.15
LaBr ₃ :Ce	5.3	46	0.045	60000	15	360	1.9
LSO:Ce	7.4	66	0.28	27000	40	420	1.827
PWO	8.28	75.6	0.485	330	2, 6, 30	420	2.33

Un cristal scintillant et radiateur Tcherenkov : le PWO

■ Radiateur Tcherenkov



[Advanced Test Reactor, Idaho, Etats-Unis]

- Se produit lorsqu'une particule chargée se déplace plus rapidement que la lumière dans ce milieu
- Émis pratiquement instantanément
- Distribution en $\frac{1}{\lambda^2}$ dans l'UV-visible
- Seuil en énergie de 58.8 keV à 500 nm dans le PWO

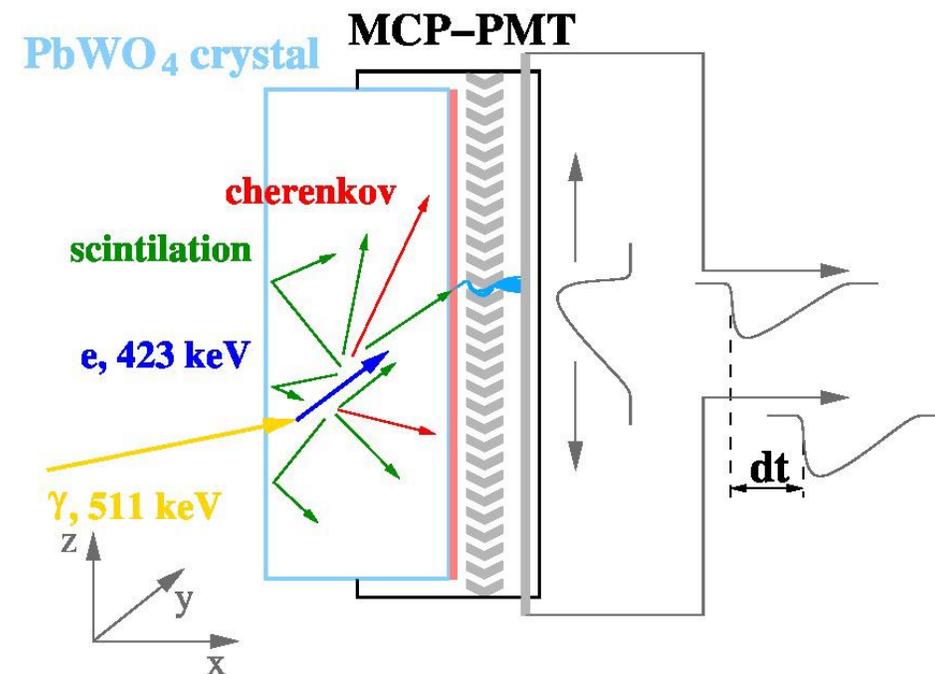
$$E = mc^2 \left(\frac{1}{\sqrt{1 - \frac{1}{n^2}}} - 1 \right)$$

- Environ 20 photons à 511 keV dans le PWO

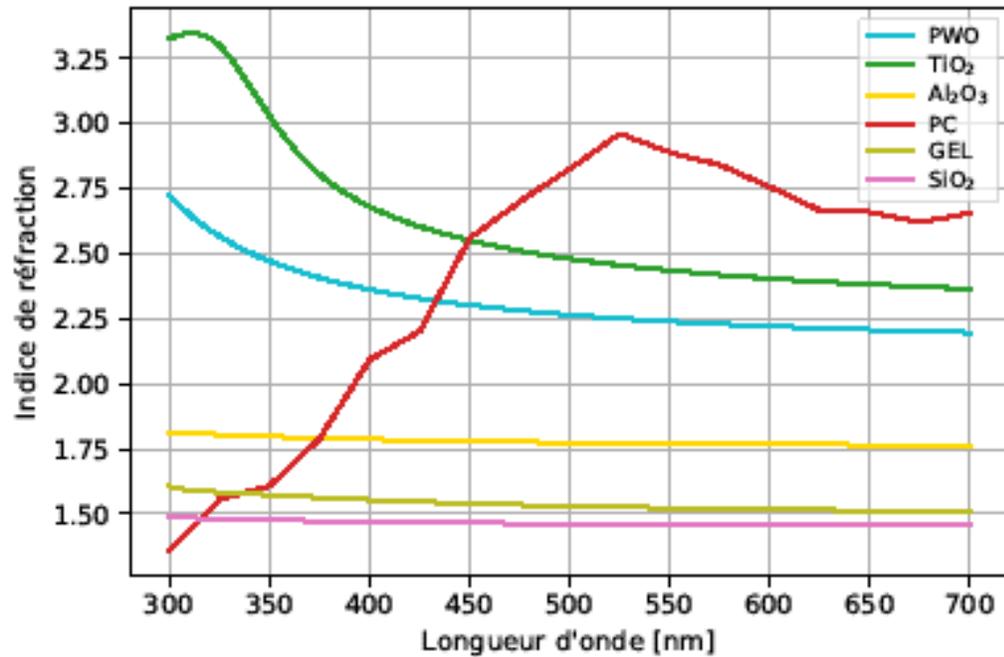
Le projet ClearMind



- Développer un nouveau détecteur en vue d'atteindre une CTR inférieure à 100 ps FWHM
 - Cristal scintillant et radiateur Tcherenkov de PbWO_4
 - Augmenter la collection lumineuse → cristal *scintronique*
 - Détection rapide → MCP-PMT

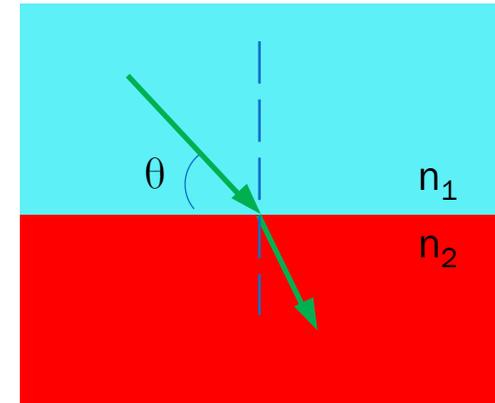


Intérêt du cristal scintronique



Cristal
Cristal
Gel optique
Photocathode
Photocathode

$$\theta_L = \arcsin\left(\frac{n_2}{n_1}\right) = 42^\circ$$

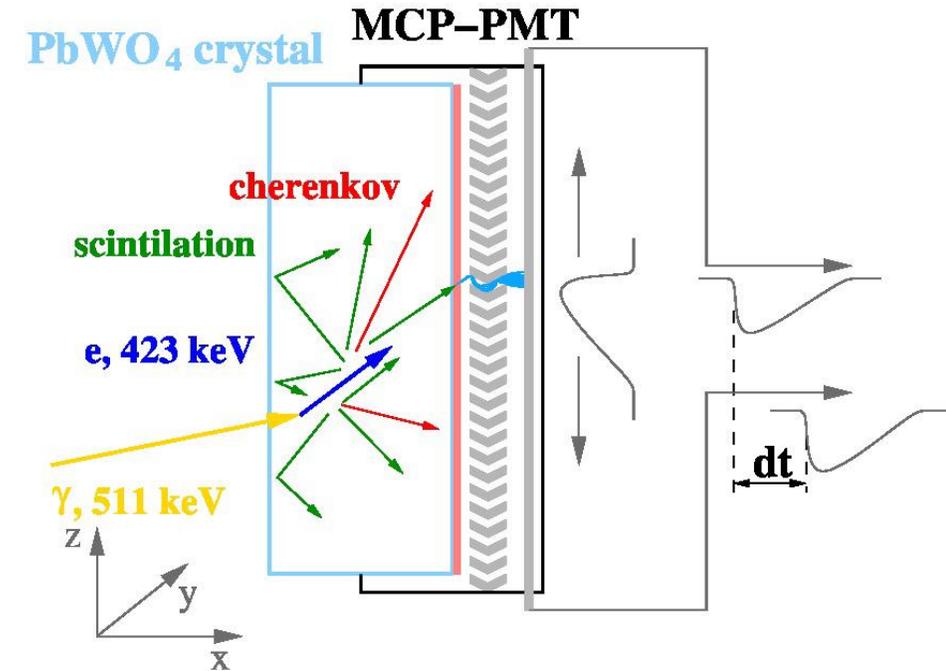


Phénomène de **réflexion totale**

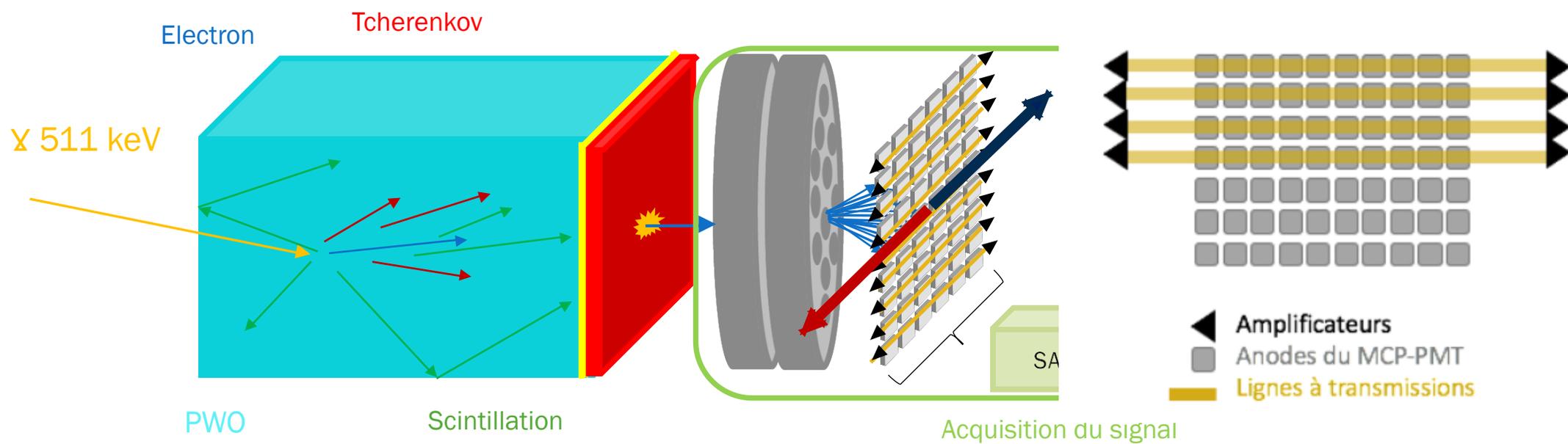
Le projet ClearMind



- 🎯 Développer un nouveau détecteur en vue d'atteindre une CTR inférieure à 100 ps FWHM
 - Cristal scintillant et radiateur Tcherenkov de PbWO_4
 - Augmenter la collection lumineuse → cristal *scintronique*
 - Détection rapide → MCP-PMT

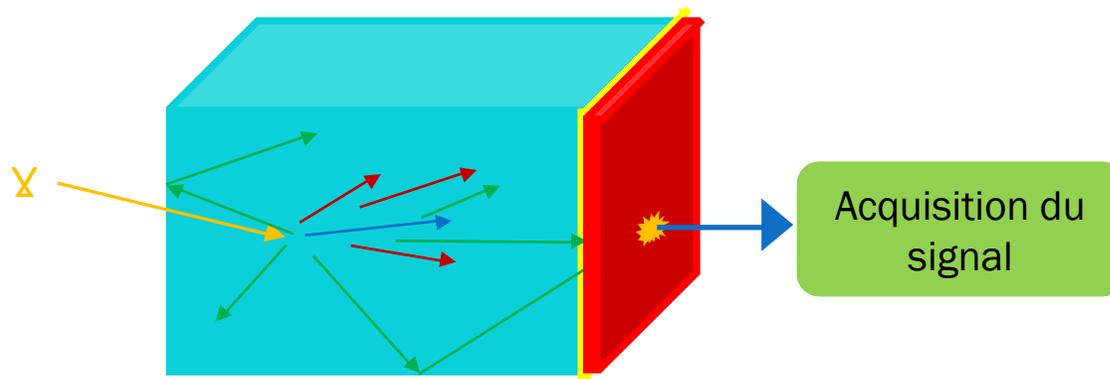


Module de détection ClearMind



Passivation du cristal

➤ Nécessaire pour protéger la photocathode de l'oxydation

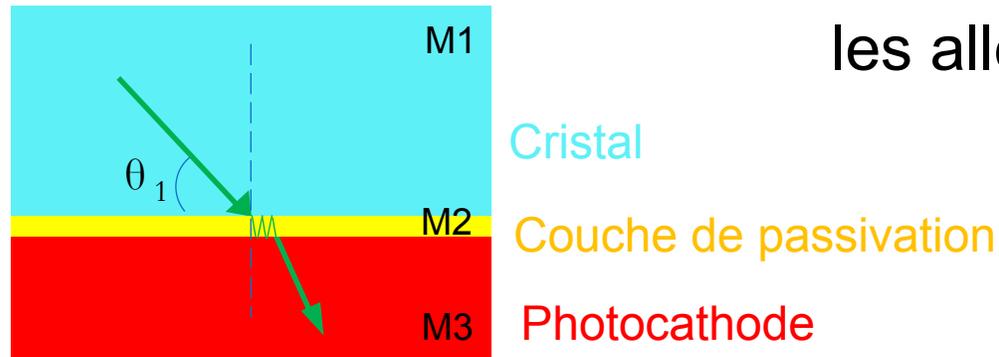


➤ Epaisseur inférieure à la longueur d'onde des photons
→ **couche mince**

- Phénomène d'interférence
- Phénomène de transmission frustrée

Passivation du cristal

Phénomène d'interférence



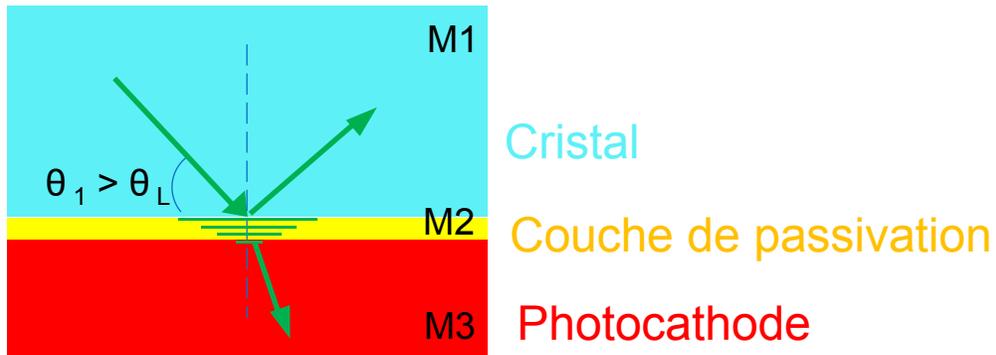
- Dû aux déphasages multiples engendrés par les allers retours dans la couche mince

