arXiv:2603.01867v1 [hep-ex] 2 Mar 2026

拟提交至 JINST

基于传输矩阵法和 Geant4 光学模拟修正 SiPIN 读出的闪烁体绝对光产额

葛马[b] Zhiyang Yuan[a,1] Chencheng Feng[a] Zirui Yang[b] Zhenwei Yang[a] Ming Zeng[b]

[a]北京大学物理学院、核物理与技术国家重点实验室，中国北京 *100871*[b]清华大学工程物理系，中国北京 *100084*

电子邮箱： yuanzy@pku.edu.cn

摘要：长期以来，受实际读出几何结构中固有系统效应的限制，闪烁体绝对光产额（LY）的精确测量一直面临困难。大角度入射、光学外壳内的多次反射，以及耦合界面处的折射率失配，都会引入偏差，而这些偏差无法通过基于探测器标称量子效率的简单换算消除。为解决这一问题，我们提出一种结合传输矩阵法（TMM）与 Geant4 光学蒙特卡罗模拟的修正方法。我们利用 SiPIN 表面薄膜堆栈的波动光学模型，提取随角度和波长变化的单次命中探测概率 $p_{\mathrm{det}}(\lambda,\ \theta)$，随后将其动态耦合至宏观光子输运模拟中，从而实现微观界面光学响应与宏观几何集光的全链路整合。我们以 GAGG:Ce 晶体作为测试样品，展示了该方法的应用。两种光学外壳——高吸收率吸收体和高反射率反射体——分别与空气耦合和光学脂耦合相结合，构成四种独立配置，其整体光子到信号转换效率 α_{SiPIN} 相差超过三倍。尽管光学边界差异很大，由这四种配置推导出的本征光产额彼此高度一致（变异系数 = 1.8%）。测得的 GAGG:Ce 本征光产额为 $LY_{\mathrm{int}} = (5.63 \pm 0.10_{\mathrm{spread}} \pm 0.16_{\mathrm{syst}}) \times 10^4$ ph/MeV。该修正框架有效地将复杂几何结构和界面光学的系统性影响与光子探测解耦，为高精度、可溯源的闪烁体表征提供了一种通用方案。

关键词：GAGG闪烁体、SiPIN、绝对光产额测量

ArXiv 电子预印本： xxxxxx

[1]通讯作者。

目录

1 引言 **1**

2 模拟 4

2.1 SiPIN 表面光学响应建模 42.2 Geant4 光学模拟 7

3 实验装置 **11**

3.1 样品配置与硬件系统 113.2 电荷刻度与数据采集 12

4 结果 **13**

4.1 ^{241}Am 电荷刻度与实验能谱 144.2 有效反射率的确定 144.3 光产额的确定与一致性分析 15

5 讨论 **17**

5.1 敏感性分析与系统不确定度 175.2 修正方法的验证 205.3 封装边界条件的影响 21

6 结论 **24**

1 引言

闪烁体的绝对光产额（LY）是表征其光发射的核心参数，定义为单位沉积能量产生的闪烁光子数，通常以 ph/MeV 表示。LY 直接决定探测器可获得的光电子统计量，进而影响能量分辨率、阈值和探测效率等关键性能指标。因此，建立一种可溯源、可复现的绝对光产额测量与校准方法，使不同实验条件下的结果能够进行有意义的比较，对于准确表征闪烁体性能至关重要。

实际上，探测器输出端的电荷或光电子数并不直接等于晶体内部发射的光子数。从晶体中的光发射到信号读出，多个系统效应会导致观测值偏离本征光产额。这些效应通常相互耦合，包括以下几项。

首先，几何光收集效率对晶体表面处理（抛光/磨砂/粗糙度）、反射材料，以及晶体与其包覆层之间是否存在空气间隙（或部分接触）高度敏感。通常很难通过

解析方法准确获得。在典型的闪烁体读出几何结构中，理想情况下，光子会被有效地限制在侧面和顶部表面（通过全内反射或外部反射器），最终到达底部读出面并被探测到。在实际装置中，光子的角分布、界面反射特性和反射器吸收损耗以复杂的方式相互耦合。对于 GAGG 等高折射率晶体（$n \approx 1$。9）：当晶体与包覆层之间保留空气间隙时，晶体-空气界面处的全内反射（TIR）对大于临界角的光线起主导作用，使光子留在晶体内部。如果晶体表面非常光滑，全内反射会在每次反射时保持入射角不变，因此部分光子会被困住，因为其角度始终位于读出面的逃逸锥之外，无法被探测到。引入表面粗糙度可以使角度随机化，并打破这些光俘获模式，让更多光子进入读出面的接收锥；但这也会提高光子逃出晶体并与有损反射器相互作用的速率，从而增加吸收损耗 [1–3]。这些相互竞争的效应意味着，在不同边界条件下，表面粗糙度可能产生截然不同的净效应，因此无法通过简单规则确定最佳表面状态。Janecek 和 Moses 系统测量了晶体表面及常见反射器（3M增强型镜面反射器（ESR）、特氟龙、TiO_2 涂层等）的反射特性，表明实际反射行为与“理想镜面”或“理想漫反射”等简化假设存在显著差异 [4–6]；Janecek 还提供了这些反射器在 250–800 nm 范围内的反射光谱和厚度依赖性[7]。这种复杂性使得蒙特卡罗光学模拟成为预测此类几何结构下光收集效率的必要手段，也意味着模拟结果对表面模型和反射器参数的选择高度敏感。

其次，探测器量子效率与实际测量条件之间存在根本性差异。光电探测器的量子效率（QE）定义为产生的初级电荷载流子数（光电倍增管中的光电子，或硅探测器中的电子-空穴对）与入射光子数之比。在实验中，QE 通常通过光谱响应度测量获得：使用单色仪发出的准直光，在同一光路中交替测量经计量机构校准的参考探测器和被测器件的响应（即“替代法”），从而得到器件在各个波长下的量子效率曲线 [8]。这种标准测量条件——准直光、近法向入射、空气介质——与闪烁体的实际读出环境有显著差异。de Haas 和 Dorenbos 对这一问题进行了系统分析 [9, 10], , 指出闪烁体测量中至少存在三种偏差来源：(1) 闪烁光子产生于晶体内部，经多次反射后到达探测器，因此入射角分布远比标准 QE 测量中的近法向入射条件宽，而 QE 的角度依赖性（主要源于入射层涂层中的干涉效应）在大角度下不可忽略；(2) 探测器表面的菲涅耳反射会使部分光子返回晶体和反射器腔体，这些光子经过进一步反射后可能再次到达探测器——这种多次命中效应会改变每个光子的最终探测概率，在简化处理中常被忽略；(3) 耦合介质从空气变为光学耦合脂时，入射侧折射率的变化会显著影响探测器增透膜的有效透射率；再加上宽广的角分布，这意味着标准 QE 曲线不再能直接适用于实际几何结构。直接使用制造商提供的 QE 进行校正会引入

难以量化的系统误差。

第三，晶体自吸收取决于光程，而封装细节（例如耦合层厚度、接触比例以及是否存在空气间隙）往往难以精确控制和复现，因此不同样品或批次之间的直接比较存在困难。

为应对这些挑战，本文以滨松 S3590 系列硅 PIN 光电二极管（SiPIN）为例，在真实测量几何条件下建立了一种可溯源的“电荷 → -光子数”校准方法。具体而言，采用传输矩阵法（TMM）对 SiPIN 表面的光学薄膜进行建模，将制造商提供的标准量子效率（QE）转换为依赖于角度和波长的“单次命中探测概率” $p_{\mathrm{det}}(\lambda,\ \theta)$；随后将其纳入 Geant4 光学蒙特卡罗模拟，以追踪大角度入射、多次命中以及光子在晶体和反射体中的输运这一完整过程，从而得到真实几何条件下的总体光子-信号转换效率 α_{SiPIN} （即闪烁光子最终在 SiPIN 中产生可收集电荷载流子的总概率，定义见公式（2.6））。在实验方面，采用 S3590-08（带环氧树脂窗口）进行闪烁光读出，而结构更简单的 S3590-09（无窗口）则用作薄膜光学模型的校准参考；通过外推获得 S3590-08 在真实入射条件下的响应（见第 2.1节）。

为验证该方法，针对晶体包覆设计了两种光学特性截然不同的外壳配置。吸收体内壁覆有低反射率吸收涂层；未直接射向读出面的光子大多会被内壁吸收，因此探测效率较低，但对封装细节不敏感。反射体内壁覆有高反射率 TiO_2 涂层；光子在腔体内多次反射后到达读出面的概率较高，因此探测效率高得多，但取决于壁面反射率的具体值 ρ。对于每种外壳类型，晶体出射面与 SiPIN 入射面之间采用两种耦合方式：空气（空气间隙）和润滑脂（光学耦合脂，$n \approx 1$。46）。空气耦合受到晶体-空气界面处全内反射的限制，因此只有小角度入射的光子才能射出；由于润滑脂的折射率更接近晶体，润滑脂耦合可提供更宽的出射锥角。这些配置的 α_{SiPIN} 值在动态范围上大约相差三倍。

吸收体配置的壁面反射率由供应商的工艺规范给出，不依赖任何闪烁体测量数据，因此可作为独立的校准参考。反射器配置的关键未知量是有效反射率ρ_{eff}：由于实验装置不允许进行原位反射率测量，且涂层性能对工艺和腔体几何结构高度敏感，因此采用在同一反射器几何结构中于空气与润滑脂耦合之间切换时的信号峰位置之比$\mathrm{R_{A-G}}$ 来约束该参数。其物理依据是，耦合介质会改变出射角的接受角范围，从而改变多次反射光子对信号的贡献，使得$\mathrm{R_{A-G}}$ 与 ρ 呈单调关系，并可由测量值唯一确定 ρ_{eff}。若采用完全独立参数来源的吸收体路径与反射器路径得到一致的本征光产额 LY_{int}，则表明该校准模型在不同光学边界条件下均可靠。

本文研究了一个 $5 \times 5 \times 5\ \mathrm{mm}^3$ GAGG:Ce ($Gd_3Al_2Ga_3O_{12}$:Ce) 立方样品。其发射光谱与硅探测器的高灵敏度波段高度匹配，材料参数（发射光谱、透过率）可通过实验获得。Geant4 模拟采用

UNIFIED 模型参数 σ_{surf} 用于表征表面粗糙度；第 5 节进行了敏感性分析。本文结构安排如下：第 2 节介绍基于传输矩阵法和 Geant4 的光学模拟框架；第 3 节介绍实验设计和电子学标定；第 4 节采用双路径策略推导本征光产额，并展示跨配置一致性；第 5 节通过灵敏度扫描和系统不确定度评估分析标定精度，并讨论封装边界条件的影响；第 6节给出结论。

2 模拟

本节介绍用于绝对光产额标定的光学模拟方法。SiPIN 探测器表面通常覆盖着微米或亚微米尺度的多层薄膜结构（例如 SiO_2/Si_3N_4 抗反射（AR）涂层），其厚度与入射波长相当，会产生强烈的光学干涉。这种干涉使探测器量子效率不仅取决于波长，还取决于入射角和偏振。然而，Geant4 光学模拟基于几何光学，无法直接模拟此类波动光学效应。为此，我们采用两步建模策略：首先，使用 TMM 构建 SiPIN 表面的波动光学模型，计算透射和吸收随波长及入射角的变化；随后将这些结果存入查找表，并在 Geant4 光子输运过程中使用，从而将宏观光线追踪与微观波动光学行为结合起来。本节首先介绍 SiPIN 表面光学响应的 TMM 建模与验证（第2.1节），然后介绍 Geant4 光输运框架的实现（第2.2节）。

2.1 SiPIN表面光学响应建模

供应商量子效率曲线通常是在标准测试条件下（空气入射、近法向入射、准直光束）给出的 [10][1]。在本文研究的闪烁体读出几何中，光子从高折射率晶体（GAGG:Ce，$n \approx 1$。9）中射出，穿过空气或光学耦合脂（$n \approx 1$。46），到达 SiPIN 表面时具有较宽的角分布；反射后，它们还可能多次撞击探测器。因此，不能在模拟中直接将供应商量子效率曲线用作“单次命中探测概率”。