- Coefficients de transmission et de réflexion différents que pour une interface simple

$$r = \frac{r_{12} + r_{23}e^{i2\beta}}{1 + r_{23}r_{12}e^{i2\beta}} \quad t = \frac{t_{12}t_{23}e^{i\beta}}{1 + r_{12}r_{23}e^{2i\beta}} e^{-ik_3d\cos\theta_3} \quad \text{avec } \beta = k_2d\cos\theta_2$$

Passivation du cristal

Phénomène de transmission frustrée



$$\delta = \frac{1}{k_0 \gamma} = \frac{\lambda_0}{2\pi \sqrt{n_1^2 \sin^2 \theta_1 - n_2^2}} = 215 \text{ nm}$$

pour $\theta_1 = 60^\circ$
et une couche mince d' Al_2O_3

- Dû à la conservation du champ électromagnétique de part et d'autre de l'interface, une **onde évanescente** est créée dans la couche de passivation
- L'onde évanescente ne se propage uniquement le long de l'interface
- **Transmission frustrée** si :
 - la couche de passivation est suffisamment fine devant la **profondeur de pénétration δ**
 - et $n_2 < n_3$

Simulation des phénomènes ondulatoires

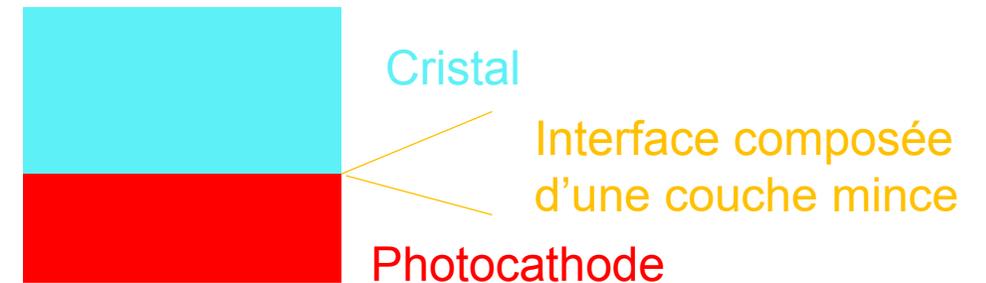


- Phénomènes ondulatoires impossibles à simuler avec une approche corpusculaire
- Sur **Geant4** : nécessiter de modéliser le transport optique en conférant une probabilité de transmission et de réflexion à l'interface composée de la couche mince
- ✓ Nouvelle méthode appelée **CoatedDielectricDielectric()** dans `G4OpBoundaryProcess`
 - Simuler le transport optique à travers une couche mince à partir des caractéristiques des matériaux

Implémentation d'une nouvelle méthode Geant4



- ✓ Nouveau *Type* appelé **coated** → COATEDTHICKNESS et COATEDRINDEX

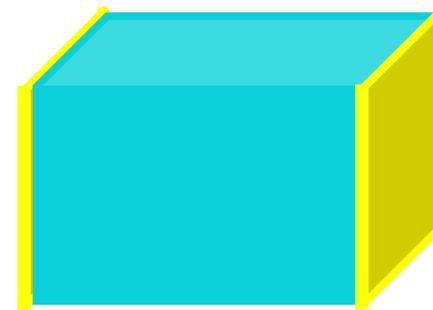
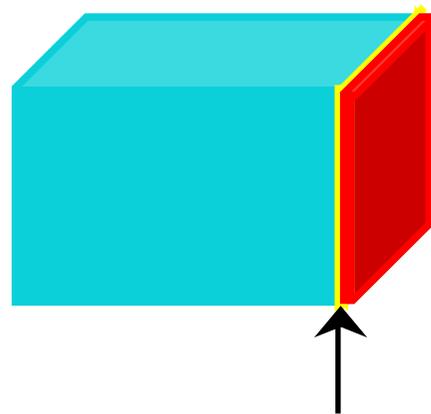


- ✓ Nouveaux **Status** qui défissent l'interaction du photon avec l'interface

	Réflexion	Transmission
$\theta < \theta_L$	CoatedDielectricReflection	CoatedDielectricTransmission
$\theta > \theta_L$	TotalInternalReflection	CoatedDielectricFrustratedTransmission

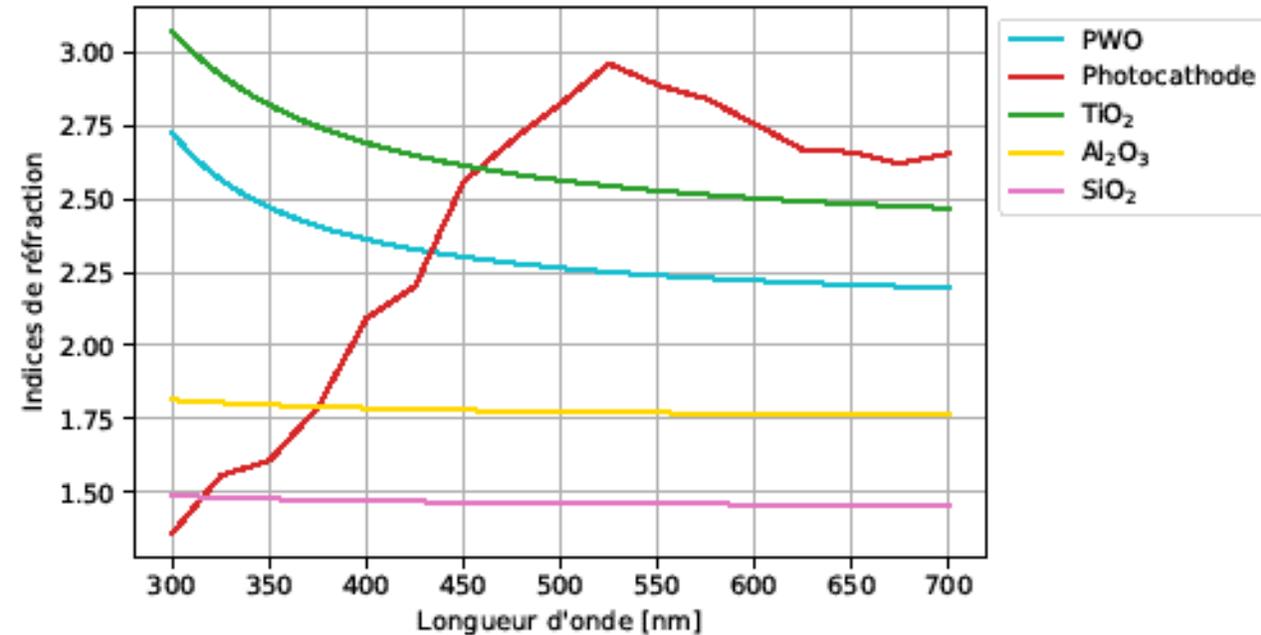
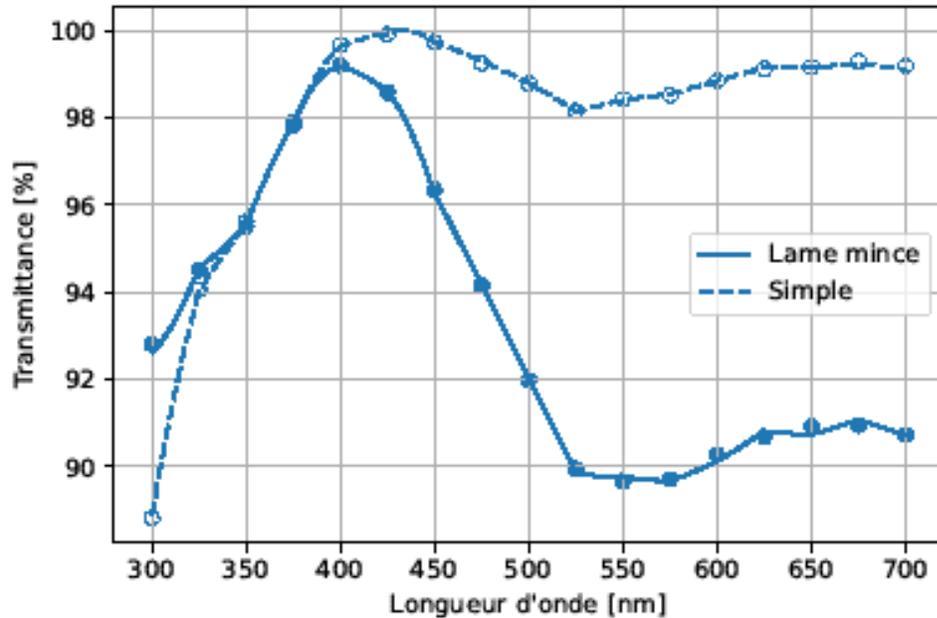
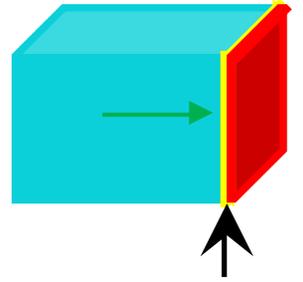
Sommaire

- I. Contexte et introduction
- II. Calcul de la transmittance à travers une couche mince**
- III. Mesure de la transmittance et de l'efficacité quantique
- IV. Modélisation complète du module de détection ClearMind



Transmittance en fonction de la longueur d'onde

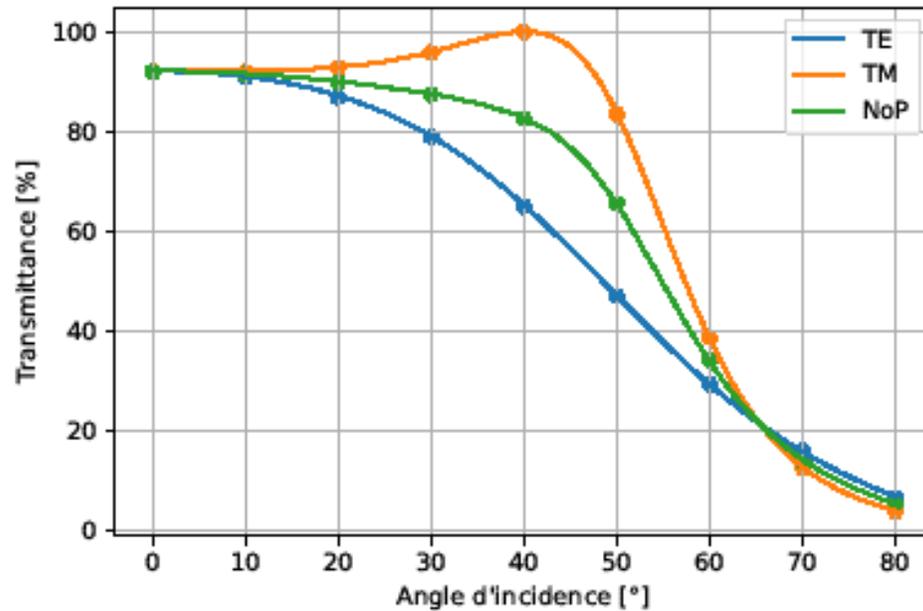
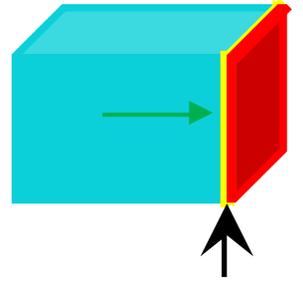
($\theta = 0^\circ$, $d = 100$ nm)



- Gouvernée par l'indice de réfraction des matériaux
- Correspondance entre la transmittance analytique et la transmittance simulée

Transmittance en fonction de l'angle d'incidence

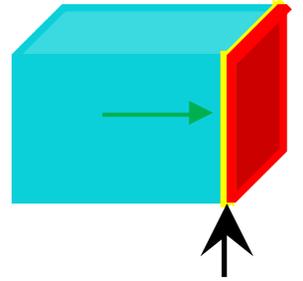
($\lambda = 500 \text{ nm}$, $d = 100 \text{ nm}$)



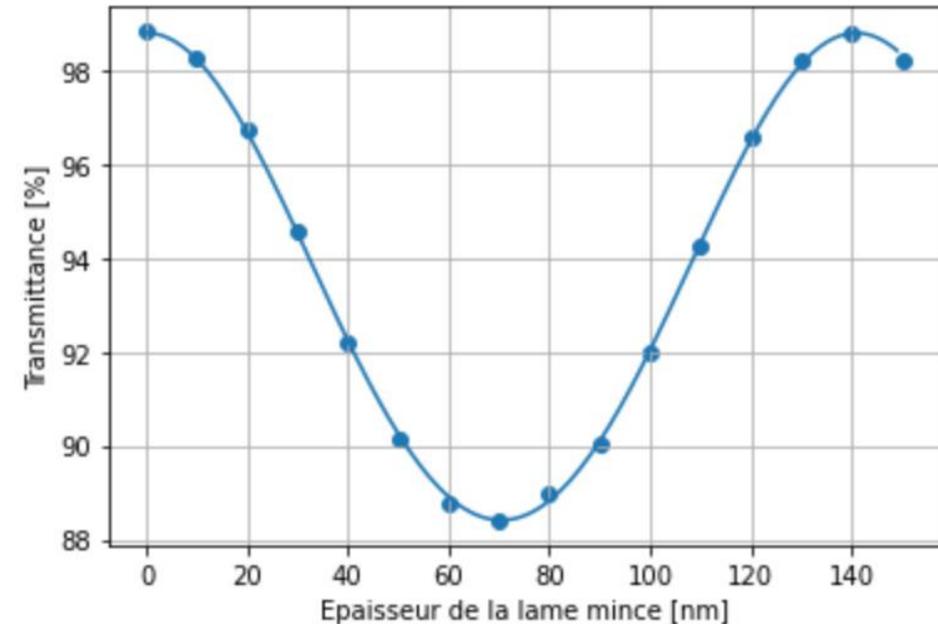
$$\theta_L(500 \text{ nm}) = 51.6^\circ$$

- Transmittance bornée par la transmittance des polarisations *Transverse Electric* (TE) et *Transverse Magnetic* (TM)
- Transmittance non nulle grâce à la transmission frustrée
- Correspondance entre la transmittance analytique et la transmittance simulée

Transmittance en fonction de l'épaisseur de la couche mince ($\lambda = 500 \text{ nm}$, $\theta = 0^\circ$)

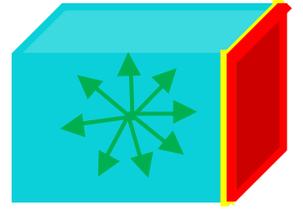


- Forme sinusoïdale → lame d'onde
- Extremum à 70 nm pour une longueur d'onde de 500 nm

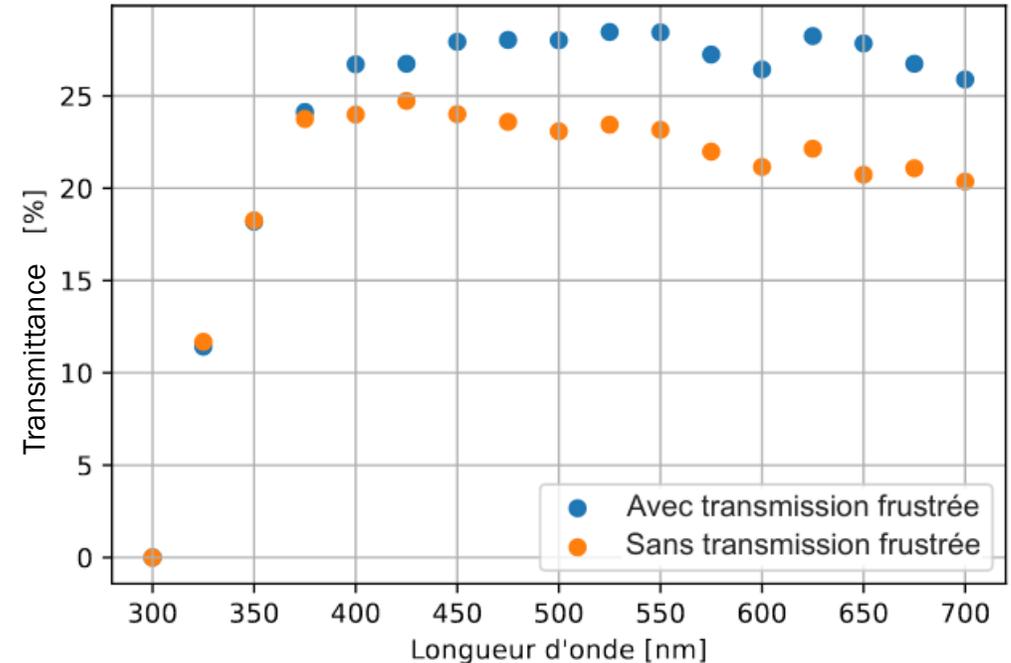


- Correspondance entre la transmittance analytique et la transmittance simulée

Importance de la transmission frustrée



- Comparaison :
 - Simulation avec transmission frustrée
 - Simulation sans transmission frustrée
- Augmentation de la transmittance de 5 % grâce à la transmission frustrée

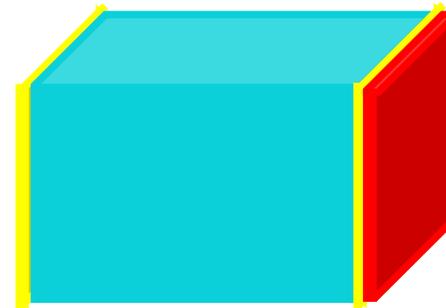


Résumé des comparaisons entre les données analytiques et simulées

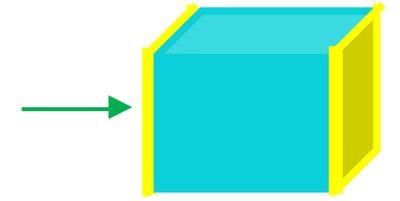
- ✓ Implémentation correcte de la méthode `CoatedDielectricDielectric()` dans Geant4
- ✓ Compréhension de l'impact de la couche mince sur la transmittance dû aux phénomènes d'interférences et de transmission frustrée
- Meilleure appréhension des conséquences de la couche mince au sein du module de détection ClearMind

Sommaire

- I. Contexte et introduction
- II. Calcul de la transmittance à travers une couche mince
- III. Mesure de la transmittance et de l'efficacité quantique**
- IV. Modélisation complète du module de détection ClearMind

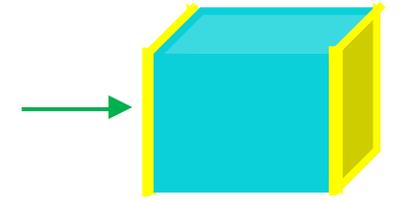


Mesure de la transmittance à travers des cristaux passivés

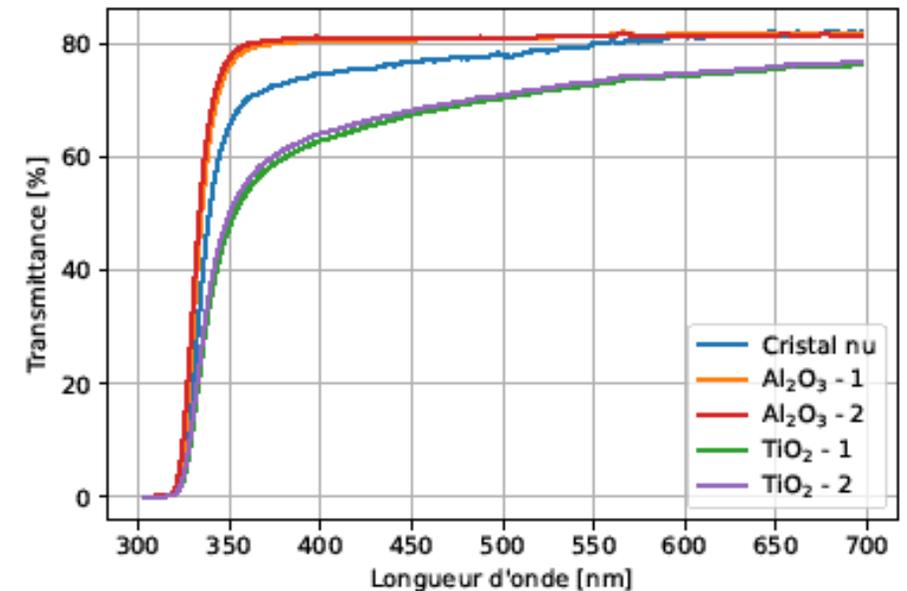


- 🎯 Déduire les caractéristiques du cristal : indice de réfraction et longueur d'absorption
- Mesure de l'intensité lumineuse pour une incidence normale en sortie de cristaux de PWO :
 - Un nu
 - Deux cristaux passivés par des couches minces d' Al_2O_3
 - Deux cristaux passivés par des couches minces de TiO_2

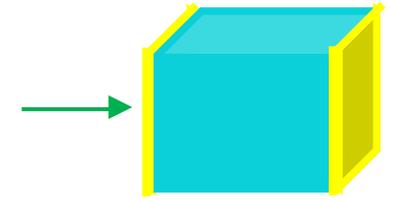
Mesure de la transmittance à travers des cristaux passivés



- Mesure de la transmittance des cristaux en fonction de la longueur d'onde et pour une incidence normale
- Absorption importante du cristal aux faibles longueurs d'onde
- Meilleure transmittance obtenue avec une couche mince d' Al_2O_3



Ajustement de la transmittance au-delà de 400 nm



- Ajustement de la transmittance à partir de l'équation de Sellmeier au-delà de 400 nm

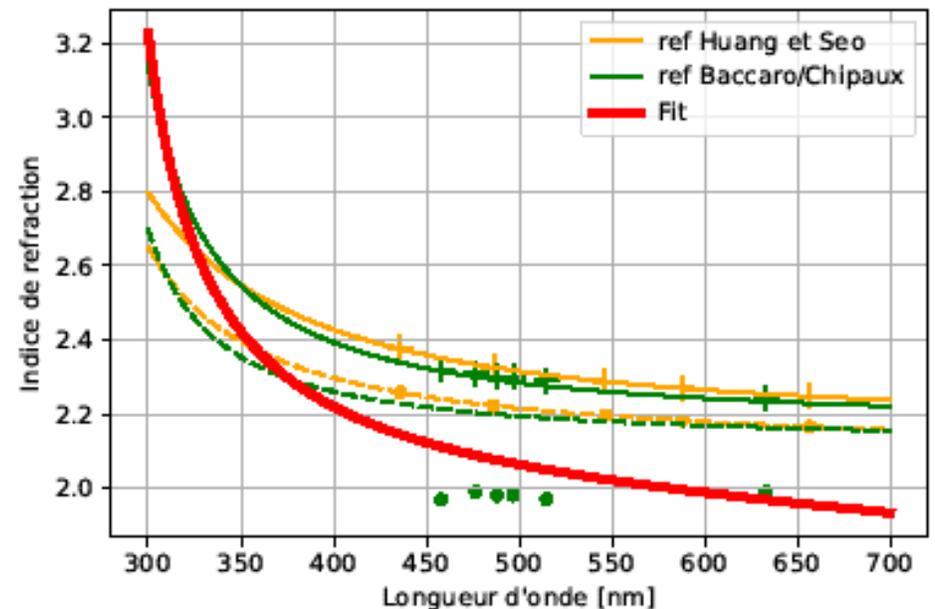
$$n^2 = A + \frac{B}{\lambda^2 - C} - D\lambda^2$$

[Huang et Seo, 2007]

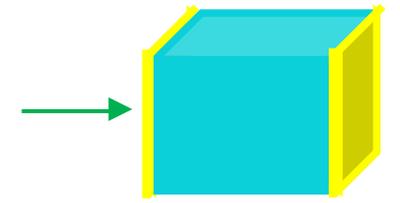
$$T_{tot}(n) = \frac{T_{CM}(n)2}{1 - R_{CM}^2}$$

- Libres
 - A, B, C, D du PWO identiques pour tous les cristaux
 - Epaisseur des couches minces
- Fixés
 - Epaisseur du cristal de 5 mm
 - Indice de réfraction des couches minces

- Ajustement de l'indice de réfraction ne correspond pas parfaitement avec ceux trouvés dans la littérature

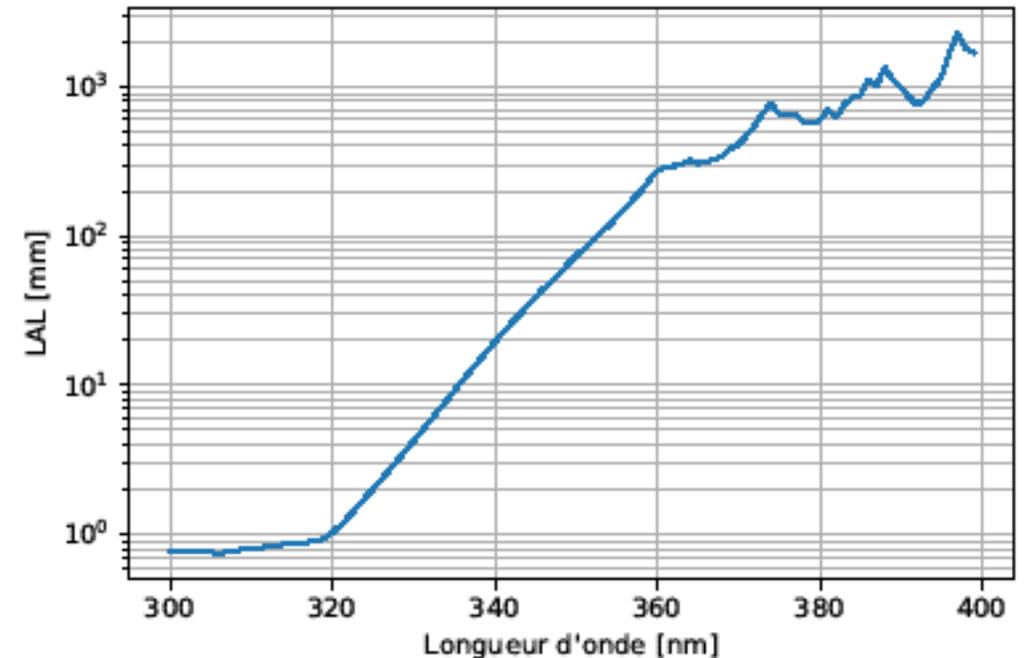
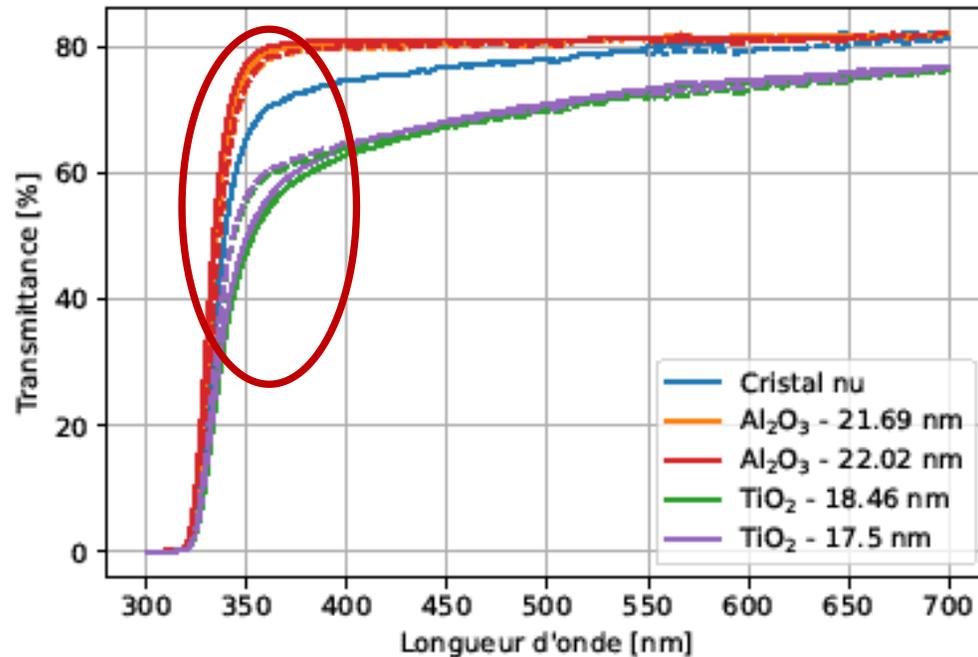