为解决这一问题，采用薄膜光学对 SiPIN 表面进行建模：利用供应商量子效率曲线校准层堆栈参数后，传输矩阵法即可针对任意已知折射率的入射介质，计算探测概率$p_{\mathrm{det}}(\lambda, \theta)$随波长和入射角变化的情况，并通过与供应商量子效率曲线对比来验证模型。滨松 S3590 SiPIN 系列在 600–700 nm 范围内的量子效率达到 95%–97%，远高于裸硅在空气中的理论上限（约 65%–70%），这与器件表面采用高效增透膜的情况相符。

对于单层四分之一波长抗反射涂层，薄膜光学给出的零反射条件为 $n_{\mathrm{AR,opt}} = \sqrt{n_0 \cdot n_{\mathrm{sub}}}$，即薄膜折射率等于入射介质和基底折射率的几何平均数 [11]。对于空气入射（$n_0 = 1$）到硅基底（$n_{\mathrm{Si}} \approx 3.5$–4.0），最佳薄膜折射率因此约为 1.9–2.0。因此，单层 Si_3N_4 、折射率为 $n \approx 2.0$–2.1 的涂层被

[1]Hamamatsu S3590 系列产品页面：https://hep.hamamatsu.com/eu/en/products/S3590-09.html。

用作抗反射涂层的等效模型；层堆栈参数一旦确定，传输矩阵法便能准确预测任意入射介质下的响应。所得层堆栈结构如图 1所示：S3590-09（无树脂窗口）简化为“入射介质 → Si_3N_4 (d_{AR})→ 硅衬底”；按照厂商数据手册，S3590-08 在抗反射涂层上方增加了一层 700 μm 环氧保护层。

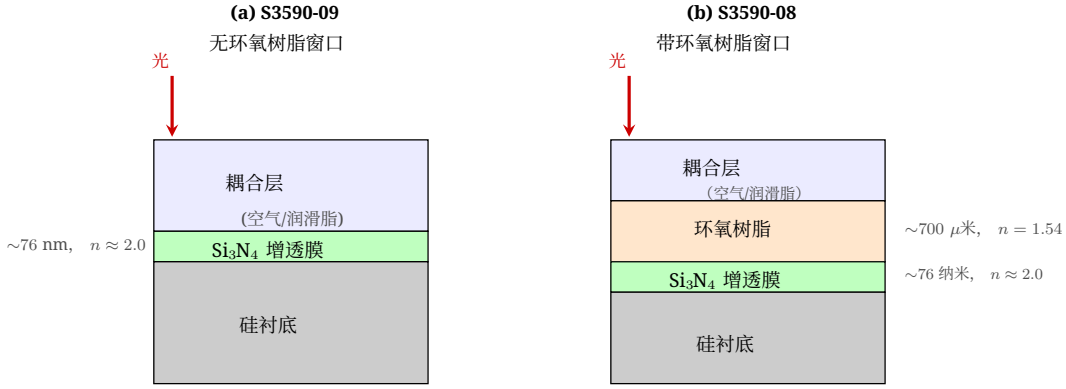


图1：SiPIN 表面层堆示意图。(a) S3590-09：入射介质 → Si_3N_4 增透膜 → 硅衬底；(b) S3590-08：入射介质 → 环氧树脂窗口（~700 μm） → Si_3N_4 增透膜 → 硅衬底。

采用传输矩阵法计算多层堆叠 [11, 12]的光学响应。传输矩阵 M 由各层的界面矩阵与传播矩阵相乘得到；随后导出复反射系数 $r = M_{21}/M_{11}$ 和功率反射率 $R = |r|^2$，对非偏振光取s偏振与p偏振的平均值。硅（Si）在可见光波段具有显著吸收；因此模型采用复折射率 $\tilde{n} = n + ik$，并选择斯涅尔定律中复折射角的分支，使电磁波在吸收介质中衰减。光学常数取自标准数据集：Si取自Green（2008），Si_3N_4取自Philipp（1973） [13, 14]。探测概率定义为

$$p_{\mathrm{det}}(\lambda, \theta) = \eta_{\mathrm{IQE}} \cdot [1 - R(\lambda, \theta)], \tag{2.1}$$

其中，θ 是相对于表面法线测量的入射角，η_{IQE} 是内量子效率（考虑了载流子收集、死层及其他内部损失），$R(\lambda, \theta)$是由传输矩阵法计算得到的入射反射率。

S3590-09没有环氧树脂窗口，表面结构也更简单，因此适合作为校准参考。对于单层薄膜，传输矩阵法计算的入射反射率 $R(\lambda, \theta; d_{\mathrm{AR}})$明确取决于薄膜厚度 d_{AR}。在垂直入射时：

$$R(\lambda, 0; d_{\mathrm{AR}}) = \left| \frac{r_{01} + r_{12}\, e^{2i\delta}}{1 + r_{01} r_{12}\, e^{2i\delta}} \right|^2, \quad \delta = \frac{2\pi n_{\mathrm{AR}} d_{\mathrm{AR}}}{\lambda}, \tag{2.2}$$

其中，r_{01} 和 r_{12} 分别为入射介质-增透膜界面和增透膜-硅界面的菲涅耳振幅反射系数，δ 为薄膜中的单程相位。将数据手册量子效率曲线 $QE_{09}^{(\mathrm{vendor})}(\lambda)$ 作为约束，并令其等于 $\theta = 0$处单次入射的探测概率：

$$QE_{09}^{(\mathrm{model})}(\lambda; d_{\mathrm{AR}}, \eta_{\mathrm{IQE}}) \equiv p_{\mathrm{det}}(\lambda, 0) = \eta_{\mathrm{IQE}}\, [1 - R_{09}^{(\mathrm{TMM})}(\lambda, 0; d_{\mathrm{AR}})]. \tag{2.3}$$

将数据手册中的采样波长记为 $\Lambda = \{\lambda_j\}$，并定义 $A_j(d_{\mathrm{AR}}) \equiv 1 - R_{09}^{(\mathrm{TMM})}(\lambda_j,\ 0;\ d_{\mathrm{AR}})$，拟合的目标是最小化

$$\min_{d_{\mathrm{AR}},\eta_{\mathrm{IQE}}} \sum_j \left(QE_{09}^{(\mathrm{vendor})}(\lambda_j) - \eta_{\mathrm{IQE}} A_j(d_{\mathrm{AR}}) \right)^2 . \tag{2.4}$$

S3590-08 具有厚度约为 700 μm 的环氧树脂保护窗（折射率$n_{\mathrm{epoxy}} \approx 1.54$）。由于该层远厚于光学波长，故将其视为非相干厚层。厚聚合物层中的光学损耗主要来自瑞利散射（$\propto \lambda^{-4}$）以及杂质和缺陷引起的吸收与散射[2]。由于拟合在较窄波段（450–700 nm）内进行，窗口透射率 $T_{\mathrm{epoxy}}(\lambda)$ 近似为 $T_{\mathrm{epoxy}}(\lambda) \approx a + b \cdot (\lambda - \lambda_0)$，其中 $\lambda_0 = 550$ nm，并将该因子叠加应用于与 S3590-09 相同的入射反射率计算：

$$QE_{08}^{(\mathrm{model})}(\lambda; d_{\mathrm{AR}}, \eta_{\mathrm{IQE}}, a, b) = T_{\mathrm{epoxy}}(\lambda) \cdot \eta_{\mathrm{IQE}} \left[1 - R_{08}^{(\mathrm{TMM})}(\lambda, 0; d_{\mathrm{AR}}) \right]. \tag{2.5}$$

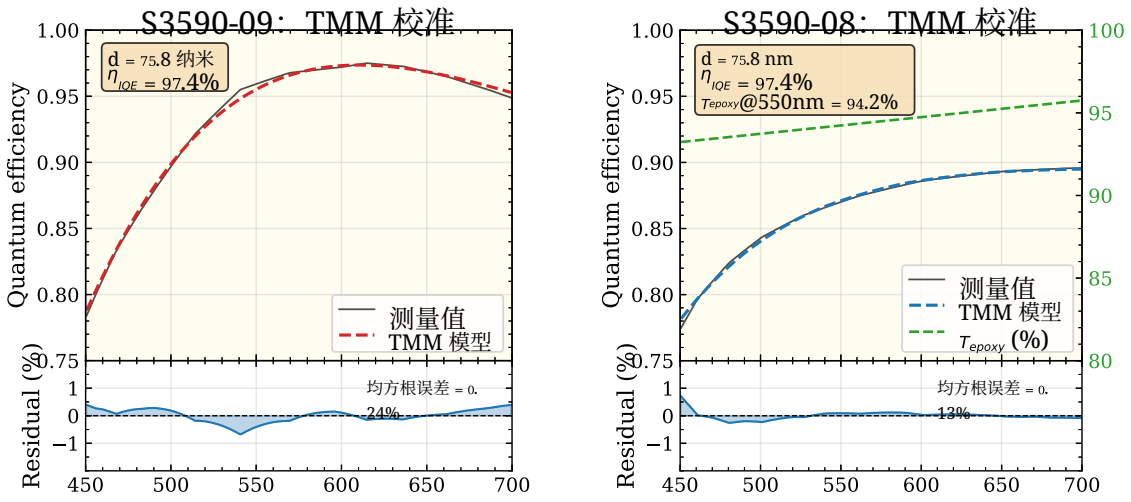
采用两步联合拟合：首先仅使用 S3590-09 的 QE 数据拟合 $(d_{\mathrm{AR}}, \eta_{\mathrm{IQE}})$；随后将其固定，并使用 S3590-08 的 QE 数据拟合 (a, b)。

图2 展示了拟合结果。对于 S3590-09，模型在拟合范围内与供应商量子效率数据相符（均方根误差（RMSE）约为 0.24%）；拟合得到的内量子效率$\eta_{\mathrm{IQE}} \approx 97$。4% 与已报道的硅光电二极管数值一致 [15]。对于 S3590-08，拟合结果为 $b > 0$（短波长处的透过率较低），这与短波长处更强的瑞利散射损耗相符；图2（b）的右侧坐标轴显示 $T_{\mathrm{epoxy}} \approx 94$。2% 在 550 nm 处，对应约 6% 的吸收/散射损耗。采用的校准参数为 $d_{\mathrm{AR}} = 75$。75 nm 和 $\eta_{\mathrm{IQE}} = 97$。39%。

固定校准后的层堆栈参数后，传输矩阵法可针对折射率已知的任意入射介质，计算随波长和入射角变化的探测概率。图3 展示了 S3590-09 和 S3590-08 在空气和润滑脂入射条件下的 $p_{\mathrm{det}}(\lambda,\ \theta)$ 二维热图。接近垂直入射时（$\theta < 30°$），S3590-09 在空气中的表现略优于在润滑脂中的表现，因为增透膜针对空气–硅界面进行了优化；在较大入射角时（$\theta > 50°$），由于润滑脂的折射率更接近硅$_3$，$_4$,N提高了临界角，并减缓了反射率的上升，因此润滑脂入射条件下的探测概率更高。由于环氧树脂窗口中的额外吸收，S3590-08 的整体探测概率略低于 S3590-09；在 GAGG 发射带（450–700 nm）内，探测概率仍然较高（> 0。8）。这些 $p_{\mathrm{det}}(\lambda,\ \theta)$表格在网格上生成，网格间隔为 $\Delta\lambda = 10$ nm 和 $\Delta\theta = 5°$，以 CSV 格式存储，并在 Geant4 初始化时载入，用于边界相互作用处的双线性插值。

TMM等效模型采用简化的层堆叠结构（单层 Si_3N_4 加上线性T_{epoxy}）。其模型不确定性根据三个来源进行估算。拟合参数的统计不确定性（d_{AR}、η_{IQE}、a、b）会传播到 p_{det}（λ、θ）网格，并贡献约 0.05%，表明其统计稳定性较高。通过改变范围边界，并比较外推至任意角度和介质时的 p_{det} 结果，评估拟合波长范围的影响；这

[2]Epoxy Technology, Inc.,《技术提示 18：了解环氧树脂应用的光学特性》，https://www.epotek.com/docs/en/Related/Tech%20Tip%2018%20Understanding%20Optical%20Properties%20of%20Epoxy%20Applications.pdf。