Prise en compte de la longueur d'atténuation en dessous de 400 nm



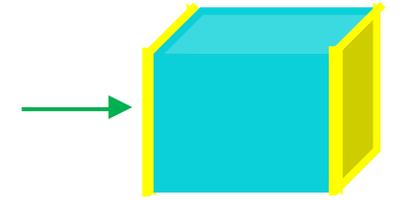
$$LAL = \frac{l}{\ln\left(\frac{T_s}{T}\right)}$$

- Prise en compte de la longueur d'atténuation du PWO sur le cristal nu



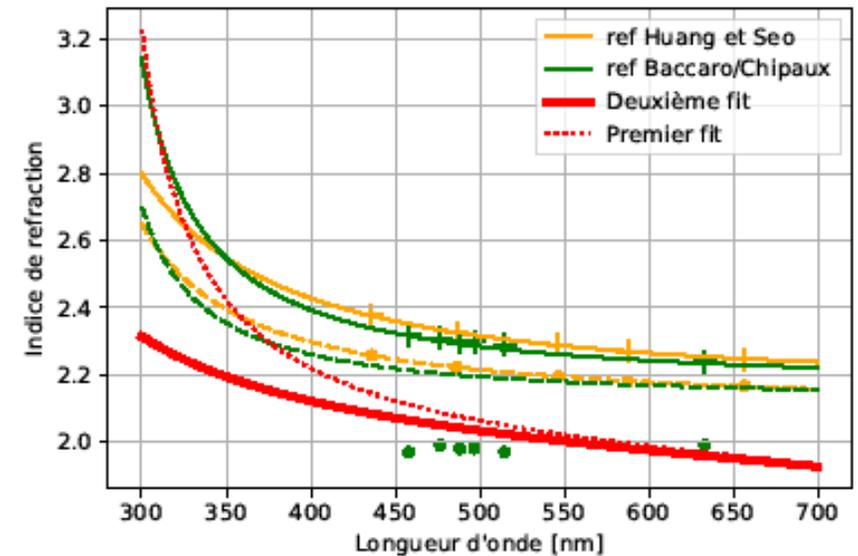
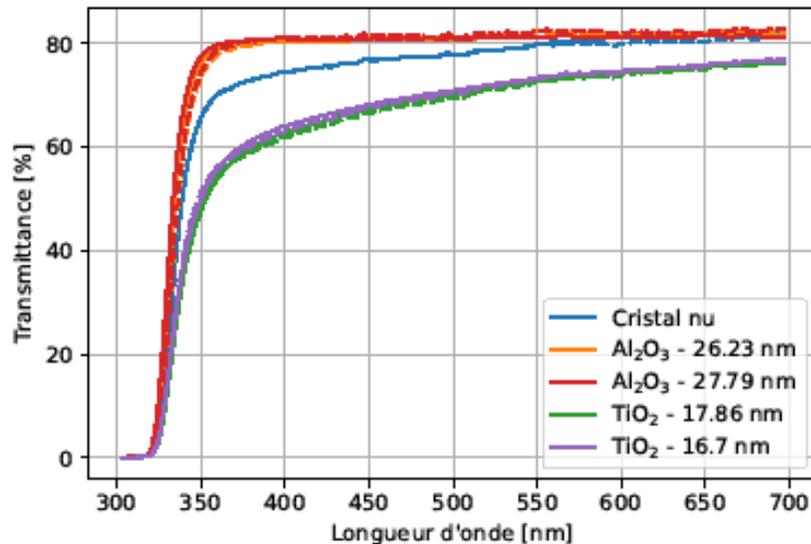
- Ne s'ajustent pas parfaitement aux faibles longueurs d'onde → Nécessité d'un deuxième ajustement

Ajustement pour toutes les longueurs d'onde



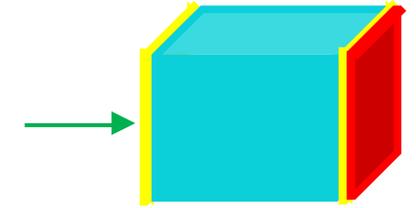
- Deuxième ajustement en faisant varier le coefficient de Sellmeier C (A, B, D fixés)

$$n^2 = A + \frac{B}{\lambda^2 - C} - D\lambda^2$$



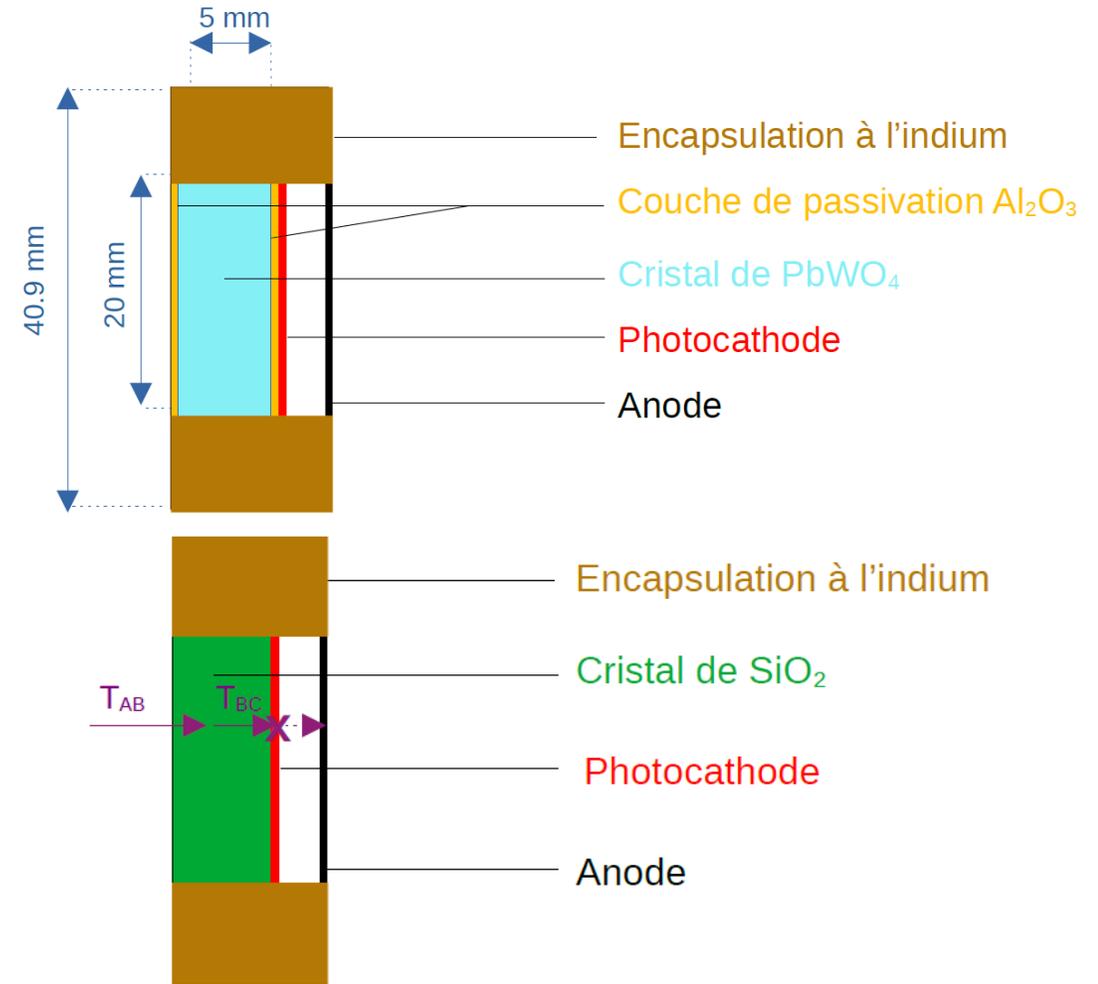
- S'ajustent aux faibles longueurs d'onde
 - Ajustement de l'indice de réfraction semblable à ceux trouvés dans la littérature
- Variation de l'indice de réfraction pour une

Mesure de l'efficacité de détection (PDE) de cellules test



$$PDE = \overbrace{T}^A \times \underbrace{P_{att} \times P_{ext}}_{QE}$$

- T : Transmittance
- P_{att} : Probabilité d'atténuation
- A : Absorbance
- P_{ext} : Probabilité d'extraction
- QE : Efficacité quantique intrinsèque

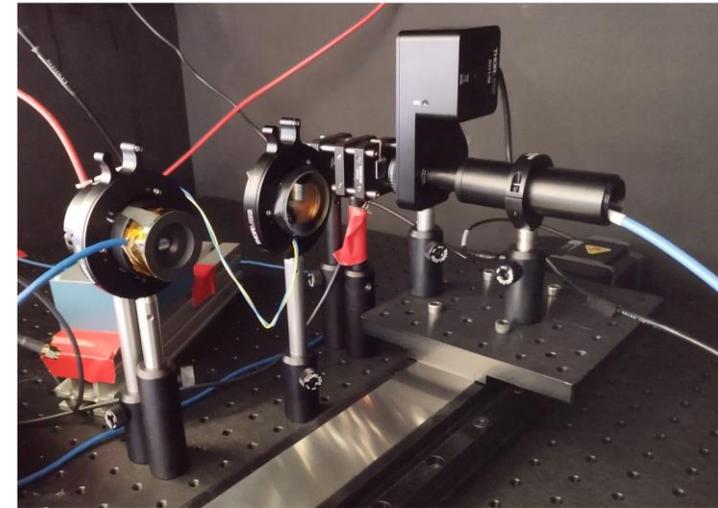
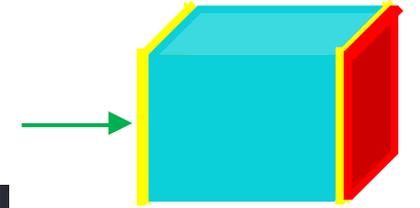


Démarche expérimentale

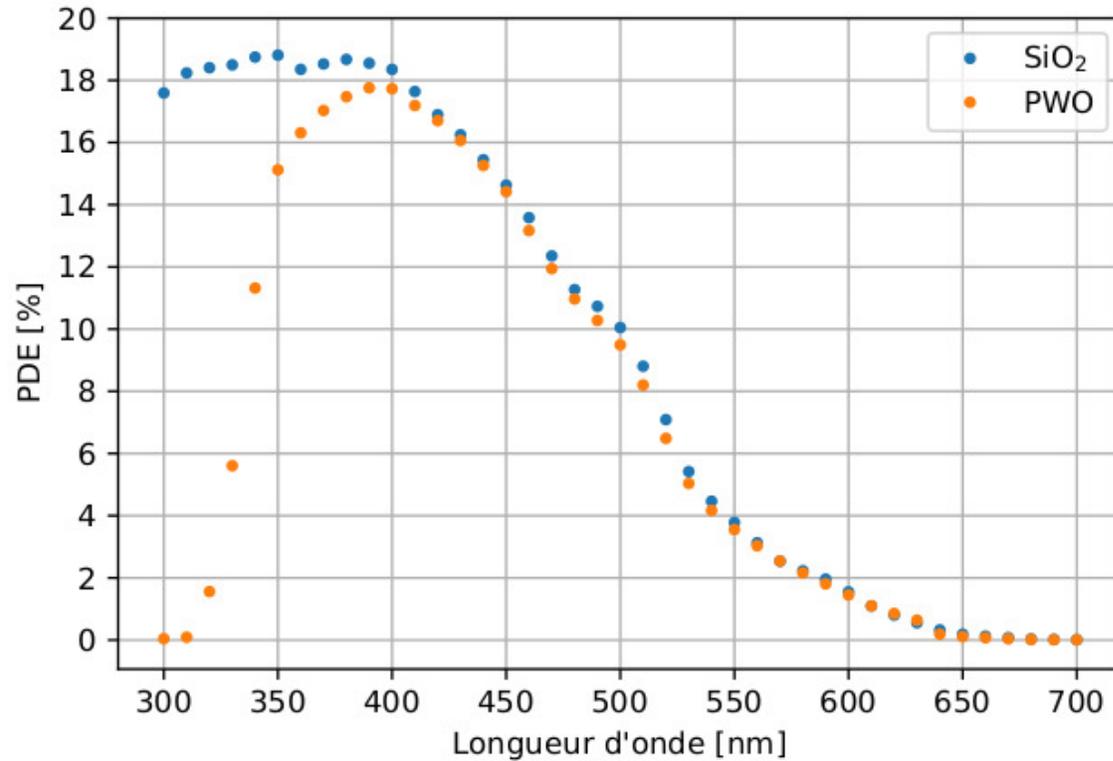
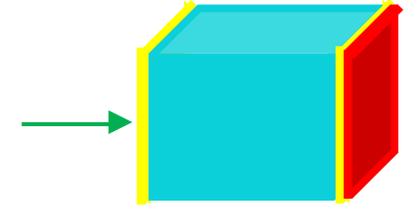
- Mesure du courant en sortie des deux cellules test
- Calcul de la sensibilité S_{mes} des cellules test
- Calcul de la PDE de la cellule test