(a) S3590-09（无窗口）　　(b) S3590-08（带环氧树脂窗口）

图2：SiPIN TMM 模型校准结果。每个子图均显示供应商提供的 QE 曲线与 TMM 预测值（上图），以及残差（模型 – 测量值）（下图）。(a) S3590-09：拟合参数d_{AR} = 75。75 nm, η_{IQE} = 97。4%。(b) S3590-08：共享 (d_{AR}, η_{IQE})；绿色虚线为拟合得到的环氧树脂透过率 $T_{\mathrm{epoxy}}(\lambda)$，在 550 nm 处约为 94.2%。

贡献约 0.24%。此外，相较于真实的多层堆叠结构，单层 AR 假设会引入结构性偏差，即使采用最优参数也无法完全消除；联合拟合残差均方根误差 $\mathrm{RMSE}^{\mathrm{joint}}/QE_{\mathrm{band}} \approx 0.27\%$ 被用作该结构误差的保守估计。将这三项贡献以平方和开根号的方式合并后，得到的总体模型不确定性约为 0.37%。

2.2 Geant4 光学模拟

使用 Geant4 v11.2.2 进行光学光子输运 [16, 17]。参考几何结构与实验反射体外壳相匹配（图 4）：将一块 $5 \times 5 \times 5\ \mathrm{mm}^3$ GAGG:Ce 立方晶体置于外壳内，晶体侧面和顶面与外壳壁之间留有约 2 mm 的空气间隙；晶体底面通过耦合层（空气或润滑脂）与 SiPIN 探测器耦合。外壳底部内径与 SiPIN 外形尺寸相匹配，以便机械对准并确保不同测量中的定位可重复。光源置于外壳上方 5 mm 处，发射方向在整个球面上均匀采样；每次运行均确保晶体中沉积能量的事例超过 30 000 个。启用的光学物理过程包括体吸收、瑞利散射、边界反射/折射和闪烁。

材料的光学参数设置如下。GAGG:Ce 的折射率采用 $n(\lambda)$曲线，数据来自 Kozlova 等人 [18]，并进行插值；发射光谱使用 Edinburgh FLS1000 荧光仪测量，峰值波长约为 530 nm；透过率使用 Edinburgh DS5 紫外-可见分光光度计测量（200–800 nm），吸收长度$L_{\mathrm{abs}}(\lambda)$ 则是在考虑空气–晶体界面的双表面反射后推导得出。图5展示了测量得到的透过率和发射光谱；当 $\lambda < 450$ nm 时，透过率急剧下降，

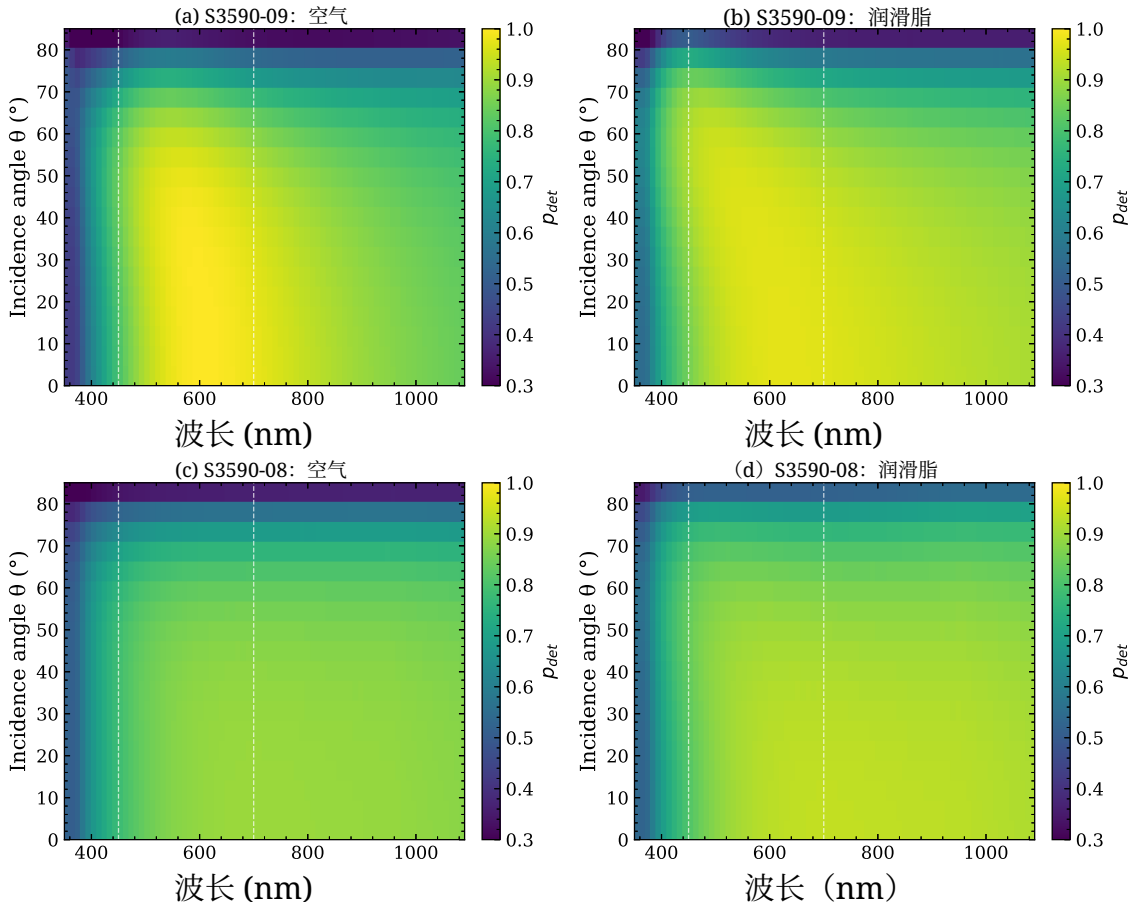


图3：探测概率 $p_{\mathrm{det}}(\lambda,\ \theta)$ 热图。(a) S3590-09，空气入射；(b) S3590-09，油脂入射；(c) S3590-08，空气入射；(d) S3590-08，油脂入射。白色虚线标示 GAGG 发射带（450 和 700 nm）。

对应于 Ce^{3+} 4f–5d 吸收；发射峰位于 ~530 nm，主发射带位于 450 至 700 nm 之间，与 SiPIN 的高灵敏度区域相匹配。外壳壁采用朗伯漫反射模型，反射率 ρ 作为可调参数。实验中使用了几何结构相同但壁面处理不同的两个外壳：反射体和吸收体（第3.1节）。耦合层的折射率设为 $n = 1。0$ （空气）或 $n = 1。46$ （润滑脂）[3]，并以数据手册中的透过率作为参考（厚度为 0.1 mm 时，在 450–500 nm 波段约为 98.8%）。SiPIN 随角度和波长变化的响应取自第 $p_{\mathrm{det}}(\lambda, \theta)$ 节中计算得到的查找表2.1；陶瓷基底、环氧树脂窗口和硅敏感层均根据数据手册建模，而引脚和屏蔽层未纳入模型。

晶体表面粗糙度由 Geant4 UNIFIED 模型的 σ_{surf} 参数描述（实现为 sigma_alpha，单位为 rad）。该参数设定微表面法线相对于宏观法线的角度分布； $\sigma_{\mathrm{surf}} \to 0$ 对应镜面，较大的 σ_{surf}会增加角度随机化 [19]。 σ_{surf} 是几何光学表面模型中的一个参数

[3]EJ-550光学润滑脂产品页面和数据手册：
https://eljentechnology.com/products/accessories/ej-550-ej-552。

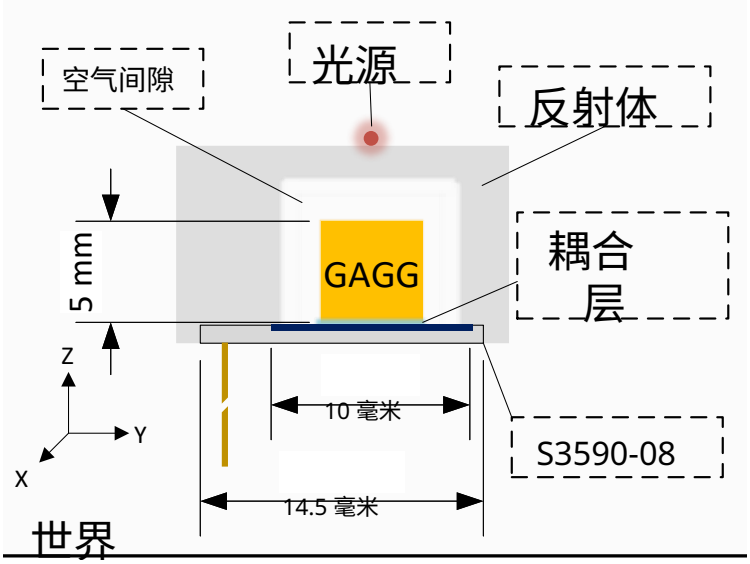


图 4：Geant4模拟几何的示意图。晶体周围设有反射体或吸收体外壳；底面通过耦合层与SiPIN耦合。

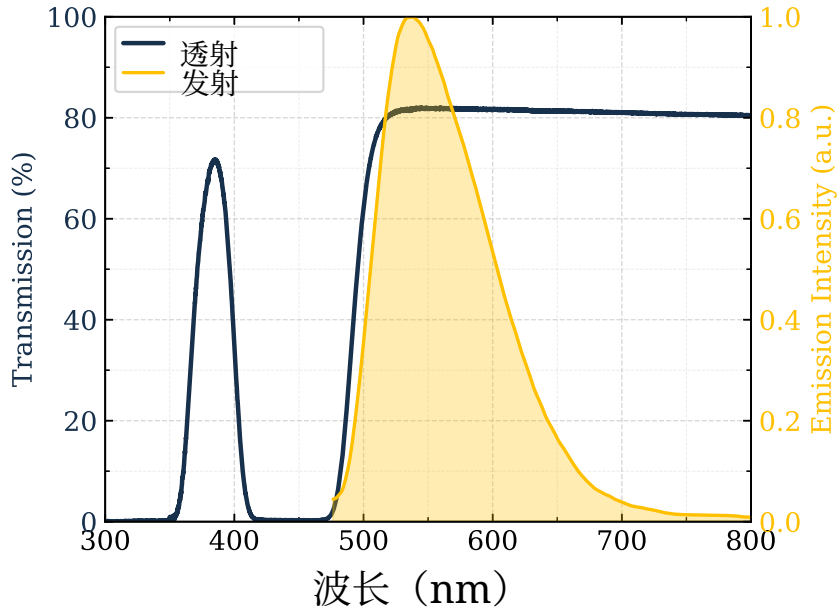


图 5：GAGG:Ce样品的透过率和发射光谱（$5 \times 5 \times 5\ \mathrm{mm}^3$）。

，且不能等同于 Ra/Rq 等加工粗糙度指标。在 Geant4 应用中，Jungmann等人将 $\sigma_{\mathrm{surf}} \approx 0$。02 rad 用于抛光表面，将 $\sigma_{\mathrm{surf}} \approx 0$。2rad 用于未抛光表面，并讨论了 $\sigma_{\mathrm{surf}} \in [0$。01，0。3] rad 的范围用于不确定度估计 [5, 20]。本文采用 $\sigma_{\mathrm{surf}} = 0$。02 rad 作为抛光表面的名义值（$\sigma_{\mathrm{surf}} = 0$。2rad 用于磨砂表面），并在 0.01–0.3 rad 范围内进行灵敏度扫描，以涵盖从近镜面到明显粗糙的情况。

当光学光子到达“耦合介质 $\rightarrow$ SiPIN”边界时，模拟会计算其波长 λ和入射角 θ，并查找单次命中探测概率 $p_{\mathrm{det}}(\lambda,\ \theta)$

该概率来自传输矩阵法预先计算的表格，随后进行随机抽样：若光子被“探测到”，则将其计数并终止该径迹；否则，按照反射模型将其反射，并继续传播。这种在线判定可在一次模拟中自然涵盖角分布和多次击中增强。

在此框架中，“探测到”的光子是指在 SiPIN 入射结构中成功产生可收集的初级载流子（电子-空穴对），从而对测量到的电荷信号有所贡献的光子。模拟记录每个事例中探测到的光子数 N_{det}，并将等效电子-空穴对产额定义为$N_{e\ \ hp}^{(\mathrm{sim})} \equiv N_{\mathrm{det}}$，以便构造与实验峰值比相符的可观测量（第4节）。