$$S_{mes} = \frac{I_{mes}}{I_{cal}} S_{cal}$$

$$PDE = \frac{S_{mes} \times h \times c}{q \times \lambda}$$



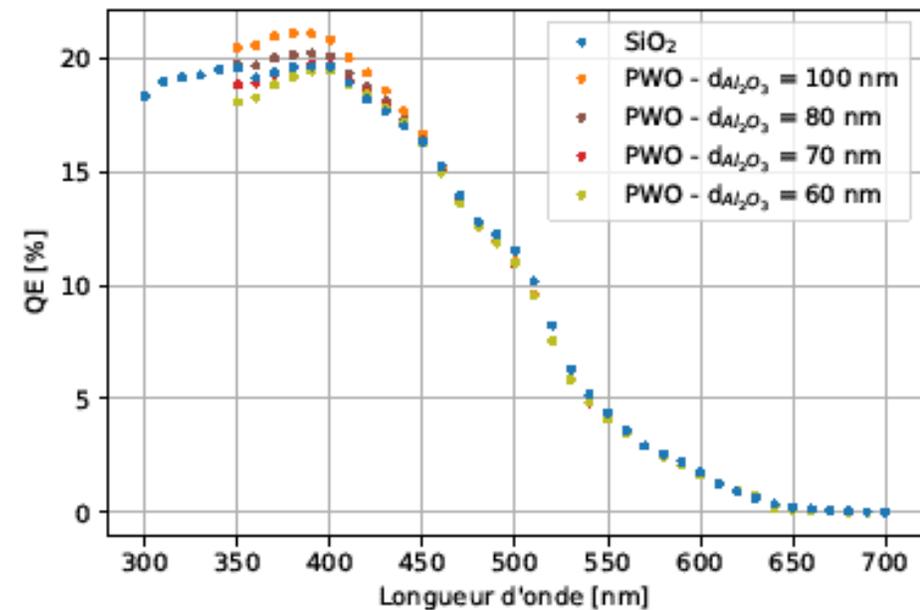
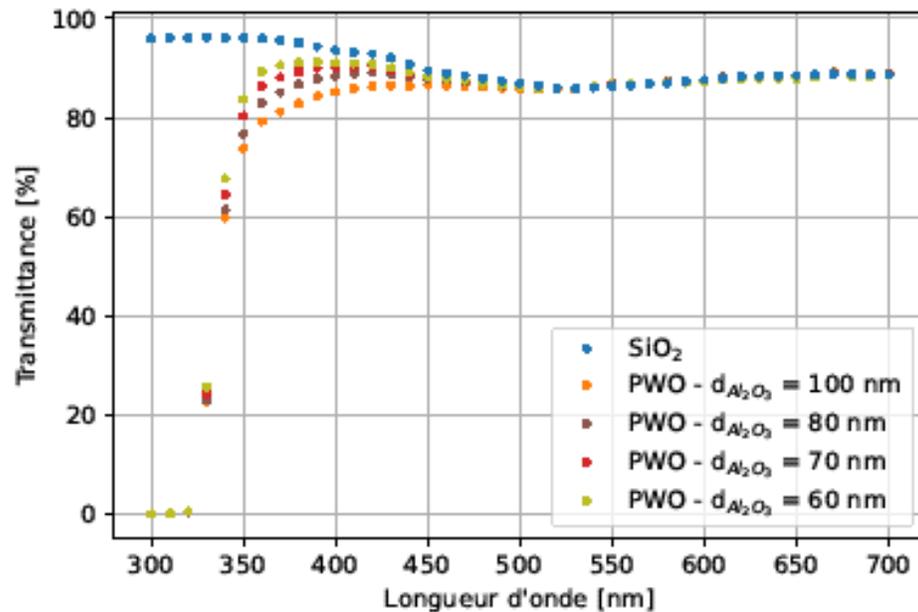
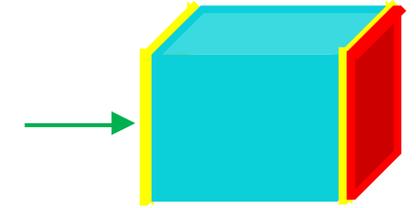
Efficacité de détection des deux cellules test



- Les PDE des deux cellules test se différencient aux longueurs d'onde inférieures à 400 nm → dû à l'atténuation dans le PWO

$$PDE = \overbrace{T}^A \times \underbrace{P_{att} \times P_{ext}}_{QE}$$

Déduction de l'efficacité quantique des cellules test



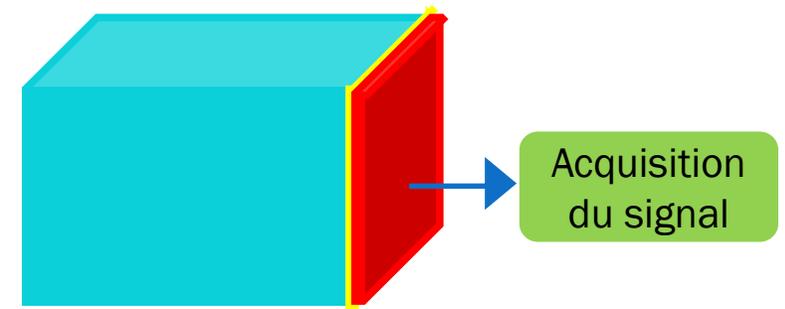
- Les photocathodes ont été déposée en même temps → Elles ont la même efficacité quantique
- Une épaisseur de 70 nm des couches minces est supposée

Résumé des mesures de transmittance et d'efficacité quantique

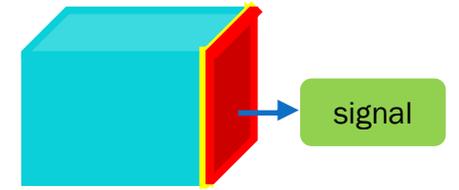
- ✓ Détermination des caractéristiques des différents composants du module de détection ClearMind
 - *Indice de réfraction et longueur d'absorption dans le PWO*
 - *Efficacité quantique des photocathodes déposées sur les cellules test*
- ✓ Validation de l'implémentation du modèle optique dans Geant4

Sommaire

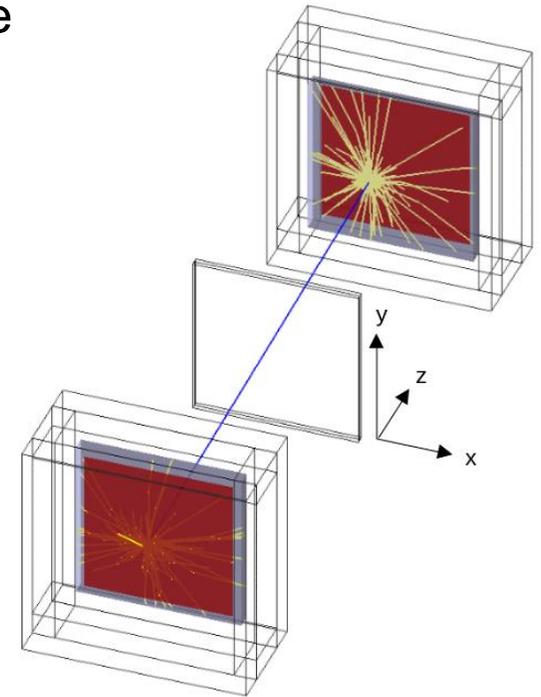
- I. Contexte et introduction
- II. Calcul de la transmittance à travers une couche mince
- III. Mesure de la transmittance et de l'efficacité quantique
- IV. Modélisation complète du module de détection ClearMind**



Description de la modélisation

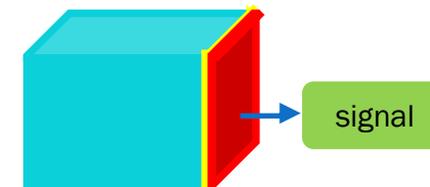


- Une source isotrope de $59 \times 59 \times 1 \text{ mm}^3$ générant 2.5 millions de paires d'annihilation
- Deux cristaux de PWO de $59 \times 59 \times 5 \text{ mm}^3$ d'épaisseur, distants de 50 mm de la source, aux quatre faces noires
- Une photocathode bialcaline bleue déposée sur le cristal
→ *Caractéristiques de l'interface variable*
- Un MCP-PMT avec 62.5 % de chance de pénétrer dans un des micro-canaux et un gain de 10^6
- Cartes d'anodes (64 x 64 anodes)
- 32 lignes à transmission (TL)
- Deux cartes d'amplification aux extrémités des TL
- Numérisation par le SAMPIC



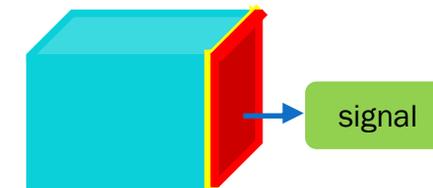
[Chi-Hsun Sung 2022]

Variation de paramètres

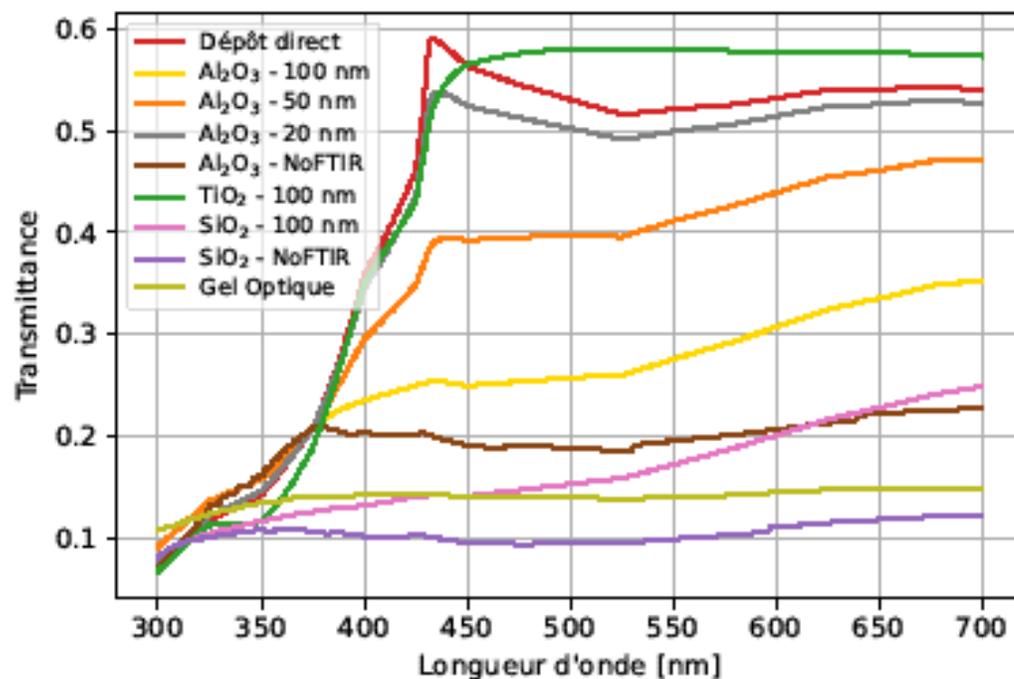


	Matériau LM	Épaisseur LM	<i>crystal/ air</i>	Gel optique	FTIR	QE
Dépôt direct (cas idéal)	-	-	20°	Non	-	30%
Al ₂ O ₃ - 100 nm (cas témoin)	Al ₂ O ₃	100 nm	20°	Non	Oui	30%
Al ₂ O ₃ - 50 nm	Al ₂ O ₃	50 nm	20°	Non	Oui	30%
Al ₂ O ₃ - 20 nm	Al ₂ O ₃	20 nm	20°	Non	Oui	30%
Al ₂ O ₃ - NoFTIR	Al ₂ O ₃	100 nm	20°	Non	Non	30%
TiO ₂ - 100 nm	TiO ₂	100 nm	20°	Non	Oui	30%
SiO ₂ - 100 nm	SiO ₂	100 nm	20°	Non	Oui	30%
SiO ₂ - NoFTIR	SiO ₂	100 nm	20°	Non	Non	30%
Cristal/Air Polie	-	-	0°	Non	-	30%
QE 15%	-	-	20°	Non	-	15%
Gel optique	-	-	20°	Oui	-	30%

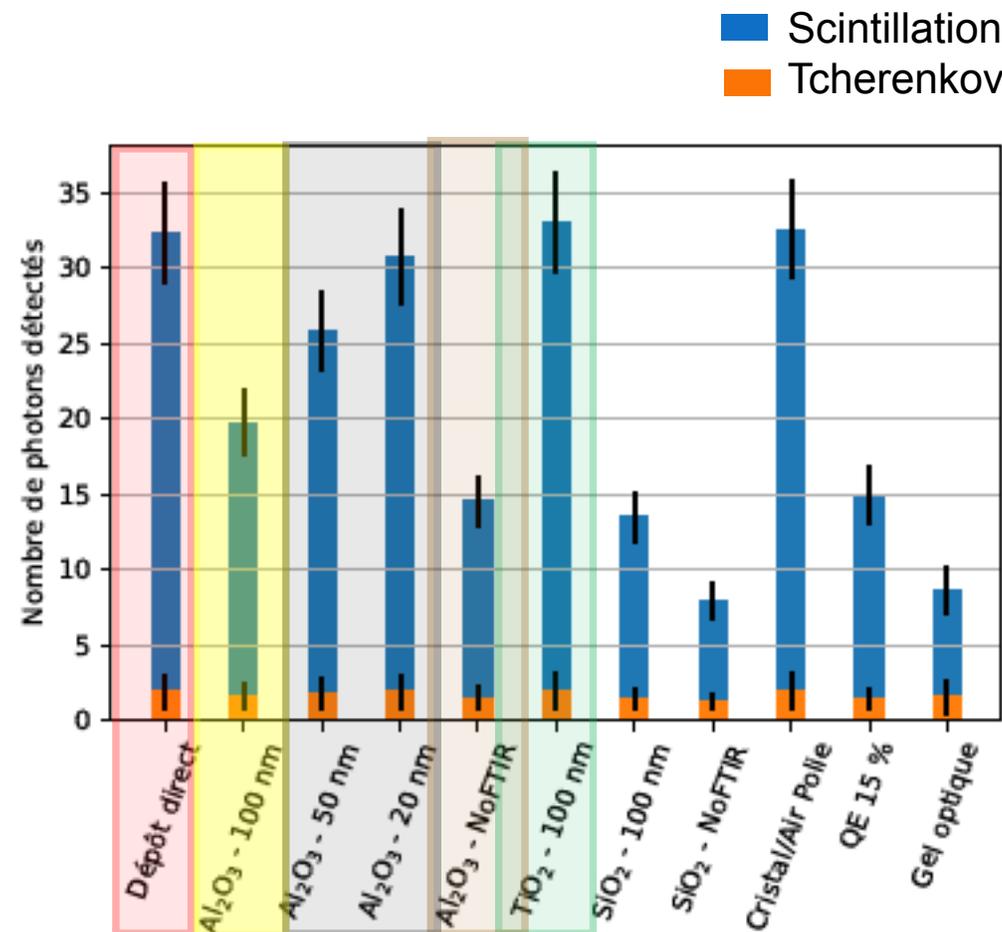
Nombre de photons détectés



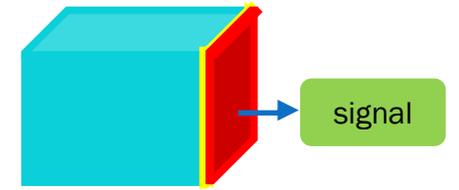
Cas Témoin : Al_2O_3 – 100 nm



Moyenne des transmittances pour des incidences isotropes sur la surface

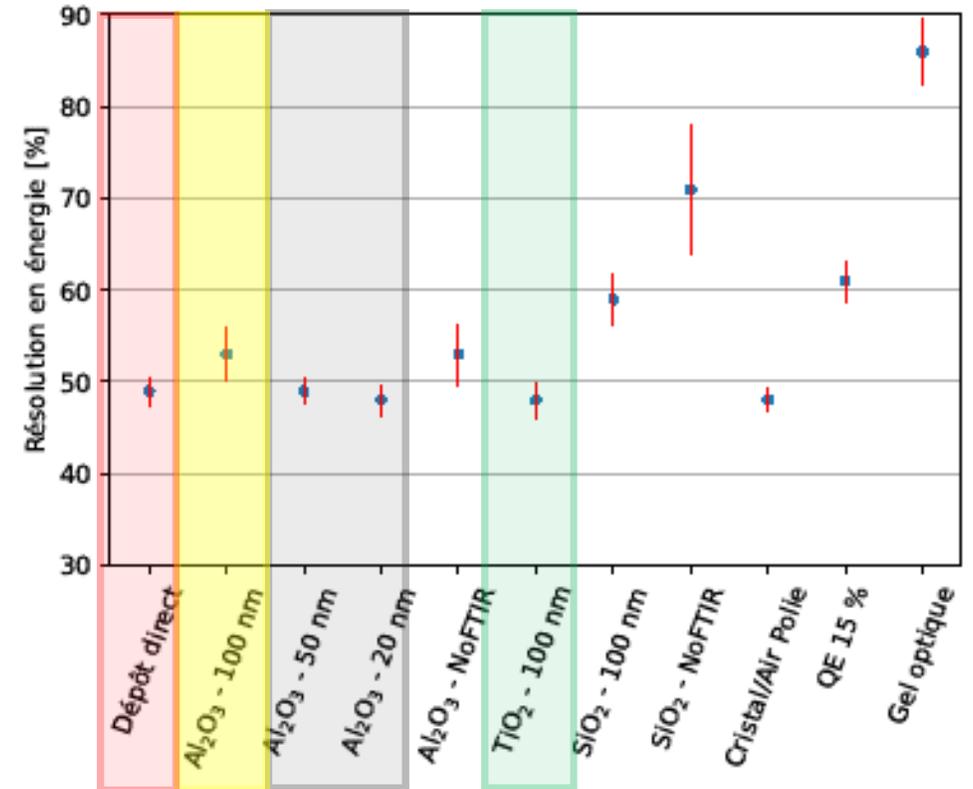
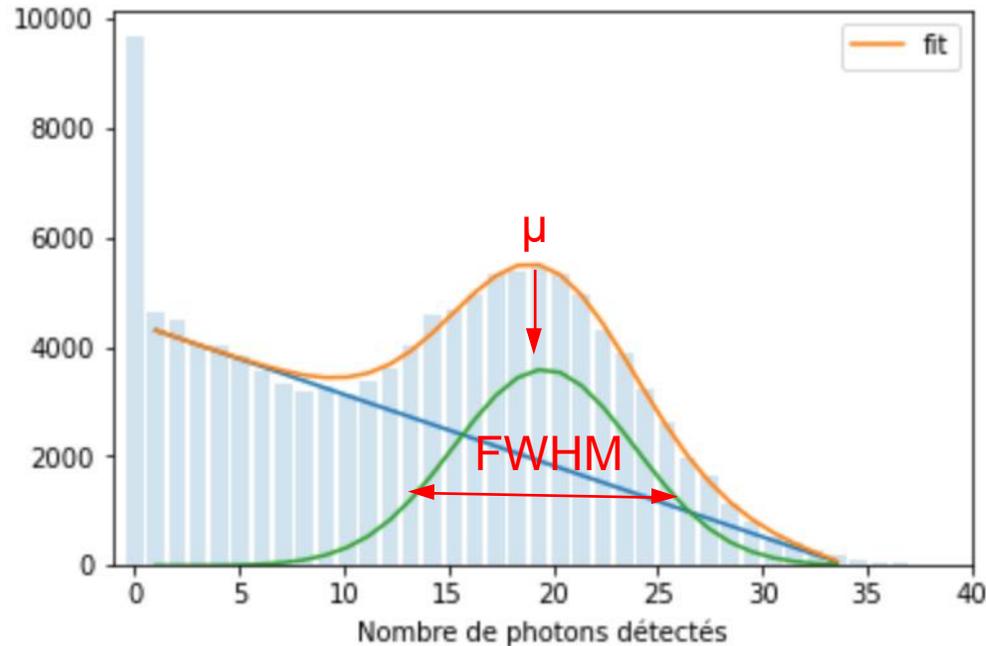


Résolution en énergie

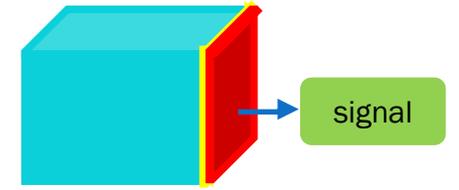


→ Caractérise l'efficacité du module à discerner une énergie

$$R_{\text{energie}} = \frac{FWHM}{\mu}$$



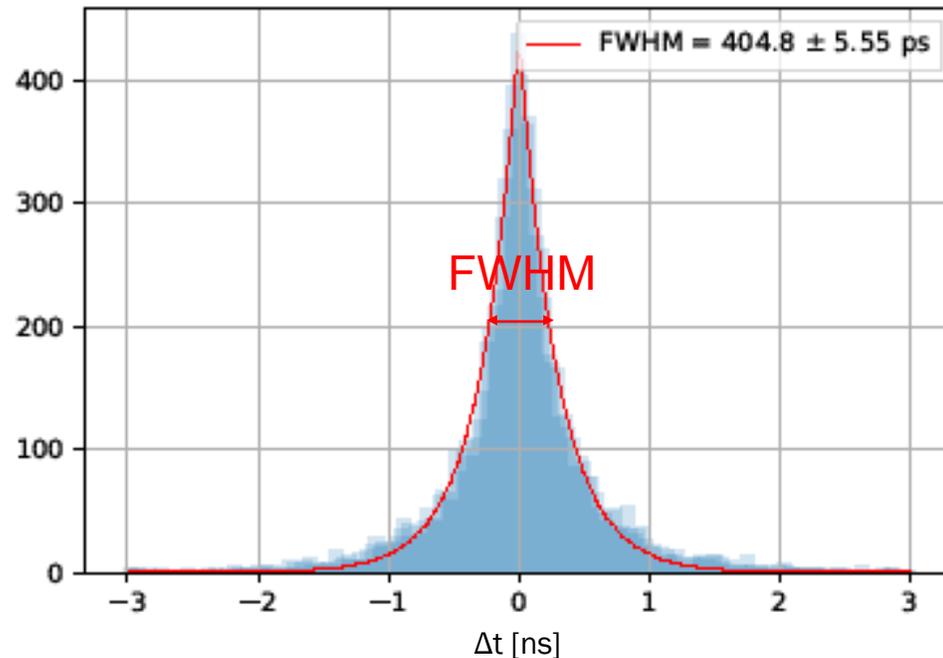
Résolution temporelle de la coïncidence (CTR)



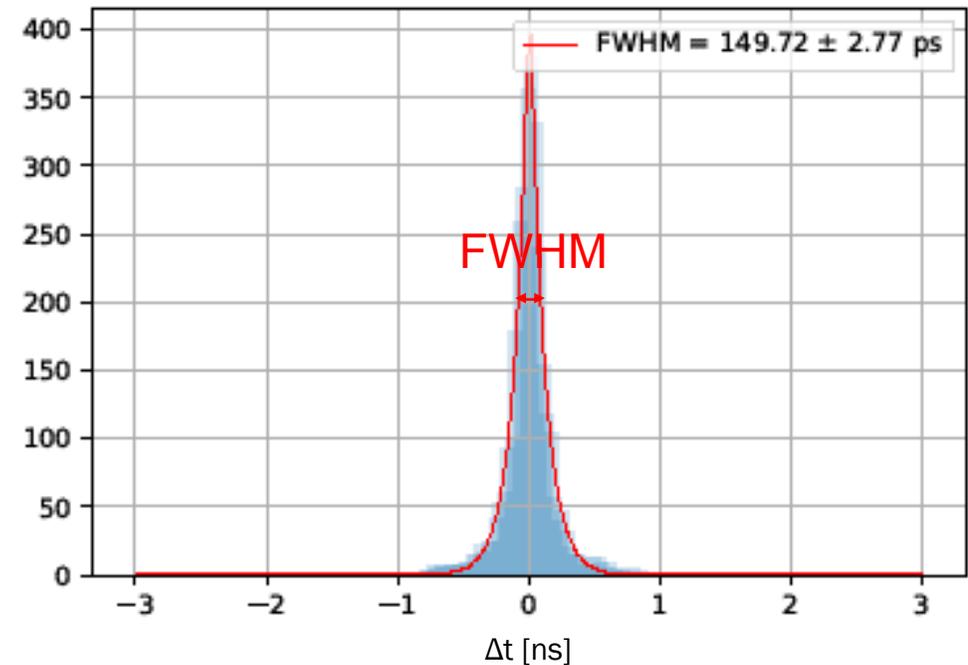
→ FWHM de la distribution de la différence des temps de détection sur les deux détecteurs en coïncidence