闪烁光子要被 SiPIN 探测到，必须无损地完成以下所有步骤：(1) 在晶体中传播且不发生自吸收（由依赖于波长的吸收长度 $L_{\mathrm{abs}}(\lambda)$描述）；(2) 在晶体表面发生折射或反射时，微观表面粗糙度不得使其偏离可到达读出面的立体角（由 σ_{surf}参数化）；(3) 直接或经多次反射后，从晶体侧面和顶面穿过晶体-空气界面逸出；(4) 撞击外壳壁时不被吸收（由反射率 ρ和朗伯漫反射模型描述）；(5) 穿过耦合层（空气或润滑脂）到达 SiPIN 入射端，在波长 λ 和入射角 θ下穿过增透膜层堆，并在硅中产生载流子（由第 $p_{\mathrm{det}}(\lambda,\theta)$ 节中的传输矩阵法2.1描述）。模拟会逐光子显式追踪这些步骤；光子可能在晶体内经历多次反射，并多次撞击 SiPIN 表面，每次撞击都根据当前的(λ,θ)独立判定。

综合考虑这些效应后，总光子-信号转换效率定义为

$$\alpha_{\mathrm{SiPIN}} \equiv \frac{N_{\mathrm{det}}}{N_{\gamma}}, \tag{2.6}$$

其中 N_{γ} 是初始闪烁光子数， N_{det} 是最终被判定为已探测到的光子数。 α_{SiPIN} 是光学模拟的最终输出，并将本征光产额 LY_{int}（闪烁体的固有属性）与实验可测的电子-空穴对产额 Y_{ehp}联系起来： $LY_{\mathrm{int}} = Y_{ehp}/\alpha_{\mathrm{SiPIN}}$ （推导见第 4节）。

在实现中，自定义边界逻辑采用“终止并重新生成”策略[4], ，以避免反射判定与 Geant4 边界过程发生冲突。

在此模拟框架中， α_{SiPIN} 的大多数输入参数均取自独立来源：传输矩阵法层堆参数 ($d_{\mathrm{AR}}, \eta_{\mathrm{IQE}}$) 来自供应商量子效率拟合（第 2.1节）；GAGG 的折射率 $n(\lambda)$、吸收长度 $L_{\mathrm{abs}}(\lambda)$ 和发射光谱来自单独的光谱测量；几何结构取自实际装置；表面粗糙度 σ_{surf} 则采用文献中抛光表面的数值。对于吸收体配置，在涂层反射率较低时，吸收占主导地位，且 α_{SiPIN} 对精确数值并不敏感（第 5.1节）；涂层供应商提供的反射率$\rho \approx 0$。6%直接用于模拟。

唯一无法独立确定的关键参数是反射器配置的壁面反射率 ρ 。高反射率涂层的性能取决于涂层工艺

[4]直接在 UserSteppingAction 中修改光子动量，可能会在同一步骤的后续阶段被 G4OpBoundaryProcess 覆盖。因此将当前径迹标记为 fStopAndKill，并将一个具有更新动量方向的新光子加入次级队列，以避免与内置边界过程发生冲突。

和腔体几何结构；在小型外壳中，很难达到文献报道的理想值；目前的装置无法进行原位角分辨反射率测量。因此，对于相同的反射器几何结构，润滑脂耦合与空气耦合之间的峰值比 $\mathcal{R}_{\mathrm{A-G}}$ 用于间接约束 ρ （第4节）。

因此，吸收体和反射体配置使用 ρ 来自完全不同来源的数值，动态范围约为20%–67%，可用于检验校准方法的可靠性（第4节）。

3 实验装置

本节介绍绝对光产额测量所用的实验设备、数据采集系统和测量流程。实验分为两个主要步骤：首先，用 ^{241}Am直接照射SiPIN，确定脉冲幅度到电子-空穴对数的绝对转换因子；随后，测量GAGG:Ce 晶体在 ^{22}Na激发下，于四种不同封装和耦合配置中的光峰响应。整个实验过程中，电子学设置保持一致，以确保校准系数可直接用于光产额推导。

3.1 样品配置和硬件系统

所研究的样品是一块 $5\times5\times5\,\mathrm{mm}^3$ GAGG:Ce闪烁晶体，具有六个光学抛光表面。晶体置于反射体/吸收体外壳内，晶体与外壳壁之间留有约2 mm的空气间隙；晶体底面通过一层耦合层与滨松 S3590-08 SiPIN 光电二极管接触。

本研究采用 2×2 两种外壳类型与两种耦合方法的组合，共形成四种配置。反射体外壳采用白色塑料3D打印制成，内壁涂覆含 TiO_2 的白色漫反射涂层；吸收体外壳与反射体外壳的几何结构相同，但采用黑色塑料3D打印制成，并通过喷笔在内壁涂覆 Musou Black Paint 超低反射率涂层[5]，，制造商标称反射率约为0.6%。两种外壳底部的内径均与 SiPIN 的外轮廓相匹配，形成机械限位，确保重复测量时外壳位置一致。这种 2×2 组合使 α_{SiPIN} 四种配置的动态范围覆盖约20%–67%，并形成两条独立的 ρ 测定路径——吸收体采用制造商参数，反射体则受实验比值约束（第4节）——以便进行后续交叉验证。润滑脂耦合使用 EJ-550 光学耦合脂（$n\approx1.46$），标称耦合层厚度为 50 μm；干式耦合不使用耦合剂，晶体直接放置在 SiPIN 环氧树脂窗口上。

SiPIN工作在74 V反向偏置下。其输出电荷脉冲首先由Cremat CR-110[6], 电荷灵敏前置放大器（CSA）转换为电压脉冲，然后送入CAEN N968[7] 成形放大器进行信号成形和增益调节（成形时间设为 2 μs）。成形后的信号

[5]Musou BlackPaint 产品页面：https://the-black-market.com/products/musou-black-paint。[6] Cremat CR-110 电荷灵敏前置放大器数据手册：https://www.cremat.com/CR-110-R2.2.pdf。[7]CAEN N968 成形放大器产品页面：https://www.caen.it/products/n968/。

由Teledyne LeCroy HDO6104B示波器采集[8]，并以直方图模式记录脉冲幅度谱。为抑制电磁干扰并降低基线噪声，前端电荷灵敏前置放大器及其输入端附近的关键电路均封装在一个厚度为5 mm、有效接地的铝制屏蔽盒内。图 6 展示了读出链的示意图。

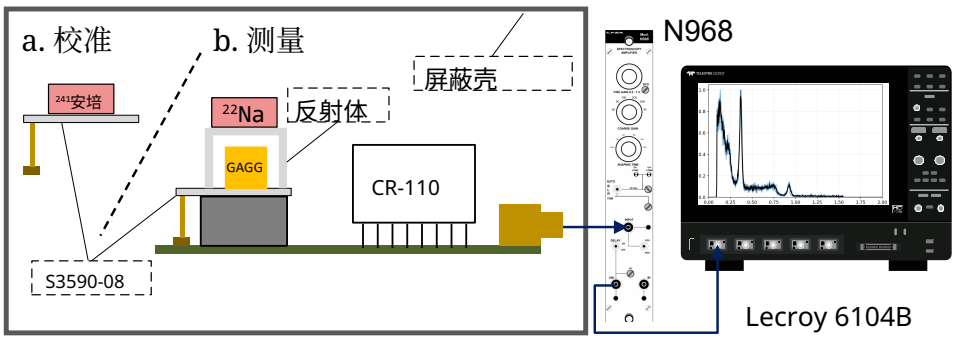


图 6：两种工作条件下的读出链。(a) 通过^{241}Am直接辐照SiPIN进行绝对电荷标定。(b) 使用GAGG:Ce晶体在 ^{22}Na激发下进行闪烁测量。两种情况下使用相同的电子学链路和设置；电荷灵敏放大器及其输入连接均置于屏蔽壳内，以抑制电磁拾取和基线噪声。

进行闪烁测量时，将 ^{22}Na光源置于外壳中心上方；切换耦合配置时，光源位置保持不变。进行电荷刻度时，移除闪烁晶体和外壳，但电路连接保持不变，并由 ^{241}Am光源直接辐照SiPIN。

3.2 电荷刻度与数据采集

系统的绝对电荷标定采用“直接辐照法”：^{241}Am光源直接辐照SiPIN，并利用其 $E_{\mathrm{Am}} = 59.54$ keV特征光子在Si灵敏层中沉积能量所形成的全能峰，建立示波器脉冲幅度（V）与等效输入电荷（或电子-空穴对数）[21, 22]之间的对应关系。假定与所选峰位相对应的感兴趣区（ROI）内电荷收集保持线性，且 W_{Si} 可用于将沉积能量转换为平均 N_{ehp}。本实验所用SiPIN的有效Si厚度约为300 μm（参见数据手册）。对全能峰进行高斯拟合，得到峰位 V_{Am}，并将峰位到电子-空穴对数的线性转换系数定义为

$$k_{ehp} \equiv \frac{N_{ehp}}{V - V_0} = \frac{N_{ehp}^{(\mathrm{Am})}}{V_{\mathrm{Am}} - V_0}, \tag{3.1}$$

其中，V_0 是读出链在无信号输入时的基线偏移（直流偏置电平），$N_e^{(\mathrm{Am})}$ hp是硅中由 E_{Am} 光子产生的电子-空穴对的平均数量。成形

[8]Teledyne LeCroy HDO6104B示波器产品页面：
https://www.teledynelecroy.com/oscilloscope/hdo6000b-high-definition-oscilloscopes/hdo6104b。

放大器在本实验中的输出基线稳定在接近零的水平（$V_0 \approx 0$），因此在后续计算中不再明确写出。在完全收集电荷的近似条件下，该值由硅的平均电离能决定 W_{Si}：

$$N_{ehp}^{(\mathrm{Am})} \simeq \frac{E_{\mathrm{Am}}}{W_{\mathrm{Si}}}, \quad W_{\mathrm{Si}} \approx 3.67\ \mathrm{eV/ehp}, \tag{3.2}$$

其中 W_{Si} 取自文献 [23]。

对于闪烁测量，^{22}Na 光源激发晶体，并在本工作采用的四种配置中均匀选取 1274.5 keV 光电峰区内的事例。将光电峰位置记为 V_{Na}，对应的电子-空穴对数由公式（3.1）计算得出：

$$N_{ehp}^{(\mathrm{Na})} = k_{ehp}\, V_{\mathrm{Na}}, \tag{3.3}$$

电子-空穴对产额定义为

$$Y_{ehp} \equiv \frac{N_{ehp}^{(\mathrm{Na})}}{E_{\mathrm{dep}}^{(\mathrm{Na})}} \quad (\mathrm{ehp/MeV}), \tag{3.4}$$

其中 $E^{(\mathrm{Na})}{}_{\mathrm{dep}}$ 是进入光电峰 ROI 的事例在晶体中的平均沉积能量。对于光电峰事件，γ 射线的全部能量都沉积在晶体中，因此 $E^{(\mathrm{Na})}{}_{\mathrm{dep}} = 1274\ keV$。

4 结果

本节介绍绝对光产额的实验测量及修正推导。首先回顾如何从实验测量量修正得到本征光产额。本征光产额定义为单位沉积能量产生的初始闪烁光子数：

$$N_\gamma = LY_{\mathrm{int}} \cdot E_{\mathrm{dep}}. \tag{4.1}$$

第 3 节确立了实验上可测量的电子-空穴对产额 $Y_{ehp} \equiv N_{ehp}/E_{\mathrm{dep}}$（方程（3.4））。将初始闪烁光子最终在 SiPIN 中产生可收集信号的总概率记为 α_{SiPIN}（方程（2.6），由 Geant4+TMM 联合模拟给出），则平均响应满足

$$N_{ehp} = N_\gamma \cdot \alpha_{\mathrm{SiPIN}}. \tag{4.2}$$

联立方程（4.1）和（4.2），消去 N_γ 并除以 E_{dep}，可得校正关系：

$$LY_{\mathrm{int}} = \frac{Y_{ehp}}{\alpha_{\mathrm{SiPIN}}}. \tag{4.3}$$

此处Y_{ehp} 完全由实验确定（^{241}Am 校准 + ^{22}Na 峰位），而α_{SiPIN} 完全由模拟确定——二者独立获得，并通过上述关系相结合，从而推断本征光产额。本节首先给出 ^{241}Am 绝对校准系数以及四种配置的实验能谱，随后利用反射器配置中的 Grease/Air 峰位比约束有效反射率ρ_{eff}，最后综合四项结果以推导 LY_{int}，并通过跨配置一致性检查验证该方法的可靠性。