Cas Témoin : Al_2O_3 – 100 nm

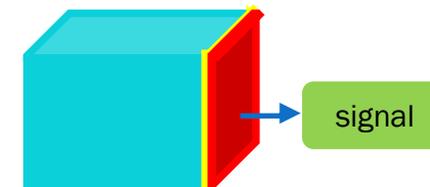
Simulation complète



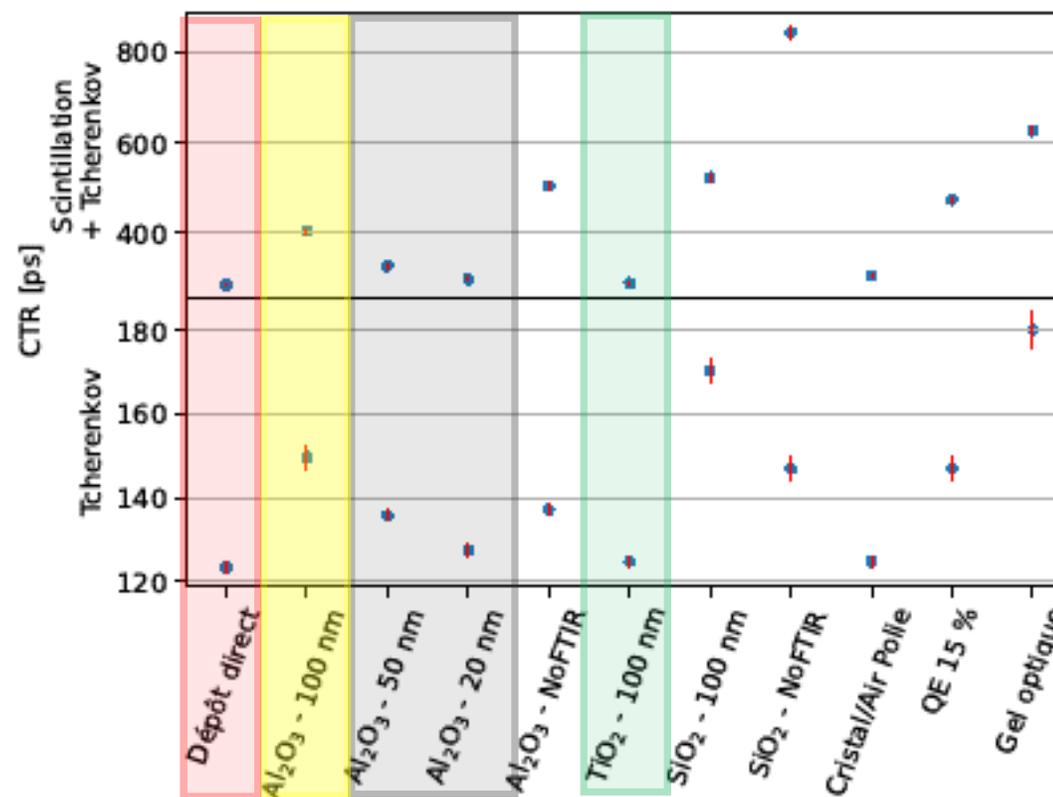
Simulation Tcherenkov



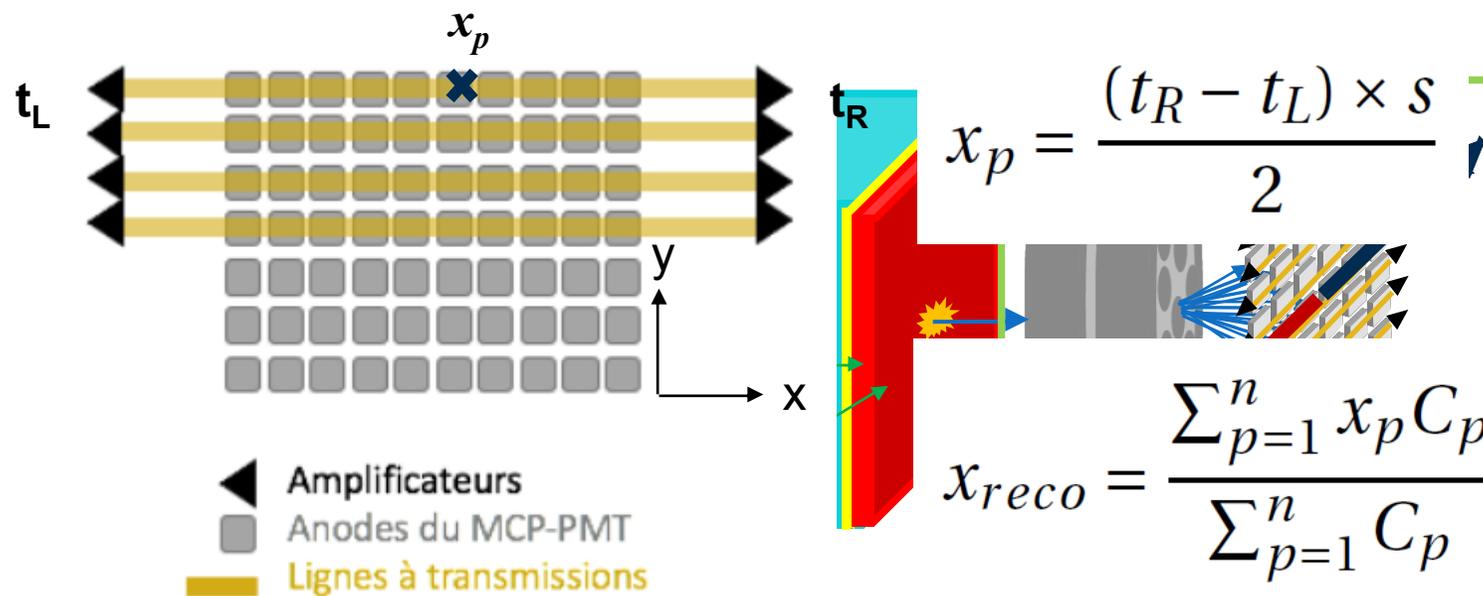
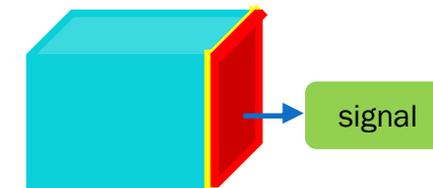
Résolution temporelle de la coïncidence (CTR)



- Les photons Tcherenkov permettent de diviser la CTR de plus de deux



Résolution spatiale selon x



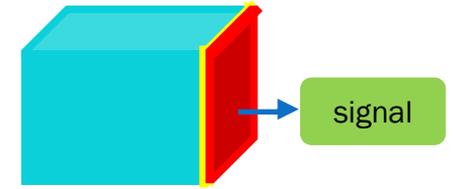
$$x_p = \frac{(t_R - t_L) \times s}{2}$$

x_p = position selon x de l'interaction du photon dans la photocathode

$$x_{reco} = \frac{\sum_{p=1}^n x_p C_p}{\sum_{p=1}^n C_p}$$

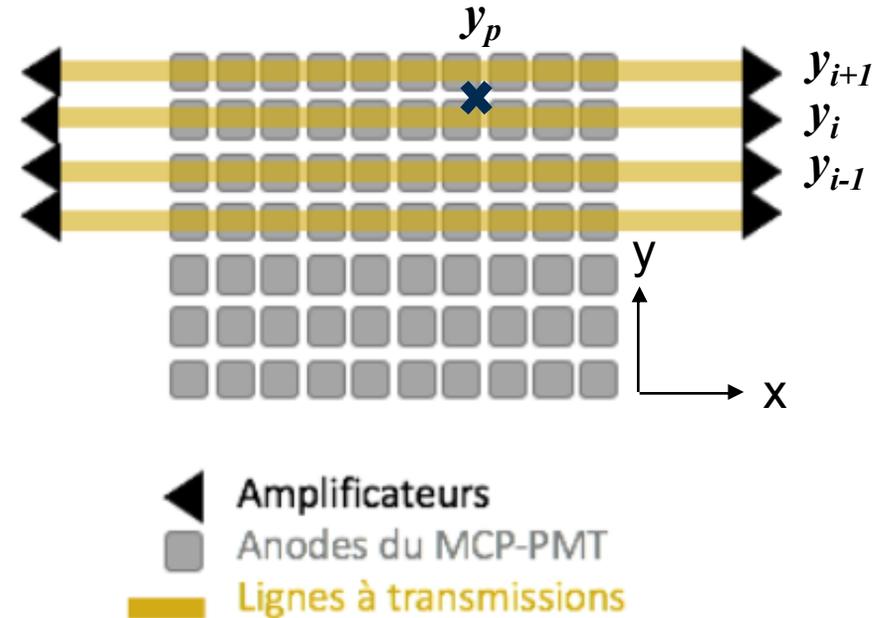
x_{reco} = position reconstruite selon x de l'interaction du gamma d'annihilation dans le cristal
 C_p = charge

Résolution spatiale selon y

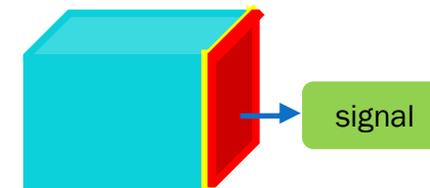


$$y_p = \frac{\sum_{k=i-1}^{i+1} y_k C_k}{\sum_{k=i-1}^{i+1} C_k}$$

y_p = position selon y de l'interaction du photon dans la photocathode



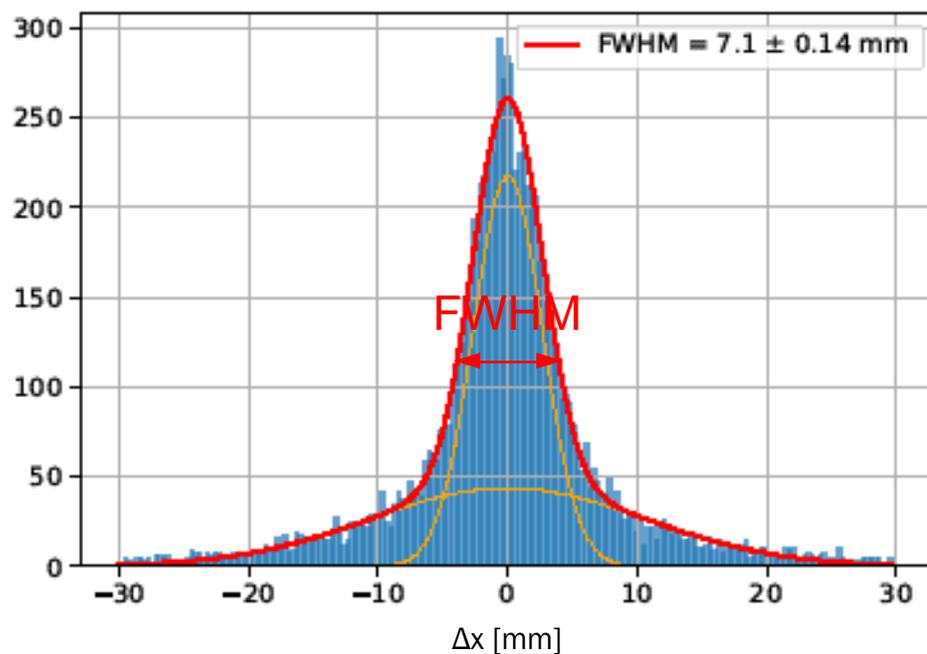
Résolution spatiale



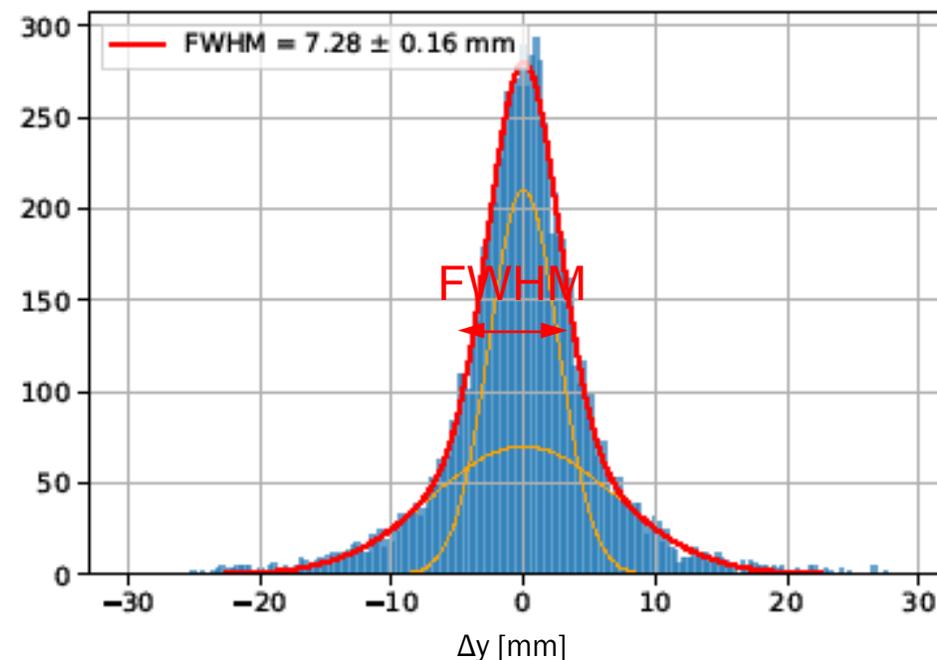
→ FWHM de la distribution de la différence entre la position exacte Monte Carlo et la position reconstruite

Cas Al_2O_3 – 100 nm

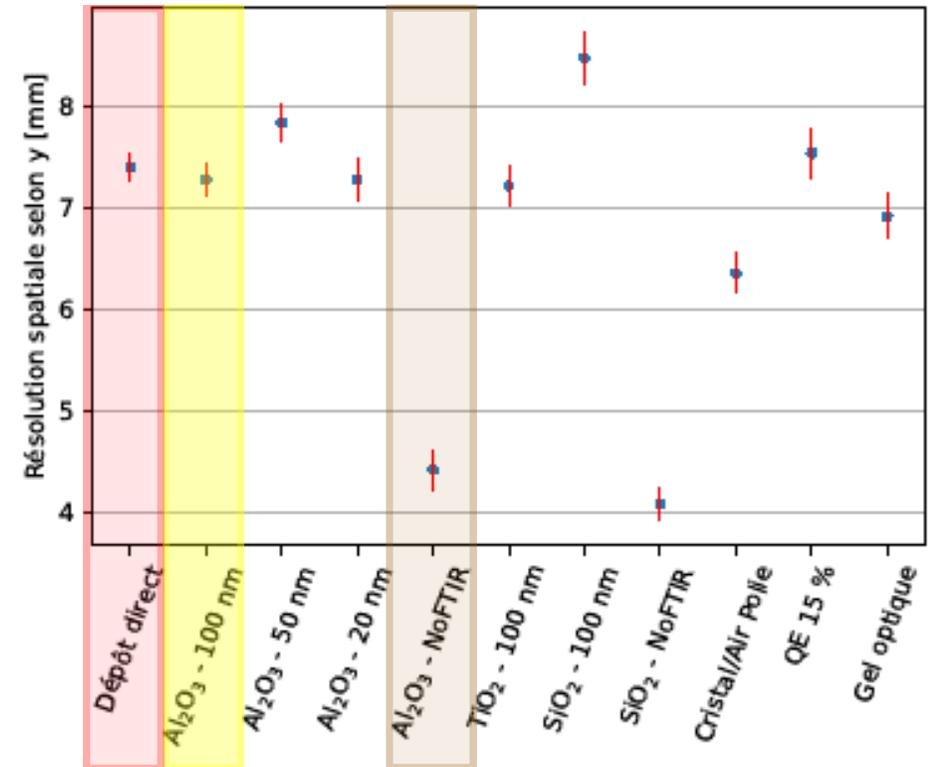
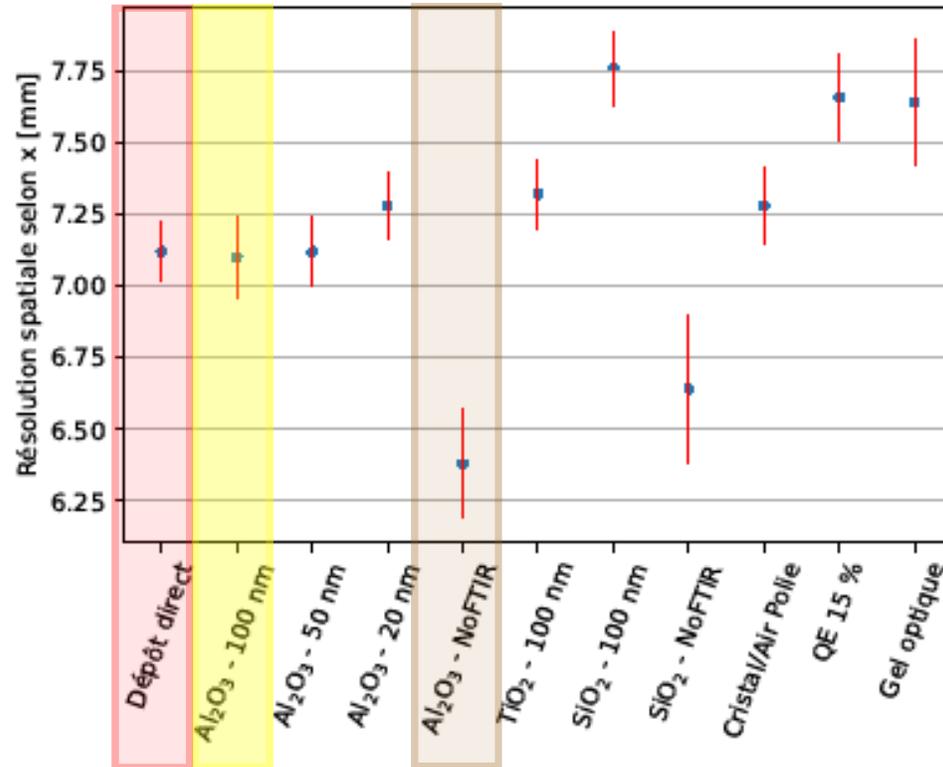
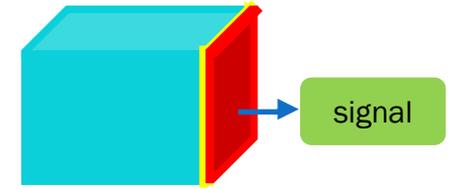
Selon l'axe x