4.1 ^{241}Am 电荷刻度与实验能谱

绝对电荷标定通过对 SiPIN 进行直接辐照来实施，所用源为 ^{241}Am 源。硅中由 59.54 keV γ 射线（来自 ^{241}Am）产生的电子-空穴对数目，由平均电离能决定： $N_e^{(\mathrm{Am})} h_p = E_{\mathrm{Am}}/W_{\mathrm{Si}} = 16\,223$ （公式（3.2））。对全能峰进行高斯拟合，得到测量峰位 $V_{\mathrm{Am}} = 0$。3481 ± 0。0007 V，从而给出绝对电荷标定系数：

$$k_{ehp} = \frac{N_{ehp}^{(\mathrm{Am})}}{V_{\mathrm{Am}}} = 46\,605 \text{ ehp/V}. \tag{4.4}$$

该系数用于将后续闪烁测量中的峰值电压转换为检测到的电子-空穴对数量。

随后将 $5 \times 5 \times 5$ mm^3 GAGG:Ce样品置于吸收体（$\rho = 0.6\%$）和反射体外壳中，分别采用空气与耦合脂耦合条件进行闪烁光测量，使用^{22}Na 光源（$N_{\mathrm{rep}} = 5$ 每种配置重复测量次数）。图7显示了四种配置下的 1274.5 keV 光电峰脉冲幅度谱。峰位范围从0.30 V（吸收体–空气）到1.02 V（反射体–润滑脂），变化范围超过三倍，直接反映了封装和耦合条件对光收集效率的显著影响。后续分析均基于各配置下 1274.5 keV 光电峰高斯拟合的平均值。

4.2 有效反射率的确定

如第 2.2 节所述，模拟框架中的大多数输入参数均可根据文献数据或独立测量确定，而反射器配置的有效反射率 ρ 是唯一必须通过实验约束的关键参数。为此，构建了相同几何结构下润滑脂耦合与空气耦合的峰位比：

$$\mathcal{R}_{\mathrm{A-G}} \equiv \frac{V_{\mathrm{peak}}(\mathrm{grease})}{V_{\mathrm{peak}}(\mathrm{air})}. \tag{4.5}$$

由于空气配置和润滑脂配置共用相同的电子学读出链，脉冲幅度的相对比值 $\mathcal{R}_{\mathrm{A-G}}$ 仅反映界面处折射率匹配导致的光收集效率变化。在模拟中，构建了等效比值$\mathcal{R}_{\mathrm{A-G,sim}}(\rho) \equiv \alpha_{\mathrm{SiPIN}}$(润滑脂, ρ)/ α_{SiPIN}(空气, ρ)，并发现该比值随腔壁反射率 ρ 严格单调递减（见图 8）。

这种单调依赖关系的物理根源，在于耦合介质对光子逃逸锥的调制与腔体内多次漫反射效应之间的竞争。在空气耦合（$n_{\mathrm{air}} = 1.0$）下，晶体-空气界面处的全内反射严重限制了可逃逸光子的立体角，因此透射光子偏向于小角度；而润滑脂耦合（$n_{\mathrm{grease}} \approx 1.46$）则大幅减轻了折射率失配，使角分布更宽的光子能够穿过界面，从而显著提高单次命中光收集概率。在低反射率（低 ρ）极限下，光子收集主要取决于从晶体到探测器的首次直接透射，耦合介质造成的界面透射率差异达到最大，因此 $\mathrm{R_{A-G}}$ 较高；相反，随着壁面反射率 ρ 增大，腔体内的多次漫反射会促进

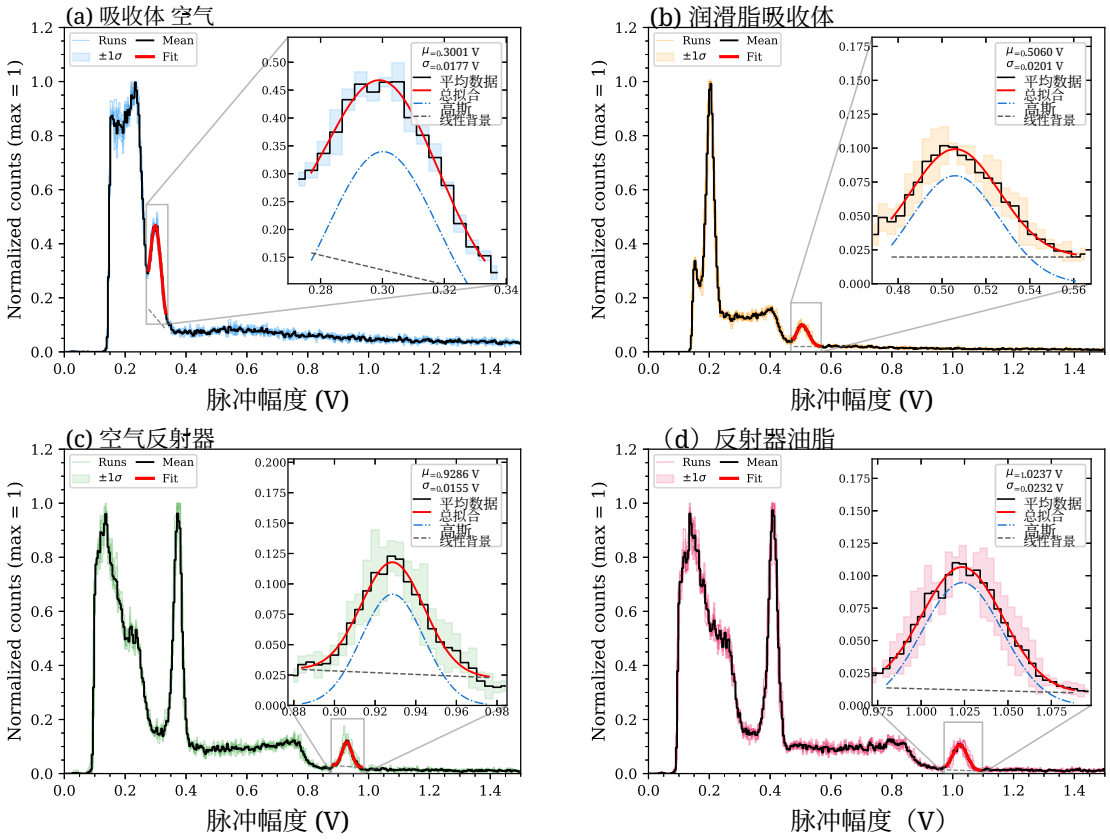


图7：钠-22在四种测量配置下的脉冲幅度谱：(a) 吸收体–空气，(b) 吸收体–润滑脂，(c) 反射体–空气，(d) 反射体–润滑脂；所有面板均采用 1274.5 keV 光电峰（$N_{\mathrm{rep}} = 5$ 每种配置）。浅色线表示各次最大值归一化运行；粗黑线表示平均值；阴影带为 $\pm 1\sigma$。红色曲线为对平均谱进行高斯 +线性拟合的结果。

完全角度随机化，并且复杂传播过程会逐渐平滑单次透射过程中的局部界面透射率差异，缩小两条路径之间的光收集效率差异，使 $\mathrm{R_{A-G}}$ 渐近趋近于 1。

反射体配置的实验测量比值为 $\mathrm{R_{A-G,\ exp}} = 1。102 \pm 0。006$。将该值与模拟扫描曲线比较，可得有效反射率：

$$\rho_{\mathrm{eff}} = 0.92 \pm 0.01. \tag{4.6}$$

该结果低于文献中理想 $\mathrm{TiO_2}$ 表面的反射率（~ 95。5% [7]），这与受限腔体中的涂层工艺限制及非理想表面损耗所带来的物理预期一致。在后续讨论中，反射体配置模拟采用 $\rho_{\mathrm{eff}} = 0。92$作为输入。

4.3 光产额测定与一致性分析

基于上一节确定的 ρ_{eff} （反射体）和制造商标定的$\rho = 0.6\%$（吸收体），为四种配置中的每一种计算 α_{SiPIN}，并推导出 LY_{int}

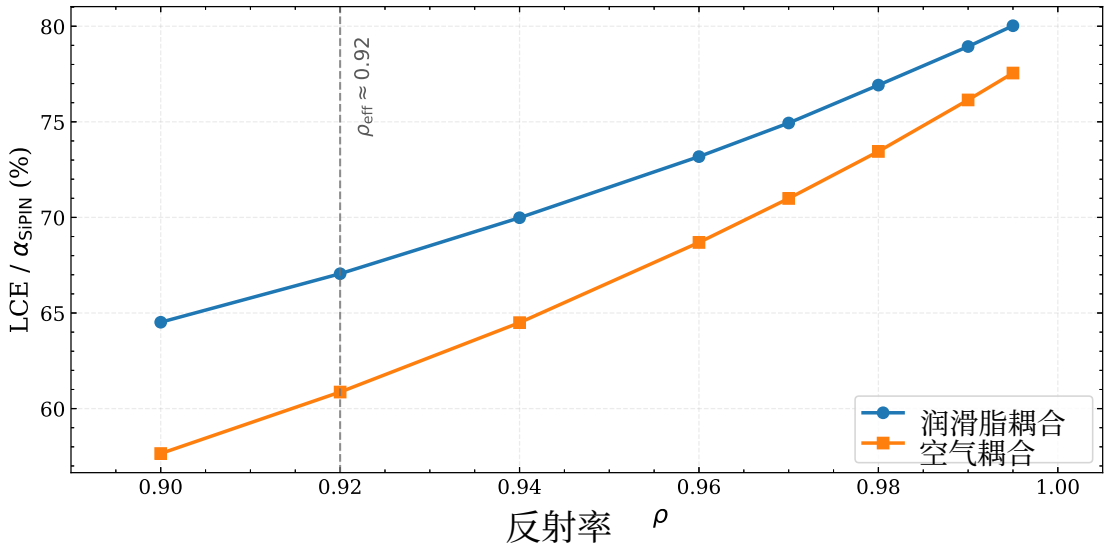


图8: α_{SiPIN} 作为反射器壁反射率 ρ 的函数。图中展示了润滑脂耦合和空气耦合条件；虚线表示由实验 $\mathrm{R_{A-G}}$ 约束的有效反射率 $\rho_{\mathrm{eff}} \approx 0。92$。

由方程（4.3）得出。表1汇总了每种配置的测量值和推导量。

表1: 四种配置的光产额测量与校正汇总（GAGG:Ce5 × 5 × 5 mm^3, S3590-08 SiPIN; ^{22}Na 1274.5 keV 光电峰, $N_{\mathrm{rep}} = 5$ 每种配置）

配置	V_{peak} (V)	α_{SiPIN} (%)	Y_{ehp} (ehp/MeV)	LY_{int} （×10^3光子/MeV）
吸收体–空气	0.3004 ± 0.0022	19.71	10 985	55.7
吸收体–润滑脂	0.5062 ± 0.0032	31.98	18 512	57.9
反射体–空气	0.9300 ± 0.0028	60.86	34 006	55.9
反射体–润滑脂	1.0244 ± 0.0042	67.03	37 458	55.9
			平均值 ± 离散度 ± 系统	(56.3 ± 1.0 ± 1.6) × 10^3

由 LY_{int} 四种配置得出的数值具有良好的一致性（图9）。LY_{int} 反射器组内空气与润滑脂之间的偏差仅为0。2%，验证了$\mathcal{R}_{\mathrm{A-G}}$ 约束方法的自洽性。更重要的是，吸收体路径与反射体路径的比较表明：两条路径的关键参数 ρ 来自完全独立的来源（制造商规格与实验约束），且所得α_{SiPIN} 涵盖的动态范围为20%–67%（相差3.4倍），但 LY_{int} 两条路径之间的偏差仅为0.4%。综合四项结果，总体变异系数（CV）为1.8%。关于这种跨配置一致性对修正方法可靠性的进一步分析见第5.2节。

综合四种配置的结果，测得GAGG:Ce样品的本征光产额为：

$$LY_{\mathrm{int}} = (5.63 \pm 0.10_{\mathrm{spread}} \pm 0.16_{\mathrm{syst}}) \times 10^4 \ \mathrm{ph/MeV} \quad (\mathrm{i.e.}\ 56.3 \pm 1.9\ \mathrm{ph/keV}). \tag{4.7}$$

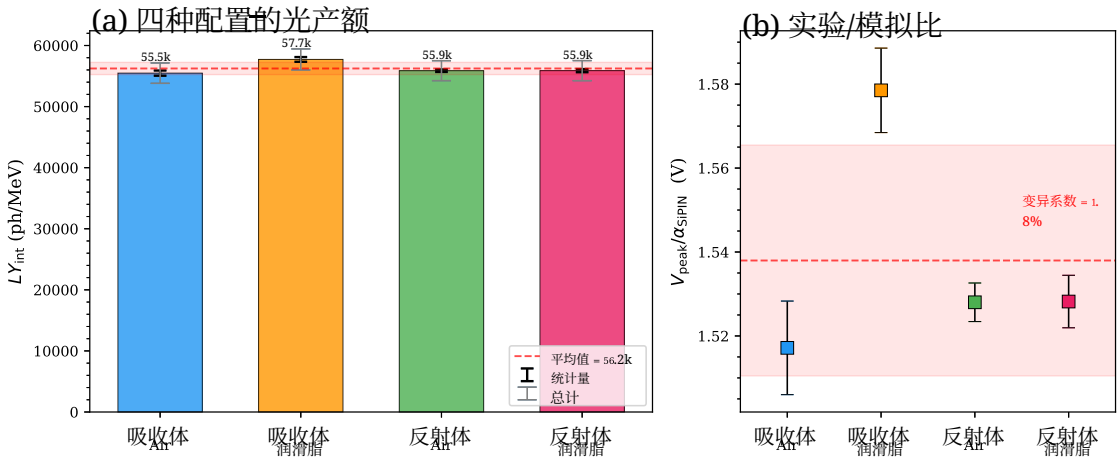


图 9：(a) 从四种测量配置中独立推导出的本征光产额 LY_{int}。误差棒：内侧（黑色）= 统计误差；外侧（灰色）= 总误差（包括 α_{SiPIN} 系统误差）。虚线：四种配置的平均值；阴影带：$\pm 1\sigma$ 离散范围。(b) 各配置的实验 V_{peak}/模拟α_{SiPIN} 比（变异系数 = 1.8%）。

第一个不确定度来自四种配置之间的差异（1030 ph/MeV），第二个不确定度则由 α_{SiPIN} 系统不确定度（±2。9%，约为1634 ph/MeV）传播而来；后者是主要贡献项（见第5.1节）。此外，在闪烁体测量中常用的反射体–硅脂配置下，模拟得出 α_{SiPIN} = 67。0%（ρ_{eff} = 0。92，S3590-08），可作为在类似几何条件下评估SiPIN读出效率的参考。

5 讨论

本节进一步分析上述测量与修正结果：首先，通过敏感性分析确定 α_{SiPIN} 的主要不确定度来源，并给出不确定度预算（第 5.1节）；随后讨论跨配置一致性对修正方法可靠性的影响（第5.2节）；最后考察不同封装边界条件对 α_{SiPIN} 的影响（第 5.3节）。

5.1 敏感性分析与系统不确定度

总不确定度 LY_{int} 由两个部分构成：实验贡献（Y_{ehp}的统计误差）和模拟贡献（ α_{SiPIN}的系统误差）。实验方面，重复测量表明，在反射体–润滑脂基线配置下，峰位 V_{peak} 的相对离散程度约为0.9%，对 LY_{int}的贡献微乎其微。模拟方面的系统不确定度主要源于α_{SiPIN} 的模型输入参数（反射率、晶体吸收长度、表面粗糙度、耦合层厚度等）。本节首先通过单变量敏感性分析确定最敏感的输入参数（图10，表2），然后为各参数指定参考不确定度范围，并进行系统不确定度评估（表3）。

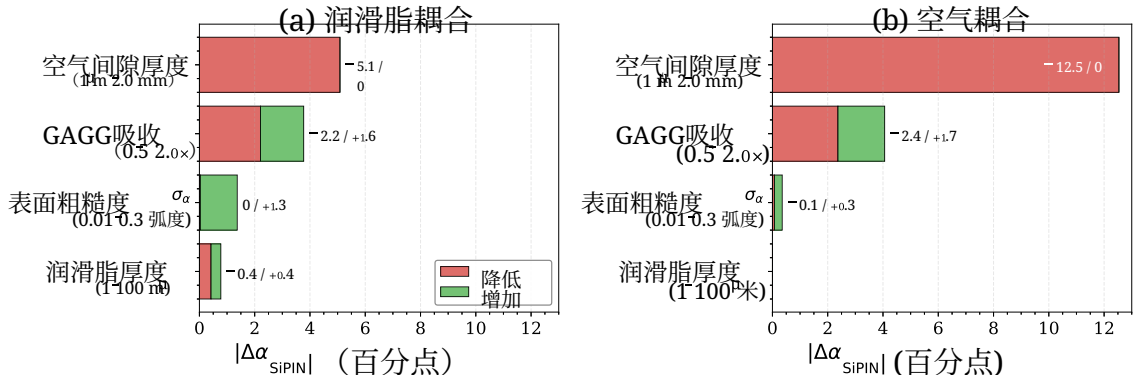


图10：关于 α_{SiPIN} 模型参数的单变量敏感性分析（龙卷风图）。左：润滑脂耦合；右：空气耦合。红色线段表示参数偏向不利端时，相较于基线配置 α_{SiPIN}的下降；绿色线段表示上升。反射器壁反射率 ρ 因量级不同而单独显示于图8 中。

表2 给出了与图10 对应的数值汇总（反射器配置，润滑脂耦合）。表中的“扫描范围”仅用于敏感性诊断，并不代表本实验中各参数的实际不确定度范围。

表 2：单变量敏感性分析结果（反射器配置、润滑脂耦合；用于诊断最敏感的输入，而非用于不确定度预算）

参数	扫描范围	基线	α_{SiPIN} 范围 (%)	半范围
反射器壁反射率 ρ	0.90–0.995	0.92	64.5–80.0	±7.8
GAGG本征自吸收（d_{path}）	554–2215 mm	1108 mm	64.8–68.6	±1.9
空气间隙厚度	0.001–2.0 mm	2.0 mm	62.0–67.1	±2.5
表面粗糙度 σ_{surf}	0.01–0.3 弧度	0.02 弧度	67.0–68.4	±0.7
润滑脂厚度	1–100 μm	50 μm	66.6–67.4	±0.4

敏感性分析表明，反射器壁反射率 ρ 对α_{SiPIN}的影响最大。如图8所示， α_{SiPIN} 随 ρ增加而增加，在 ρ = 090–0.995范围内变化约15.5个百分点。在 ρ = 0.92附近， ρ 降低1%会使α_{SiPIN} 降低约1.3个百分点。其机制如下：在非紧密包裹式漫反射腔中，光子通常会在到达读出表面之前经历多次反射；当每次反射的吸收概率为（1 – ρ）时，随着平均反射次数增加（估计约为$\rho^{N_{\mathrm{bounce}}}$），累积损失会显著放大。

ρ 还决定模拟润滑脂/空气比 $R_{A-G,\mathrm{sim}}$。有效反射率 ρ_{eff} =0.92 ± 0.01 由实验值 $R_{A-G,\mathrm{exp}}$ = 1.102 ± 0.006（公式（4.6））约束。取 $\rho_{\mathrm{eff}} \approx 0.92$为代表值，采用0.91–0.93作为参考不确定度范围（对应 $\Delta\rho = \pm 0.01$，产生 $\Delta\alpha \approx \pm 1.4$个百分点的变化）。

相比之下，吸收体配置下的响应（$\rho < 5\%$）明显不同。

图11展示了 ρ 在0–5%范围内的 α_{SiPIN} 扫描结果：对于润滑脂耦合， α_{SiPIN} 仅在31.9%至32.5%之间变化（总跨度为0.5个百分点）；对于空气耦合，则在19.7%至20.3%之间变化（跨度为0.6个百分点）。在 $\rho_{\mathrm{abs}} \approx 0.6\%$附近， ρ 变化1%仅使 α_{SiPIN}改变约0.1–0.2个百分点，比反射体配置下的灵敏度低一个数量级。这种不敏感性源于吸收体腔内的光子主要沿直射路径到达SiPIN，多次反射的贡献可以忽略； ρ的变化只会影响经外壳反射后到达SiPIN的少量间接光子，因此对总 α_{SiPIN}影响甚微。这一结论也证实了吸收体配置用于 α_{SiPIN} 校正的稳健性：即使外壳反射率存在较大的校准不确定性，对推算光产额的影响也不超过0.5%。因此，涂层工艺和流程的变化对 α_{SiPIN}可以忽略，供应商指定的$\rho \approx 0.6\%$可直接用作模拟输入。

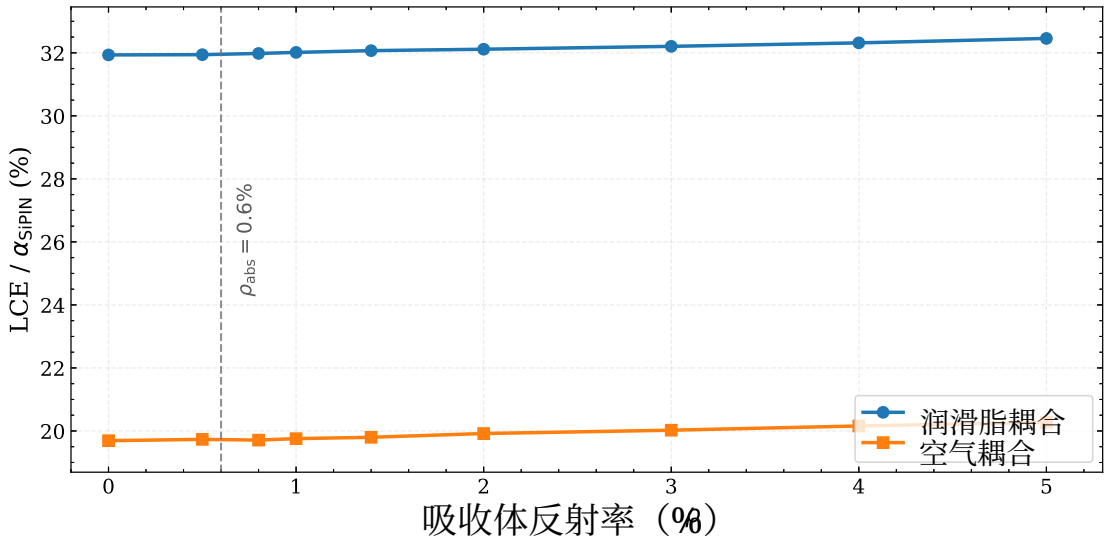


图11：在 α_{SiPIN} 随外壳反射率 ρ 在吸收体配置（ρ = 0–5%）下的变化。虚线表示 ρ_{abs} = 0。6% 为本实验中采用的值。与图8所示反射器配置中的强依赖性相比， α_{SiPIN} 在吸收体配置中对 ρ 几乎不敏感。

第二个影响最显著的因素是晶体自吸收。由于 GAGG:Ce 具有较大的斯托克斯位移，其发射光谱与吸收光谱之间的重叠较小，因此是一种自吸收较弱的材料。为方便起见，波长相关吸收长度 $L_{\mathrm{abs}}(\lambda)$ 用单个参数表征，光谱加权的自吸收比例定义为

$$J(\ell) = \int F(\lambda) \left[1 - \exp\left(-\frac{\ell}{L_{\mathrm{abs}}(\lambda)}\right)\right] \mathrm{d}\lambda, \tag{5.1}$$