Selon l'axe y



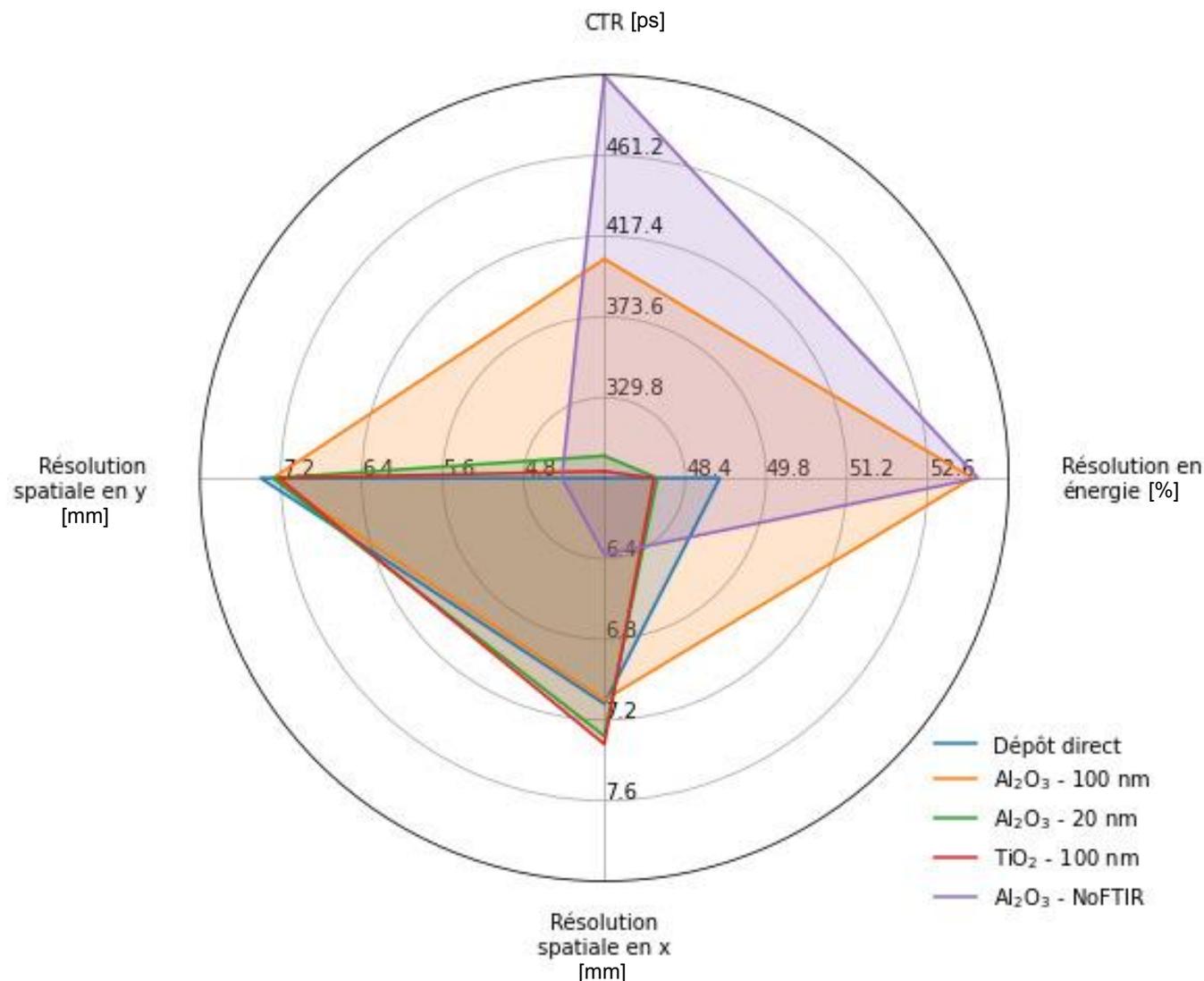
Résolution spatiale



→ La transmission frustrée dégrade la résolution spatiale en permettant la détection de photon avec un parcours important dans le cristal

Récapitulatif de la modélisation complète

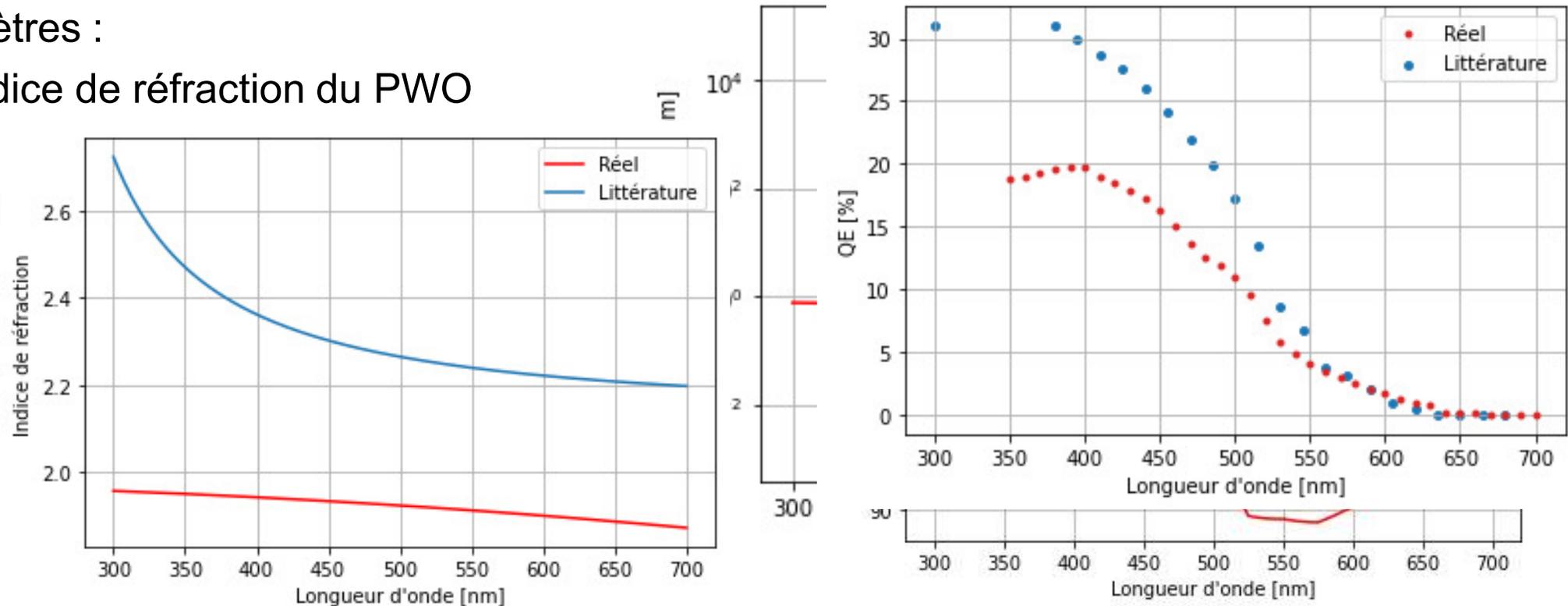
- La transmittance importante dans le cas du dépôt direct, d'une couche de passivation de **20 nm d' Al_2O_3** ou d'une couche de **TiO_2** nous permet de prétendre à de meilleures résolutions



Résumé de la modélisation complète

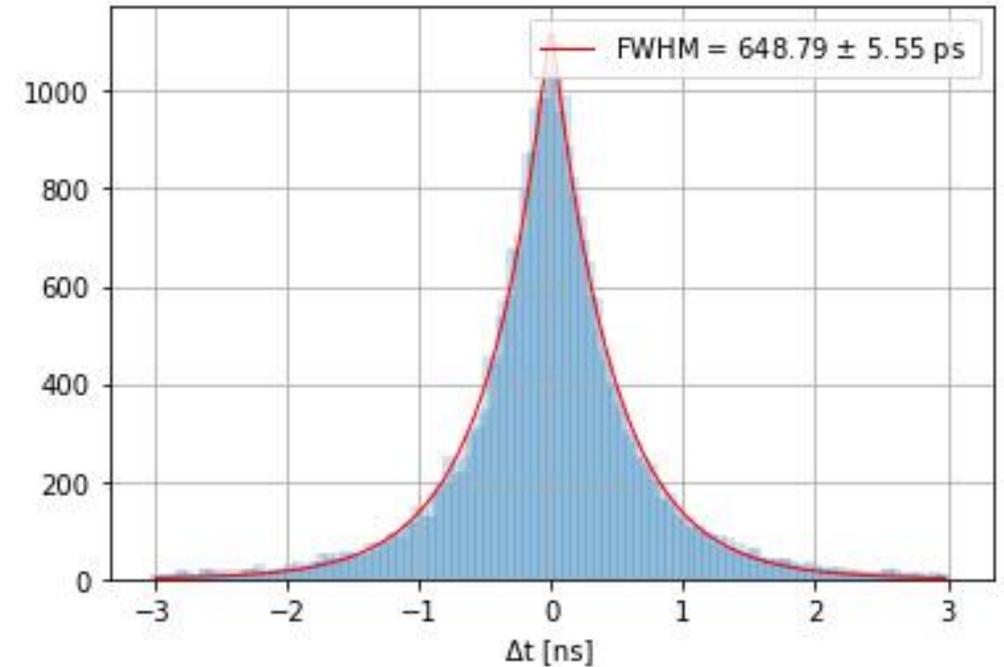
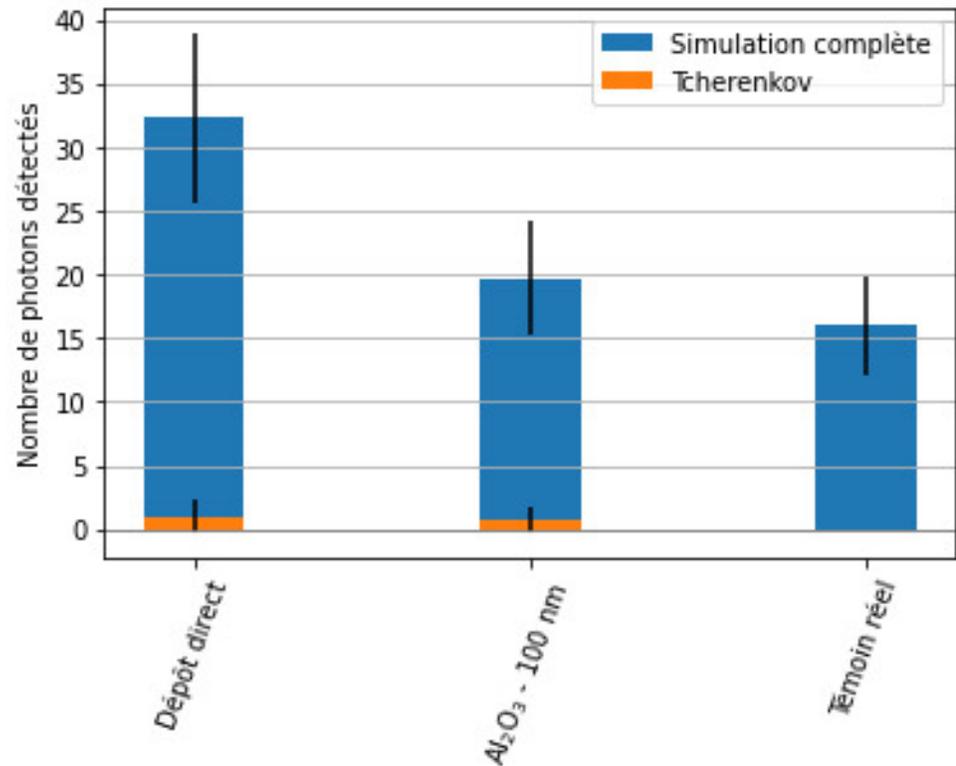
- Modélisation pas parfaitement réaliste mais qui permet d'estimer l'impact des différents paramètres étudiés
- Paramètres :

- Indice de réfraction du PWO
- Lo
- Eff



Résumé de la modélisation complète

- Les caractéristiques des composants du module de détection déduite des mesures engendrent une régression des performances du module



Résumé de la modélisation complète

- Une couche mince avec un indice de réfraction élevé ou une épaisseur optimale permet de se rapprocher des performances du cas idéal
- La couche de passivation permet d'améliorer les résolutions par rapport au couplage par gel optique
- La détection de photons Tcherenkov permet d'améliorer grandement la CTR
- Mais les résolutions estimées sont loin des objectifs du projet ClearMind : certains axes d'amélioration sont possibles :
 - *Utilisation d'un cristal transparent aux faibles longueurs d'onde avec une émission Tcherenkov plus importante*
 - *Optimisation de la couche mince*

Conclusion et perspectives

- Compréhension du transport optique des photons à travers une couche mince
 - Intégration d'une nouvelle méthode dans la version 11.1 de Geant4
- Mesure des caractéristiques des matériaux du module de détection ClearMind
- Estimation des performances projet ClearMind et mise en avant d'axes d'amélioration tel que :
 - *l'optimisation de la couche de passivation (épaisseur et indice de réfraction)*
 - *Amélioration de l'efficacité quantique des photocathodes*
 - *Utilisation d'un cristal avec un rendement Tcherenkov plus important*

JE VOUS REMERCIE POUR VOTRE ATTENTION

Soutenance de thèse de Laurie Cappellugola
Aix-Marseille Univ, CNRS/IN2P3, CPPM, Marseille, France
7 juillet 2023