其中 F（λ）为归一化发射光谱。特征光程 d_{path} （亦记为$d_{1/e}$）进一步由$1/e$ 约定定义（满足 J（d_{path}） $= 1 - 1/e$）。图12 表明，即使当 d_{path} 在很宽的范围内变化，即554–2215 mm（基线 d_{path} = 1108mm，覆盖从典型样品到高透明度样品）， α_{SiPIN} 的变化仅为约 ±1.9 个百分点。

这表明，对于小型GAGG样品，校正结果对吸收系数的测量误差不敏感。

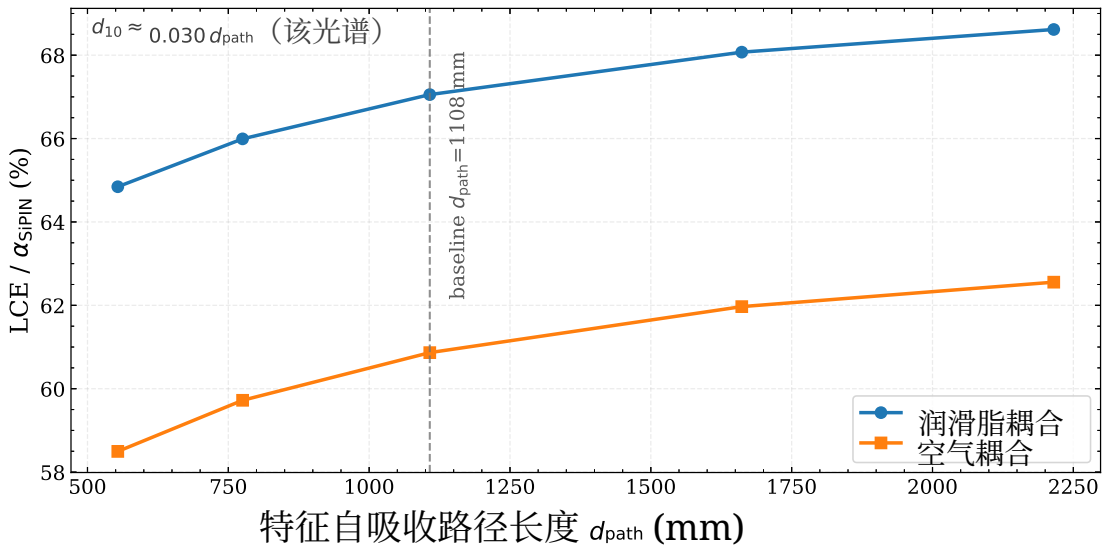


图12： α_{SiPIN} 随GAGG本征自吸收特征光程d_{path}的变化。 d_{path} 越小，表示自吸收越强。

表3总结了 α_{SiPIN} 在反射器配置（润滑脂耦合）下的系统不确定度。占主导地位的项是反射器壁反射率 ρ，通过实验比值$\mathrm{R_{A-G}}$将其约束为$\rho_{\mathrm{eff}} = 0.92 \pm 0.01$，对应于 $\delta\alpha/\alpha \approx \pm 2.0\%$。其余光学参数（吸收长度、空气间隙厚度、表面粗糙度、耦合层厚度）的贡献均不超过1.5%。TMM等效模型的模型不确定性评估约为0.37%（见第2.1节），保守取为±0.4%。将各项上限按平方和开方合并后， α_{SiPIN} 的综合系统不确定度约为 ±2.9%，低于传统基于PMT相对法的绝对光产额测量 [22]中典型的 ±5%水平。

对 LY_{int}的不确定度进行传播时，根据公式（4.3），相对不确定度的一阶近似为：

$$\left(\frac{\sigma_{LY_{\mathrm{int}}}}{LY_{\mathrm{int}}}\right)^2 \simeq \left(\frac{\sigma_{Y_{ehp}}}{Y_{ehp}}\right)^2 + \left(\frac{\sigma_{\alpha_{\mathrm{SiPIN}}}}{\alpha_{\mathrm{SiPIN}}}\right)^2 . \tag{5.2}$$

这里，$\sigma_{Y_{ehp}}$ 源于Y_{ehp}的实验不确定度，而 $\sigma_{\alpha_{\mathrm{SiPIN}}}$ 源于 α_{SiPIN}的系统不确定度。比较实验统计误差（~ 0.9%）与模拟系统误差（~ 2.9%，表3）， LY_{int} 的总不确定度主要由 α_{SiPIN}的系统贡献决定。此外，所有测量均基于单一能量点（1274.5 keV 的 ^{22}Na 光电峰），因此无需进行非比例性修正。

5.2 修正方法的验证

四种实验测量配置之间达到1.8%的水平一致性，从内部自洽性和跨边界条件验证两个方面验证了修正方法的可靠性：内部自洽性和跨

表3：α_{SiPIN}（反射体，润滑脂耦合）的系统不确定度预算。

光源	范围	$\delta\alpha/\alpha$	约束
壁面反射率 ρ	0。92 ± 0。01	±2.0%	实验 $\mathrm{R_{A-G}}$
GAGG吸收（d_{path}）	±30%	±1。5%	弱自吸收
空气间隙厚度	1–3 毫米	< 1%	几何公差
粗糙度 σ_{surf}	0.01–0.1 弧度	< 0。5%	抛光；全反射主导
润滑脂厚度	10–100 μm	< 0。5%	折射率匹配
TMM 模型	AR + 线性 $T_{\text{环氧树脂}}$	±0.4%	见第2.1节
合计	±2.9%（平方和）		

边界条件验证。首先，在反射器路径内，有效反射率的校准 ρ_{eff} 仅依赖于不同耦合介质下的相对比值$\mathrm{R_{A-G}}$，从而将潜在的系统偏差与绝对电子学增益解耦。在这一约束下，反射器组内空气与耦合脂耦合所得 LY_{int} 的相对偏差仅为0.2%，证实了单一反射器几何结构下模型的自洽性。

其次，吸收体配置与反射器配置之间的交叉比较为该模型提供了独立且严格的检验。这两种光学边界条件对模型参数表现出显著不同的灵敏度分布：吸收体组的 α_{SiPIN}（20%–32%，$\rho = 0.6\%$）主要由晶体到SiPIN的直射光子主导，因此对低至中等入射角范围内 $p_{\mathrm{det}}(\lambda, \theta)$ 的取值较为敏感；而反射器组的 α_{SiPIN}（61%–67%）强烈依赖于多次漫反射，其探测效率对大角度区间的 ρ_{eff} 和 p_{det} 更为敏感。由于没有任何单一参数的系统偏差能够同时补偿这两条具有正交灵敏度特性的读出路径（例如，大角度 p_{det} 的偏差会显著影响反射体，但对吸收体几乎没有影响），由这两种独立参数化配置得到的光产额一致性，证明了该模拟框架在处理复杂角分布和多界面反射输运方面的准确性。

最后，对组间偏差物理起因的分析进一步证实了该模型的合理性。在吸收体腔中，集光主要依靠直射路径，缺少多次漫反射带来的角度平均效应，因此系统对晶体位置偏差和局部耦合状态更加敏感；而在反射器腔体中，多次漫反射能有效平滑几何不对称性的影响。实验结果显示，吸收体–润滑脂组的光产额高出 +2。7%，这符合以下物理预期：在低反射率边界下，局部装配波动会被放大；而反射器集光方案则表现出更好的测量重复性。

5.3 包装边界条件的影响

为评估该方法在不同包装条件下的适用性，本节比较了 α_{SiPIN} 在两种典型边界条件下的表现：反射体（带空气间隙的反射外壳）和特氟龙包裹（无空气间隙的紧密包裹）。

在反射器配置（本研究的实验基准）中，晶体与反射层之间存在毫米级的空气间隙。空气间隙使晶体侧面和顶面

满足全反射条件，因此光子能够在晶体内部传播，并通过多次反射减少界面损耗；只有进入逃逸锥的光子才会离开晶体并与反射体相互作用。这一边界条件解释了为什么表面粗糙度 σ_{surf} 对 α_{SiPIN} 在此配置下影响较小（见表2，变化幅度为 <0。5%）：当全内反射占主导时，光子与有损耗反射体接触的频率会降低，因此粗糙度对角度随机化的影响也相应减弱。

相比之下，特氟龙紧密包裹（空气间隙 $\sim 1\,\mu\mathrm{m}$）使晶体表面与反射体进入近场耦合区，部分削弱了原本受全内反射保护的角度范围。为近似模拟“局部接触与局部空气层并存”的封装状态，引入接触比例 (p, t)，用以表示晶体侧面和顶面与反射体直接接触的面积比例。在模拟中，每当光子击中侧面（顶面）时，便按概率 p (或 t) 随机抽样，以确定相互作用是否通过直接接触发生：若是，则采用聚四氟乙烯（即特氟龙）的反射率和朗伯漫反射模型处理；否则，Geant4 将其作为晶体–空气界面菲涅耳过程处理（满足临界角条件时发生全内反射）。在此扫描中，晶体表面粗糙度通过 UNIFIED 模型参数 σ_{surf}实现，其作用主要体现在非接触的晶体–空气间隙边界上，用于表征微面元法线展宽导致的角度随机化。图 13展示了在上述模型下 α_{SiPIN} 随接触比例 (p, t) 和 σ_{surf} 的变化；此项扫描旨在量化封装边界效应对 α_{SiPIN}的影响幅度及作用机制，并非本文主要测量结论的一部分。

表4：特氟龙紧密包裹的 α_{SiPIN} 汇总（不同的 σ_{surf}，聚四氟乙烯反射率为97.5%，空气间隙为 = 1 μ米）

σ_{surf}（弧度）	耦合	α_{SiPIN} 范围（%）	最佳（p，t）	最差（p，t）	最大变化
0.02	润滑脂	69.3–73.8	(0.4, 0.0)	(1.0, 1.0)	4.5%
0.02	Air	54.6–64.7	(0.2, 0.0)	(1.0, 1.0)	10.1%
0.1	润滑脂	69.3–74.3	(0.2, 0.0)	(1.0, 1.0)	5.0%
0.1	Air	54.7–65.5	(0.0, 0.0)	(1.0, 1.0)	10.8%
0.2	润滑脂	69.4–75.7	(0.0, 0.0)	(1.0, 1.0)	6.3%
0.2	Air	54.6–67.6	(0.0, 0.0)	(1.0, 1.0)	12.9%

从图13可以观察到以下规律。对于所有 σ_{surf}，最差点均出现在 $(p, t) = (1, 1)$，即侧面和顶部表面均完全接触。可以从有损反射的累积效应来理解这一趋势：当所有表面都与聚四氟乙烯直接接触时，光子的每次界面反射都会伴随 $(1 - \rho)$ 吸收损耗，全内反射实际上被抑制，损耗会在多次反射中显著累积。相比之下，低 σ_{surf} $(\leq 0.1$ rad) 时的最佳点位于 $(p, t) \approx (0.2–0.4, 0)$ 附近，这表明适度的侧面接触有助于通过漫反射改变角分布，并提高光子到达读出表面的概率，同时顶部保留空气间隙则可使全内反射充当低损耗“镜面”；当 σ_{surf}增至 0.2 rad 时，最佳点移至 (0, 0)，即完全不接触——此时，晶体表面的微面散射已能提供足够的角度混合，额外的聚四氟乙烯接触只会增加吸收损耗。

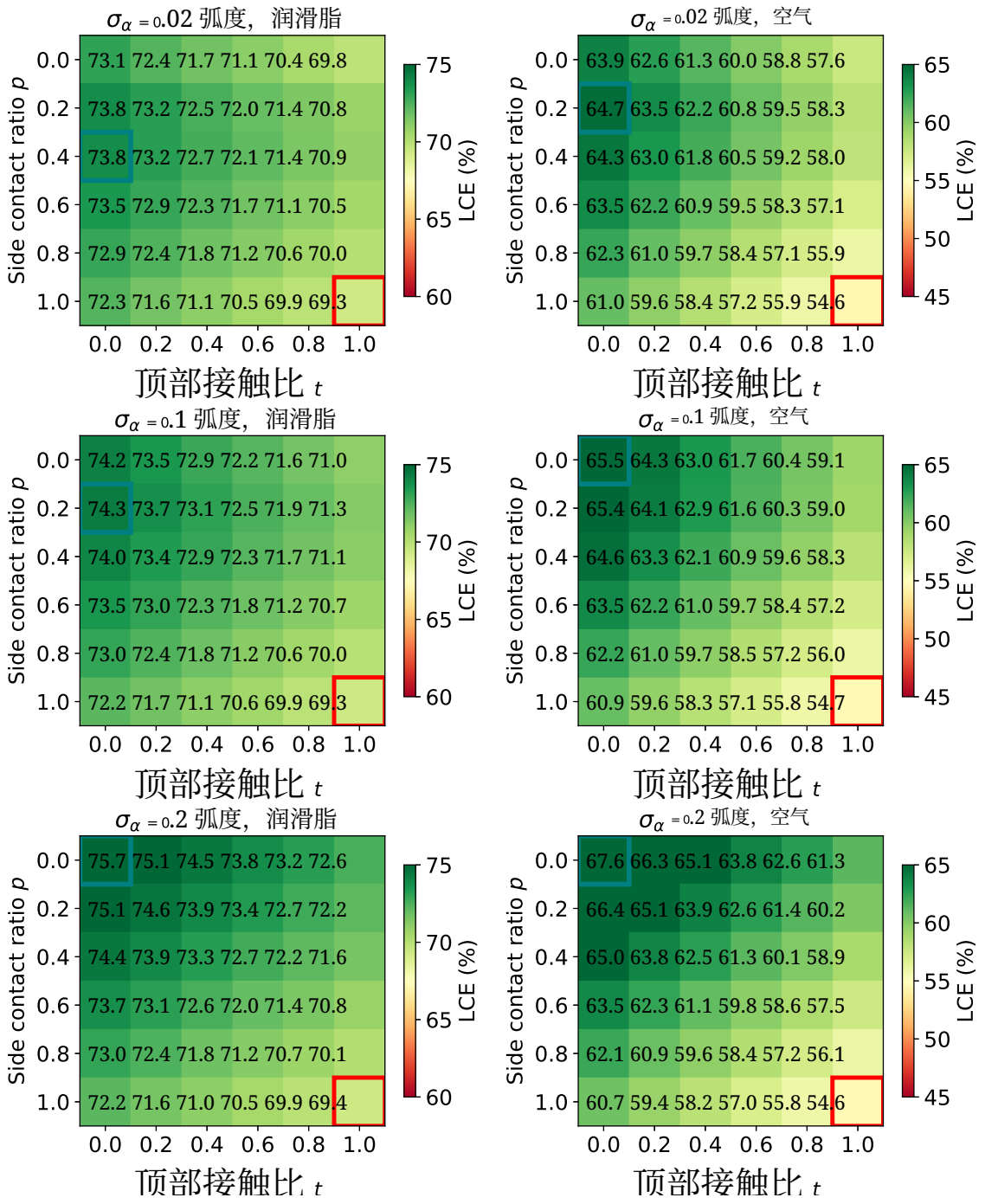


图13：在特氟龙紧密包裹条件下，α_{SiPIN} 随侧面接触分数 p、顶部接触分数 t和表面粗糙度 σ_{surf} 变化的热图（聚四氟乙烯反射率为97.5%，空气间隙为 = 1 μm）。颜色刻度对应 α_{SiPIN} （%）。绿色和红色方框分别标记各情况下最佳和最差的接触条件。

结果表明，当 σ_{surf} 从 0.02 rad 增至 0.2 rad 时，α_{SiPIN} 对接触状态的敏感性实际上有所增加：润滑脂耦合下的最大变化幅度从 4.5% 增至 6.3%，空气耦合下则从 10.1% 增至 12.9%。其机制在于，较大的 σ_{surf} 会显著提高非接触区（保留空气间隙）中的 α_{SiPIN}——例如，空气耦合情况下的 (0,0) 点从 64.7% 增至 67.6%——而完全接触的 (1,1) 点处的 α_{SiPIN} 几乎不随 σ_{surf} 变化（保持在 $\sim 54.6\%$），因此最佳点与最差点之间的差距扩大。从物理角度看，较大的 σ_{surf}会使微面法向分布变宽，在保留空气间隙的界面上产生更有效的角度随机化，使更多光子从逃逸锥散射回晶体，最终到达读出表面；在完全接触的界面上，无论 σ_{surf}如何，光子始终直接与聚四氟乙烯相互作用，粗糙度不再起到保护作用。

本节的封装扫描旨在揭示不同边界条件下 α_{SiPIN}变化的幅度及其主要机制，并避免将基线配置的校准与验证结果直接外推至所有封装几何。对于带空气间隙的反射体型封装，α_{SiPIN} 的不确定性主要由反射率 ρ 和空气间隙几何公差决定；对于紧包封装，接触状态与表面粗糙度之间存在强耦合，相关不确定性较难用单一参数表征。因此，为了实现可控且可复现的绝对测量，采用几何约束且空气间隙明确的反射外壳结构，通常更有利于获得稳定、可追溯的装配条件。

6 结论

本文建立了一种基于 SiPIN 的绝对光产额标定方法，将传输矩阵法（TMM）与 Geant4 模拟相结合。该方法利用 TMM 将制造商提供的标准量子效率（QE）重构为依赖角度和波长的单次命中探测概率 $p_{\mathrm{det}}(\lambda,\ \theta)$，随后将其动态整合到 Geant4 光学输运中。该框架在宏观输运模拟中，以物理自洽的方式处理大角度入射、多次界面命中以及耦合介质变化对探测器响应的影响。

使用一块 $5\times5\times5\ \mathrm{mm}^3$ GAGG:Ce 晶体进行了系统的实验验证。依据来自 ^{241}Am 光源的绝对电荷标定参考，沿着两条光学特性不同、参数来源完全正交的路径进行了交叉核验：低反射率（吸收体，$\rho\approx0.6\%$）和高反射率（反射体，通过原位测量将其约束为 $\rho_{\mathrm{eff}}=0.92\pm0.01$）。尽管四种配置的 α_{SiPIN} 值跨越了 20% 至 67% 的较大动态范围，但各独立配置得出的本征光产额在跨配置比较时表现出极佳的一致性（变异系数仅为 1.8 %）。测得 GAGG:Ce 的本征光产额为 $LY_{\mathrm{int}}=(5.63\pm0.10_{\mathrm{spread}}\pm0.16_{\mathrm{syst}})\times10^4$ ph/MeV（即 56.3 ± 1.9 ph/keV）。系统不确定度评估表明，目前总系统不确定度为 $\pm2.9\%$，其主要受限于高反射率腔体有效反射率约束的精度；与此同时，模型对耦合层厚度和表面粗糙度等局部几何参数表现出良好的稳健性。

本文建立的校准方法具有明确的适用条件 :
闪烁体发射光谱和体吸收必须能够独立表征,

探测器窗口响应必须有外部数据约束，测量装置也必须采用可重复的宏观组装。对于紧密包覆系统（例如特氟龙），界面接触比例与微观表面粗糙度之间的强耦合很容易引入系统偏差，且难以用单一参数进行表征；这类情况下的实际适用性仍有待进一步探索。原则上，该方法适用于其他闪烁体材料（例如 LYSO:Ce、$LaBr_3$:Ce）和硅基光探测器系统。特别是对于 SiPM阵列读出，由于光子探测效率也具有很强的角度依赖性，可以用 SiPM 的等效微单元响应模型替代 TMM层模型，并沿用本文建立的 Geant4 几何输运和实验约束策略。当需要更高的绝对精度时，对反射体反射率和界面状态的独立约束以及原位表征仍是主要限制因素。

致谢

本工作部分得到国家重点研发计划（项目编号：2022YFA1601900）、国家自然科学基金委员会（国家自然科学基金委员会）项目编号11925504和W2443007以及北京大学教职工启动基金的资助。

参考文献

[1] *I.V. Kilimchuk, V.A. Tarasov*和*I.D. Vlasova*，《闪烁体表面粗糙度对光收集的影响研究》，*Radiation Measurements 45 (2010) 383*。[2] *C. Bircher*和*Y. Shao*，《晶体表面处理和几何结构对单个*LYSO*闪烁体探测器性能的影响：用于硅光电倍增管深度交互测量》，*Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment 693 (2012) 236*。[3] *P. Barton*、*D. Wehe*、*C. Stapels*和*J. Christian*，《用于小面积硅光电倍增管读出的闪烁体几何结构与表面处理》，载于*2007*年*IEEE Nuclear Science Symposium Conference Record*，第*2*卷，第*1269–1274*页，*2007*年*10*月，*DOI*。[4] *M. Janecek*和*W.W. Moses*，《*BGO*晶体表面的光反射率测量》，*IEEE Transactions on Nuclear Science 55 (2008) 2443*。[5] *M. Janecek*和*W.W. Moses*，《利用测量的光学反射率模拟闪烁体光收集》，*IEEE Transactions on Nuclear Science 57 (2010) 964*。[6] *M. Janecek*和*W.W. Moses*，《常用反射体的光学反射率测量》，*IEEE Transactions on Nuclear Science 55 (2008) 2432*。[7] *M. Janecek*，《常用反射体的反射率光谱》，*IEEE Transactions on Nuclear Science 59 (2012) 490*。[8] *T.C. Larason*，《光谱辐射探测器测量：用于光谱功率测量的紫外、可见光和近红外探测器》，技术报告*NIST Special Publication 250-41e2008*，美国国家标准与技术研究院（*NIST*）（*2008*），*DOI*。[9] *J.T.M. de Haas*、*P. Dorenbos*和*C.W.E. van Eijk*，《闪烁体绝对光产额的测量》，*Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment 537 (2005) 97*。

[10] *J.T.M. de Haas*和*P. Dorenbos*，《闪烁体产额校准的进展》，*IEEE Transactions on Nuclear Science 55 (2008) 1086*。[11] *H.A. MacLeod*和*H.A. Macleod*，《薄膜光学滤光片》，*CRC*出版社，博卡拉顿，第*4*版（*2010*年*3*月），*10.1201/9781420073034*。[12] *S.J. Byrnes*，《多层光学计算》，*2020*年*12*月。*10.48550/arXiv.1603.02720*。[13] *M.A. Green*，《*300 K*时本征硅的自洽光学参数（包括温度系数）》，《太阳能材料与太阳能电池》*92 (2008) 1305*。[14] *H.R. Philipp*，《氮化硅的光学性质》，《电化学学会志》*120 (1973) 295*。[15] *T.R. Gentile*、*S.W. Brown*、*K.R. Lykke*、*P.S. Shaw*和*J.T. Woodward*，《硅光电二极管内量子效率建模》，《应用光学》*49 (2010) 1859*。[16] *S. Agostinelli*、*J. Allison*、*K. Amako*、*J. Apostolakis*、*H. Araujo*、*P. Arce*等，《*Geant4*——一种模拟工具包》，*Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment 506 (2003) 250*。[17] *J. Allison*、*K. Amako*、*J. Apostolakis*、*P. Arce*、*M. Asai*、*T. Aso*等，《*Geant4*的最新进展》，*Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment 835 (2016) 186*。[18] *N.S. Kozlova*、*O.A. Buzanov*、*V.M. Kasimova*、*A.P. Kozlova*、*E.V. Zabelina*和*V.N. Shishkov*，《单晶$Gd_3Al_2Ga_3O_{12}$:*Ce*的光学特性》，《现代电子材料》*4 (2018) 7*。[19] *P. Gumplinger*和*J. Apostolakis*，*"GEANT4*中的光学光子过程*"*。*Geant4*用户研讨会，*SLAC*，*2002*年。[20] *S. Jungmann*，《新型探测器技术的开发——利用硅光电倍增管进行切伦科夫光读出》，毕业论文，海德堡鲁普雷希特-卡尔斯大学，德国海德堡，*2011*年。[21] *L.J. Meng*、*D. Ramsden*、*V.M. Chirkin*、*V.N. Potapov*、*O.P. Ivanov*和*S.M. Ignatov*，《用于伽马射线能谱学的大型球形*CsI(Tl)*闪烁计数器的设计与性能》，*Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment 485 (2002) 468*。[22] *M. Moszynski*、*M. Kapusta*、*M. Mayhugh*、*D. Wolski*和*S. Flyckt*，《闪烁体的绝对光输出》，。[23] *G.F. Knoll*，《辐射探测与测量》，*Wiley*，第*4*版（*2010*）。